Méthodes de recherche directe

Motivation:

- Fonction objectif obtenue par expérience ou simulation
- Dérivées analytiques indisponibles
- Pour les dérivées secondes : quasi-Newton
- Pour les dérivées premières :
  1. différences finies
  2. différentiation automatique
  3. méthodes sans dérivée

Méthodes de recherche directe

Méthodes sans dérivée

- Modèles interpolants
- Recherche directe
  1. Nelder-Mead
  2. Torczon

Nelder-Mead

- Nelder, J.A. and Mead, R. (1965)
- Appelée parfois Méthode du simplexe
- Ne pas confondre avec l'algorithme du simplexe en programmation linéaire

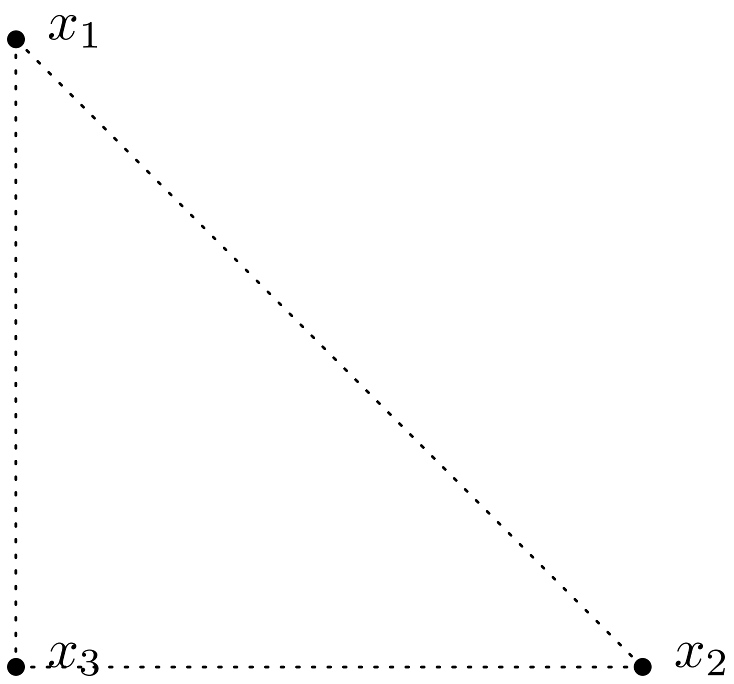
Nelder-Mead

Simplexe

Un simplexe de dimension k est l'enveloppe convexe de $k+1$ vecteurs $x_1,\ldots,x_{k+1}$ de $\mathbb{R}^n$, $k \leq n$, affinement indépendants, c'est-à-dire que les k vecteurs $x_1 - x_{k+1}$, $x_2 - x_{k+1}$, $\ldots$, $x_k - x_{k+1}$ sont linéairement indépendants.

Par exemple, trois points non alignés dans $\mathbb{R}^2$, ou quatre points non coplanaires dans R^3 sont affinement indépendants, et définissent des simplexes de dimension 2 et 3, respectivement.

Nelder-Mead



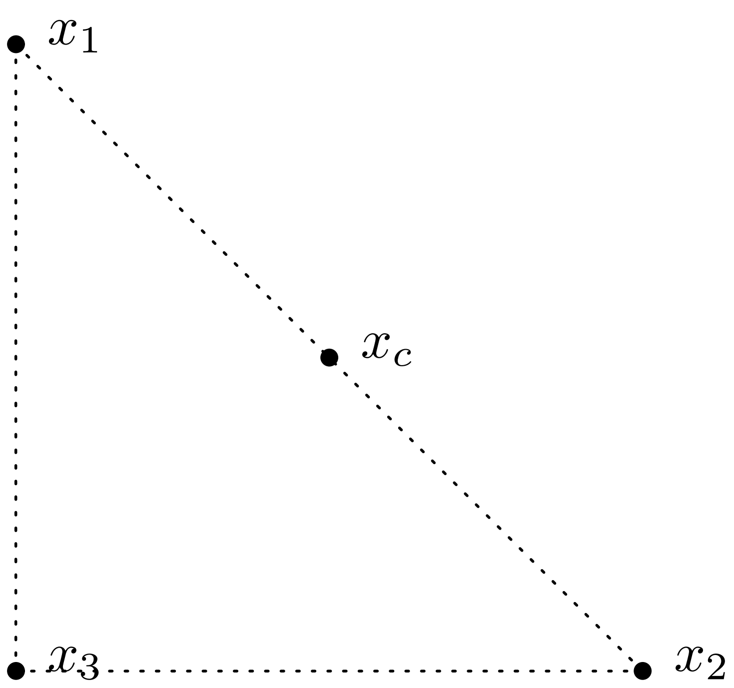
Nelder-Mead

- Choisir $n+1$ points affinements indépendants $x_1, \ldots, x_{n+1}$
- Ils forment un simplexe
- Numéroter de telle manière que

$$f(x_1) \leq f(x_2) \leq \cdots \leq f(x_{n+1}).$$

- A chaque itération, remplacer le moins bon point par un point meilleur
- Calcul du centre de gravité des autres points du simplexe : $x_c = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i$.

Nelder-Mead



Nelder-Mead

- Direction :

$$d = x_c - x_{n+1}.$$

- Pas dans la direction : prédéfini

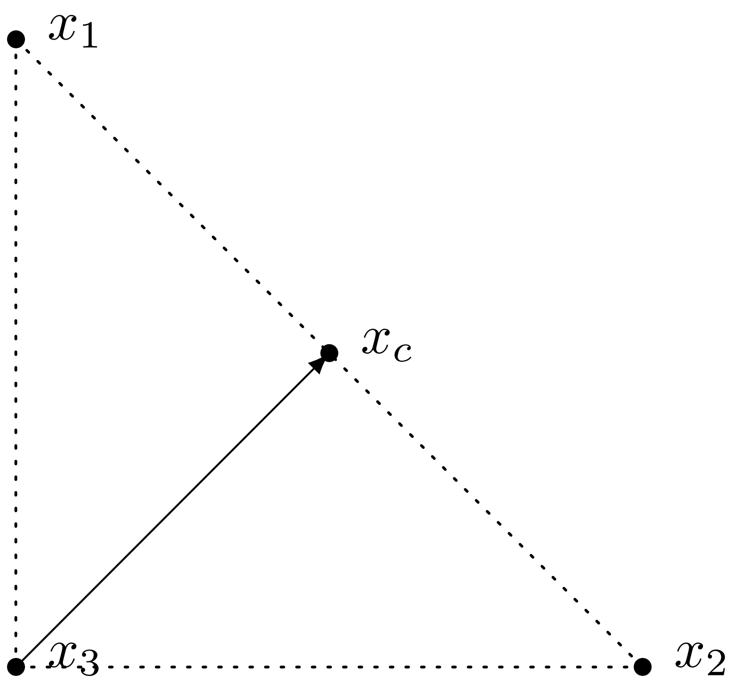
$$\alpha = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, 3$$

- Point qui remplace x_{n+1} :

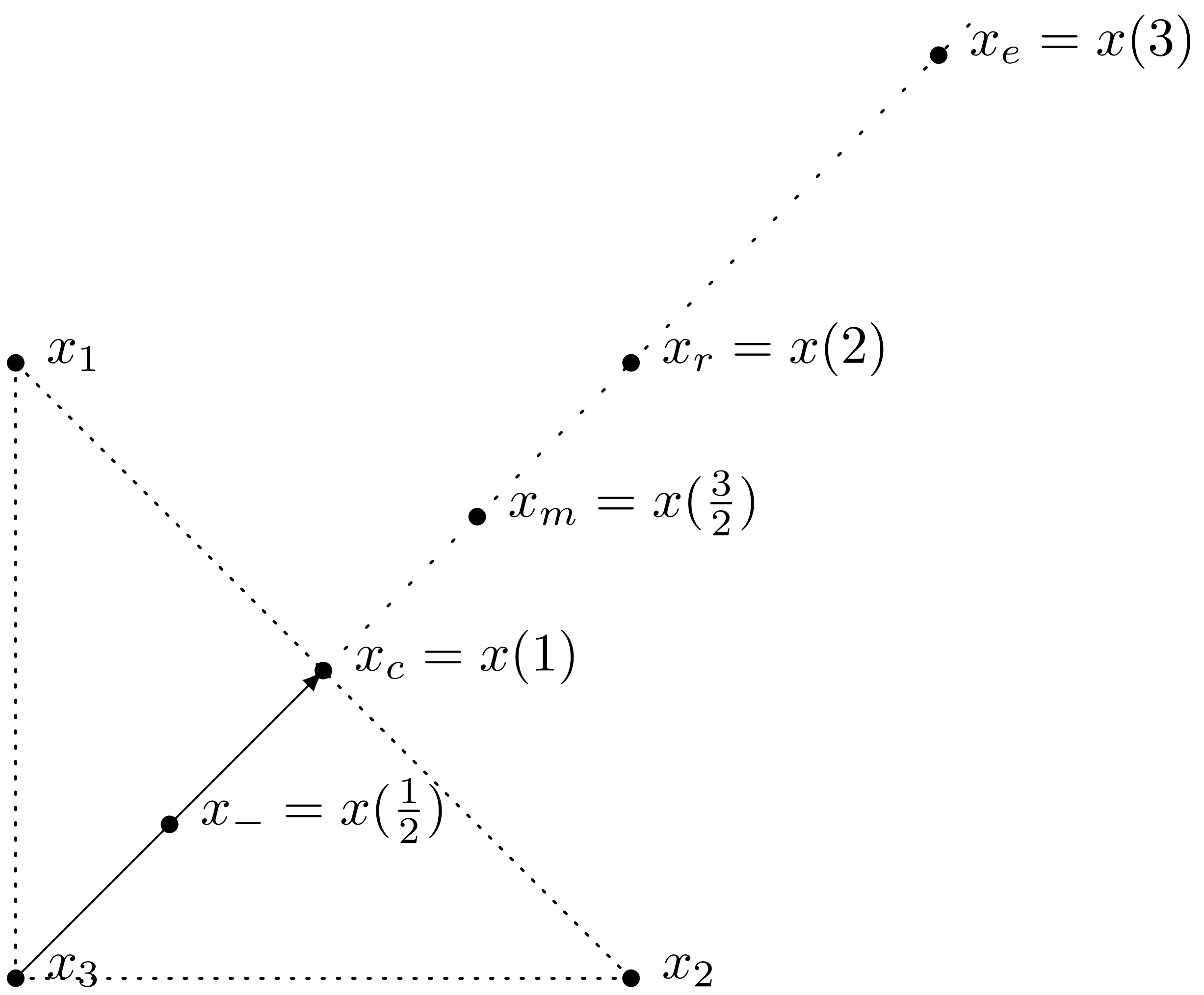
$$x(\alpha) = x_{n+1} + \alpha d = (1 - \alpha) x_{n+1} + \alpha x_c.$$

- On obtient un nouveau simplexe et on recommence

Nelder-Mead

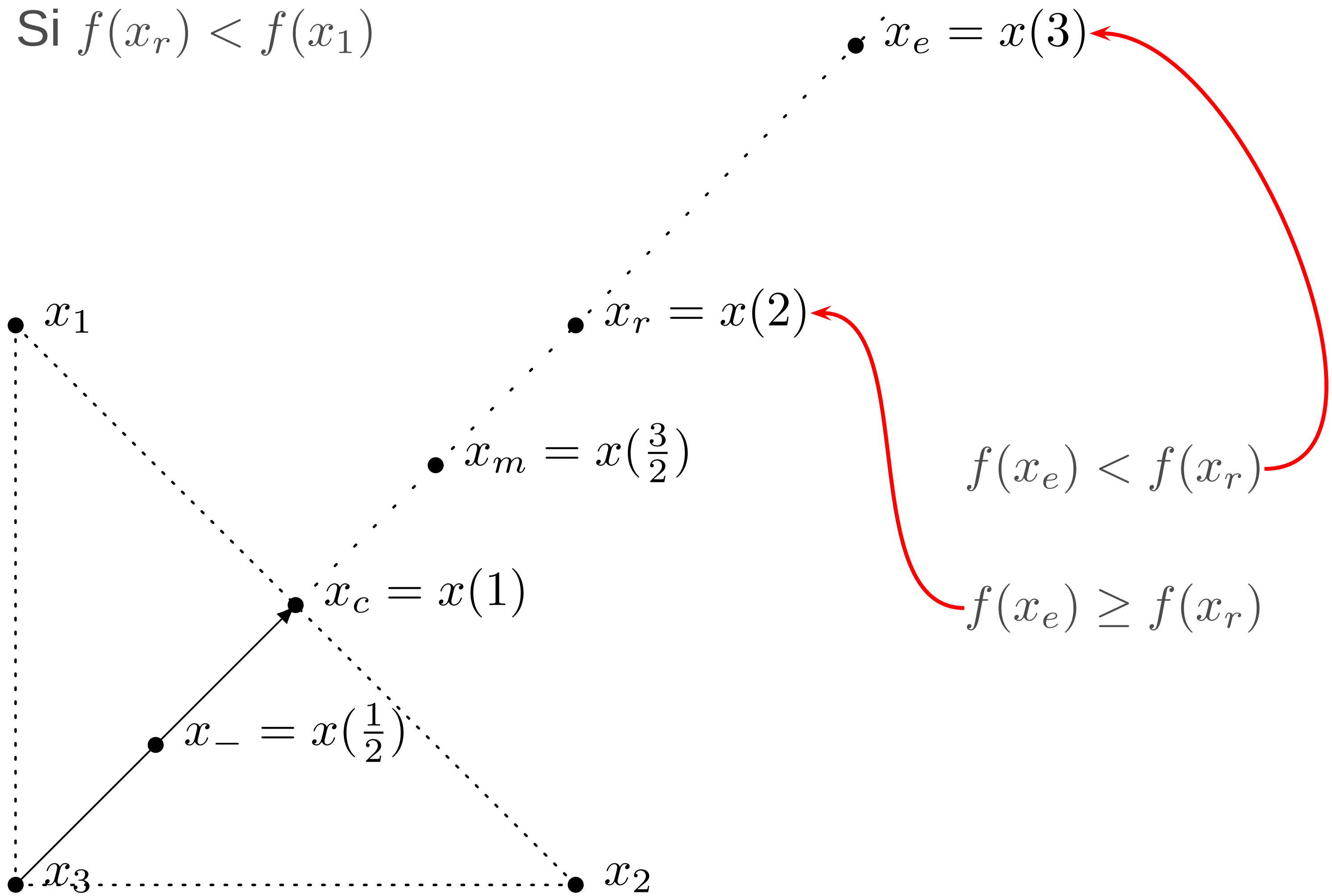


Nelder-Mead



Nelder-Mead

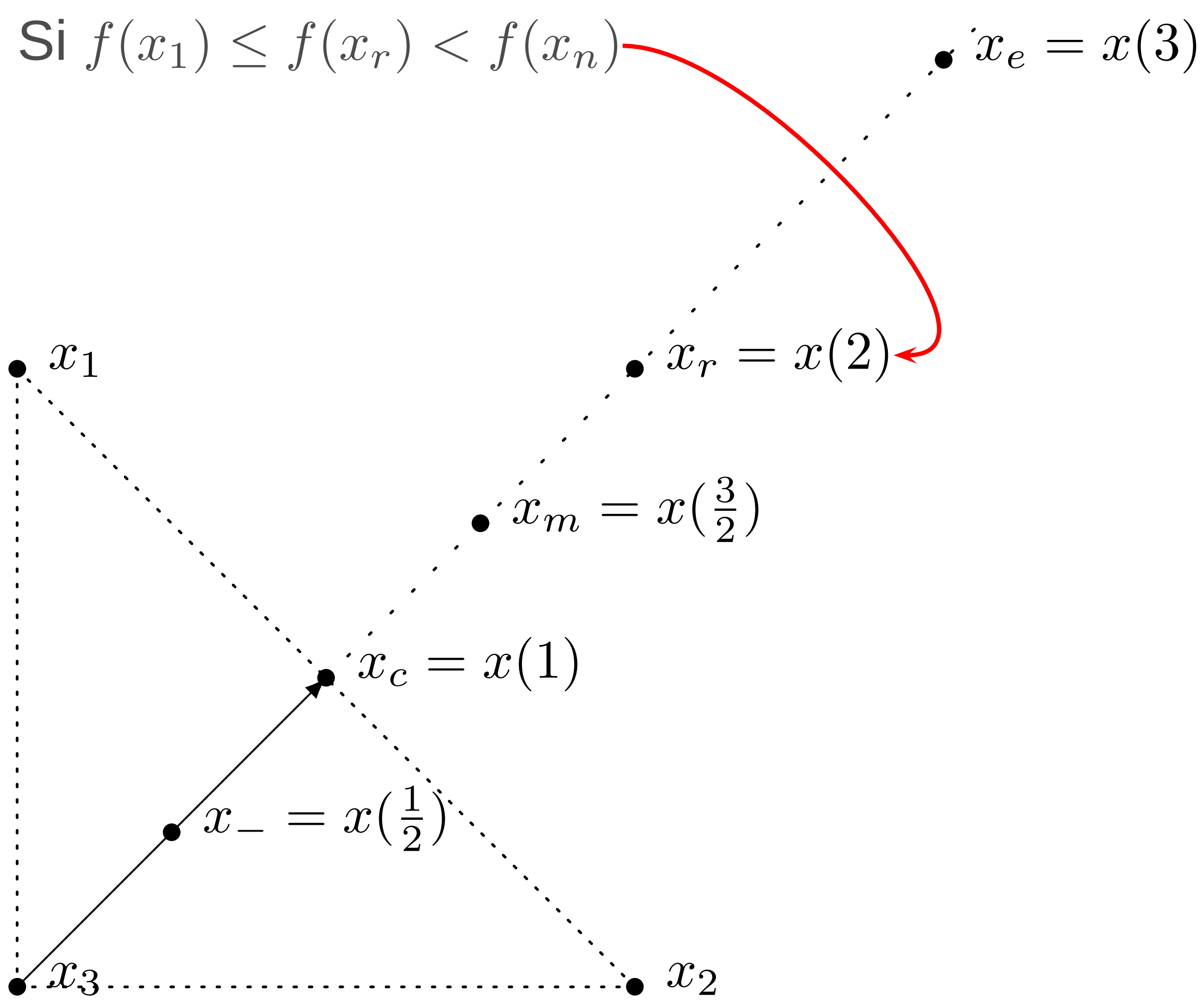
Si $f(x_r) < f(x_1)$



TRANSP-OR

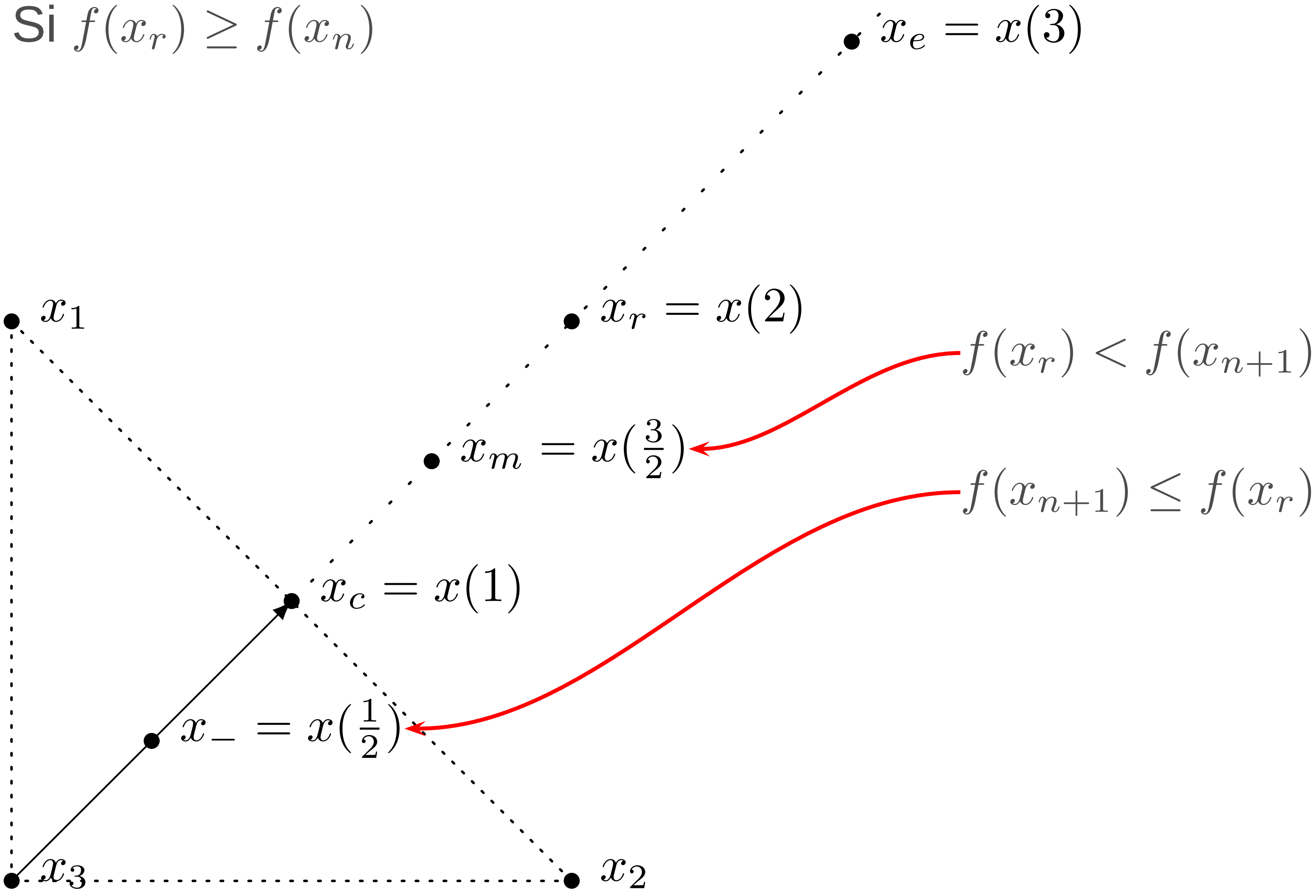
ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE

Nelder-Mead

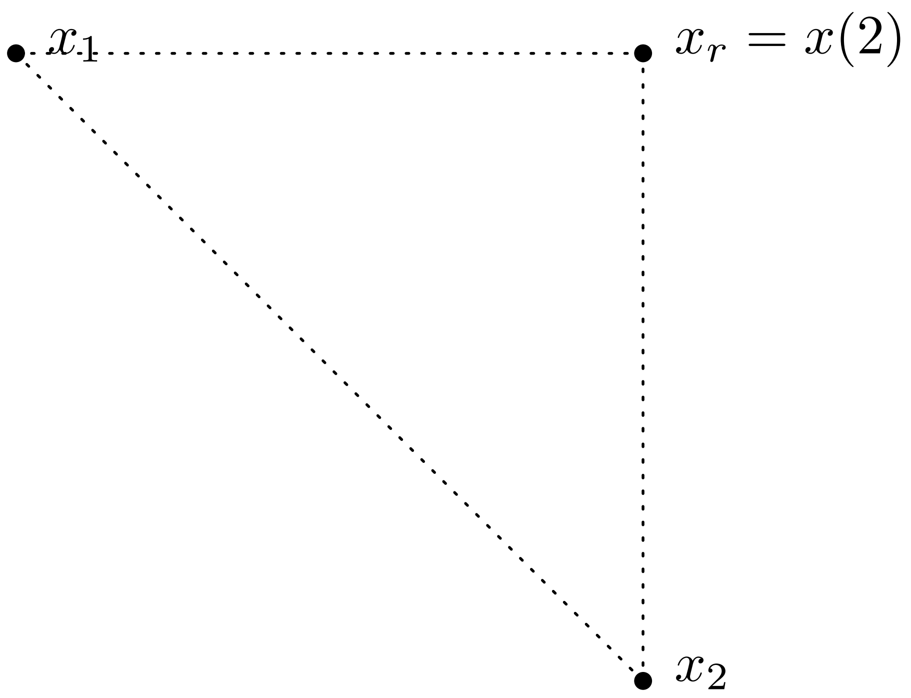


Nelder-Mead

Si $f(x_r) \geq f(x_n)$



Nelder-Mead



Algorithme : Nelder-Mead

Objectif

Trouver (une approximation d'')un minimum local du problème

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} f(x). \tag{1}$$

Entrées

- La fonction $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ continûment différentiable;
- Les vecteurs $x_1^0,\ldots,x_{n+1}^0$ de $\mathbb{R}^n$, affinement indépendants, tels que $f(x_i^0) \leq f(x_{i+1}^0)$, $i = 1,\ldots,n$;
- La précision demandée $\varepsilon \in \mathbb{R}$, $\varepsilon > 0$.

Algorithme : Nelder-Mead

Sortie

Une approximation de la solution $x^* \in \mathbb{R}$.

Initialisation

$k = 0$.

Algorithme : Nelder-Mead

Itérations

1. Calculer $x_c = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i^k$.
2. Définir $d_k = x_c - x_{n+1}^k$.
3. Calculer $x_r = x_{n+1}^k + 2d_k = 2x_c - x_{n+1}^k$.
4. Si $f(x_r) < f(x_1^k)$ alors on cherche au delà de x_r:
   (a) Calculer $x_e = x_{n+1}^k + 3d_k = 2x_r - x_c$.
   (b) Si $f(x_e) < f(x_r)$ alors $\widehat{x} = x_e$, sinon $\widehat{x} = x_r$.
5. Si $f(x_n^k) > f(x_r) \geq f(x_1^k)$, alors $\widehat{x} = x_r$.

Algorithme : Nelder-Mead

Itérations (suite)

6. Si $f(x_r) \geq f(x_n^k)$, alors on cherche avant x_r:
   (a) Si $f(x_r) \geq f(x_{n+1}^k)$ alors $\widehat{x} = x_{n+1}^k + \frac{1}{2} d_k = \frac{1}{2}(x_{n+1}^k + x_c)$.
   (b) Si $f(x_r) < f(x_{n+1}^k)$ alors $\widehat{x} = x_{n+1}^k + \frac{3}{2} d_k = \frac{1}{2}(x_r + x_c)$.
7. $x_{n+1}^{k+1} = \widehat{x}$, $x_i^{k+1} = x_i^k$, $i = 1, \ldots, n$.
8. $k = k + 1$.
9. Renuméroter pour obtenir $f(x_i^k) \leq f(x_{i+1}^k)$, $i = 1, \ldots, n$.

Algorithme : Nelder-Mead

Critère d'arrêt

Si $\|d_k\| \leq \varepsilon$, alors $x^* = x_1^k$.

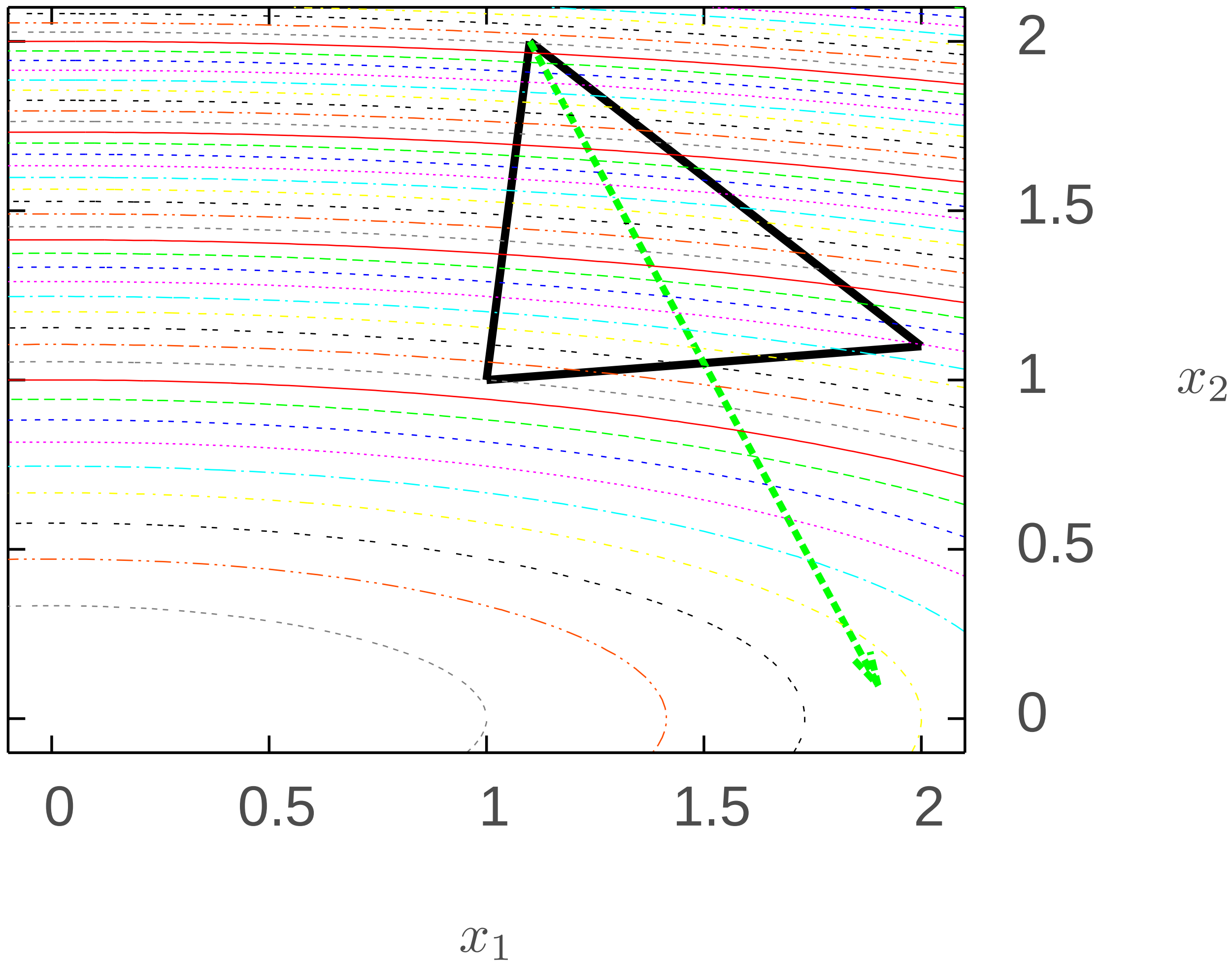
Exemple

$$\min_{x\in\mathbb{R}^2} f(x) = \frac{1}{2}x_1^2 + \frac{9}{2}x_2^2,$$

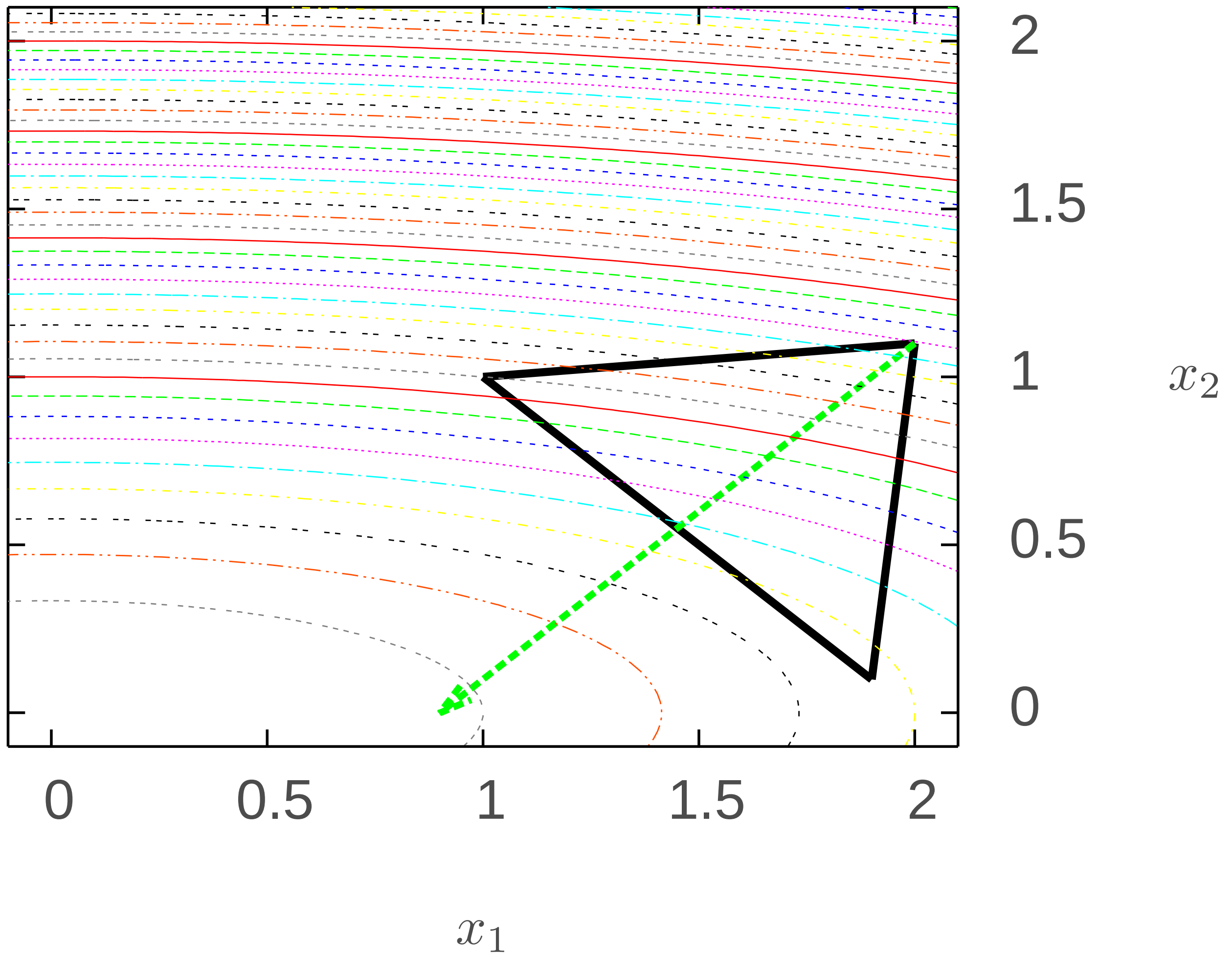
Simplexe de départ:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 1.1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1.1 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

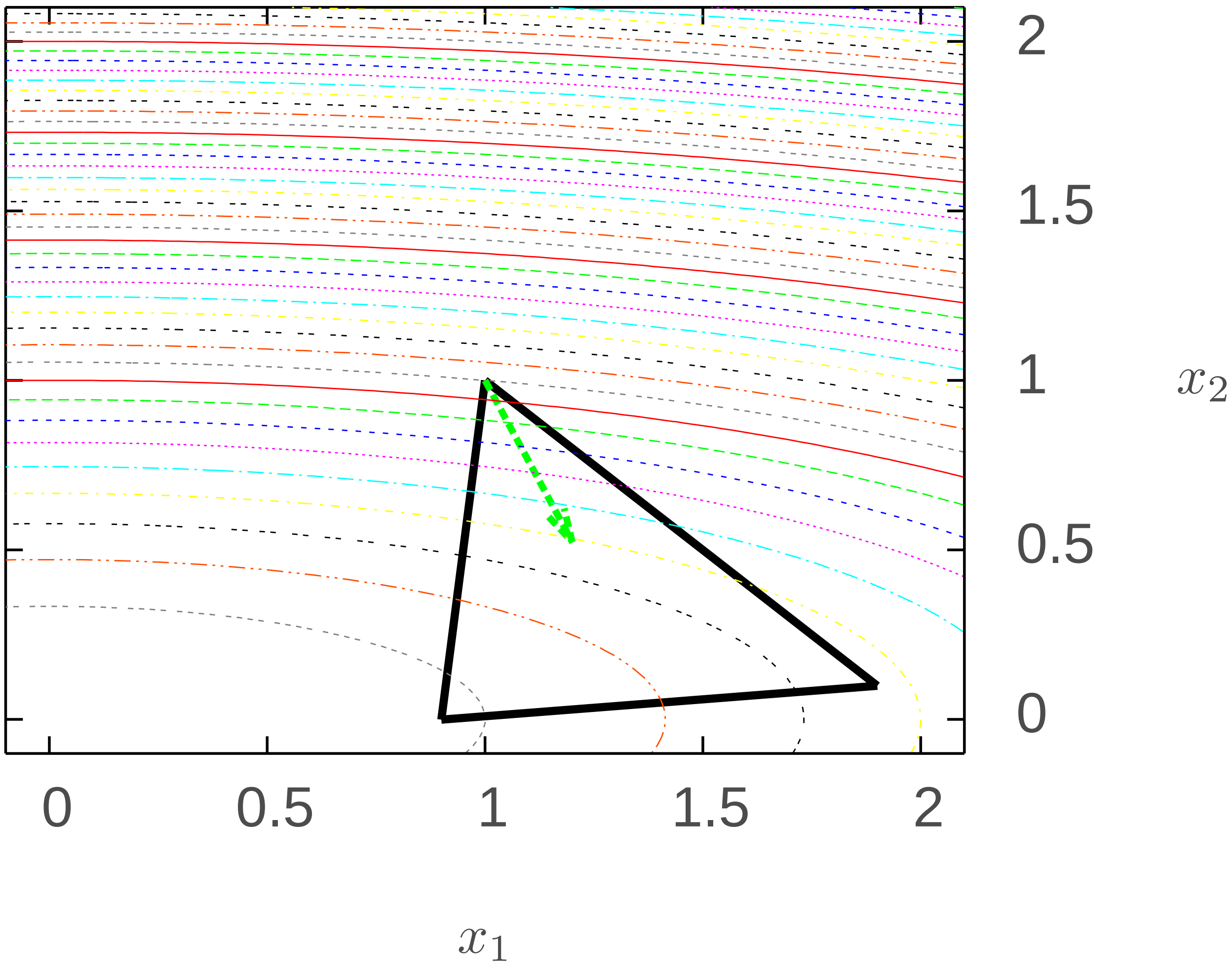
Exemple



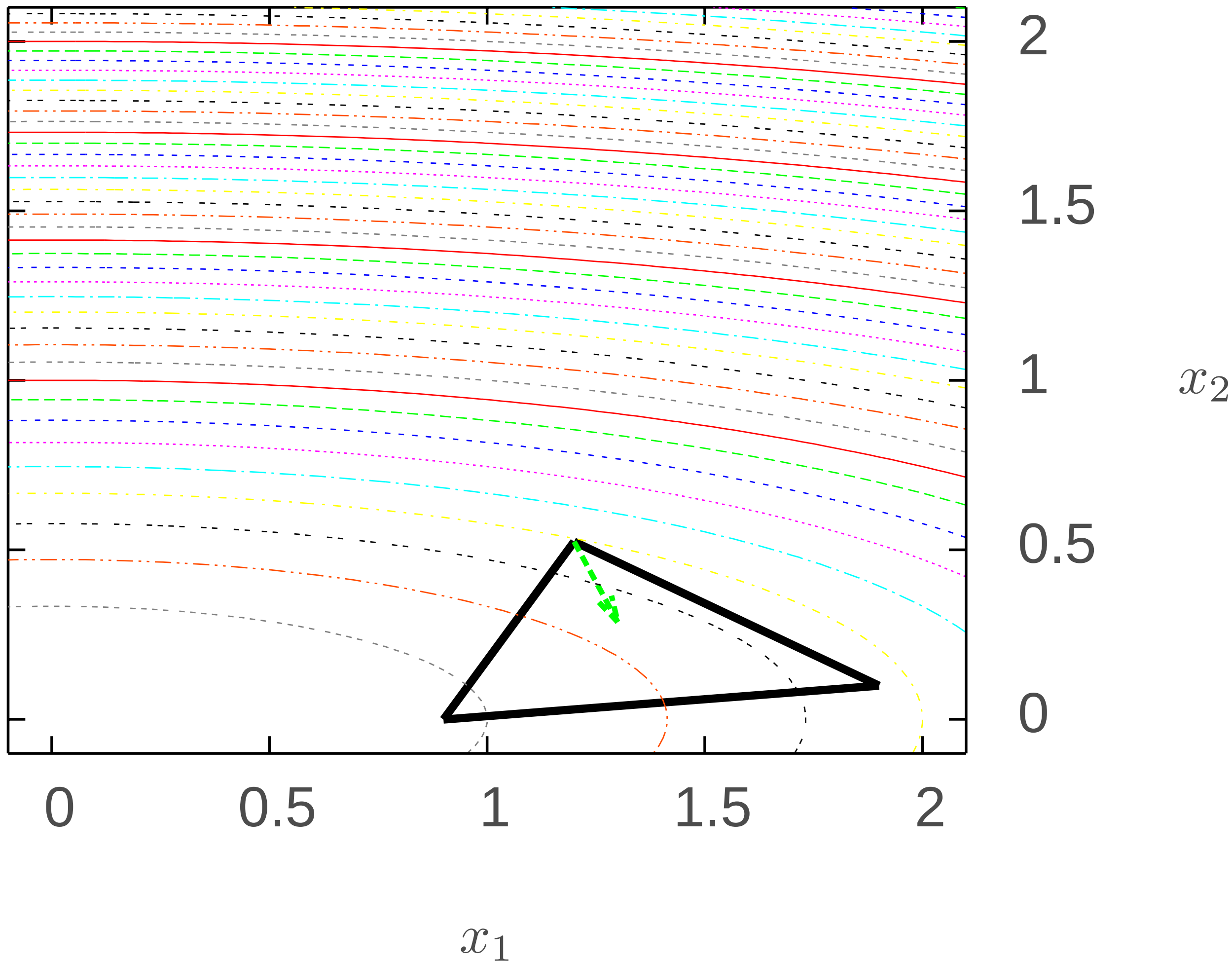
Exemple



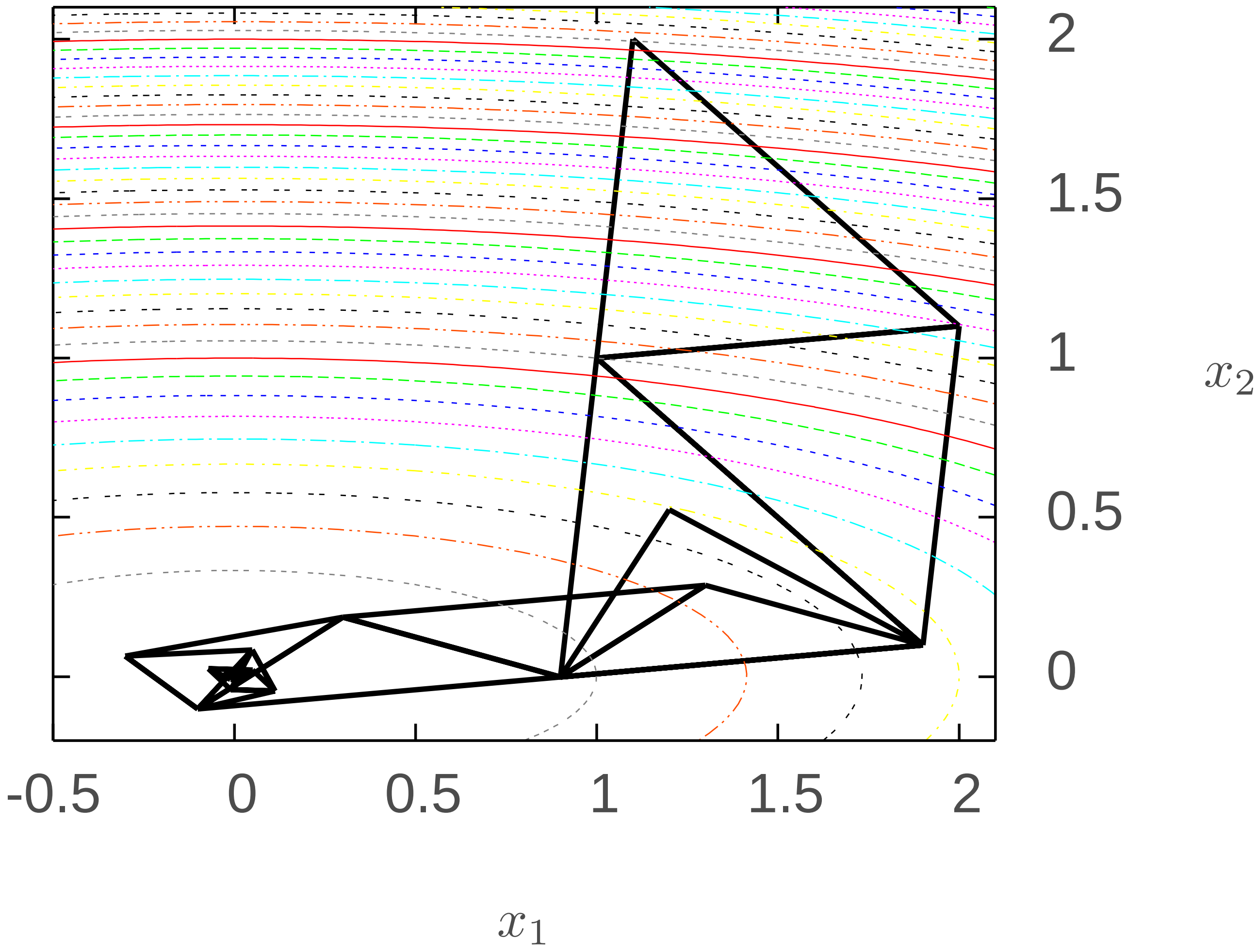
Exemple



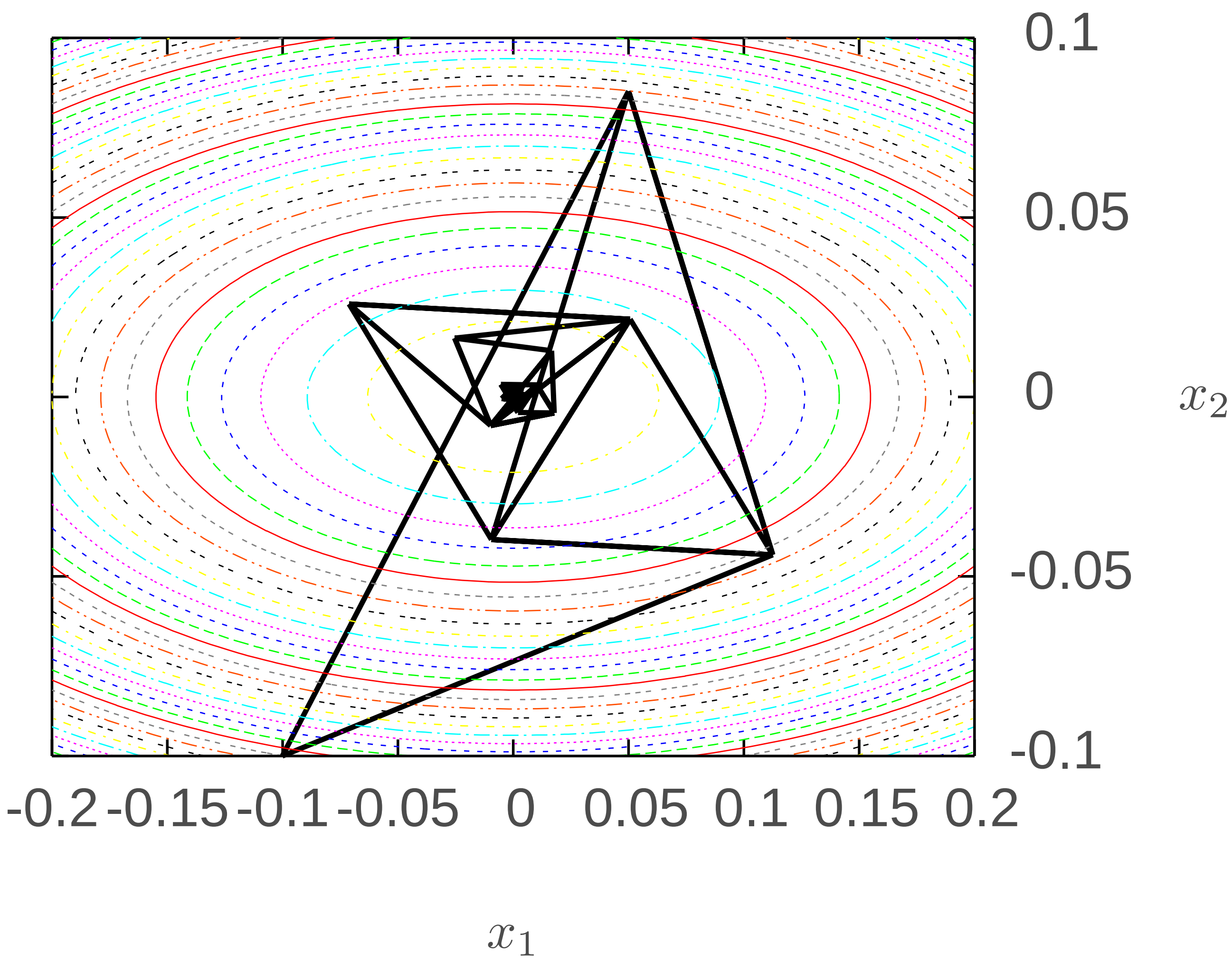
Exemple



Exemple



Exemple



Exemple de McKinnon

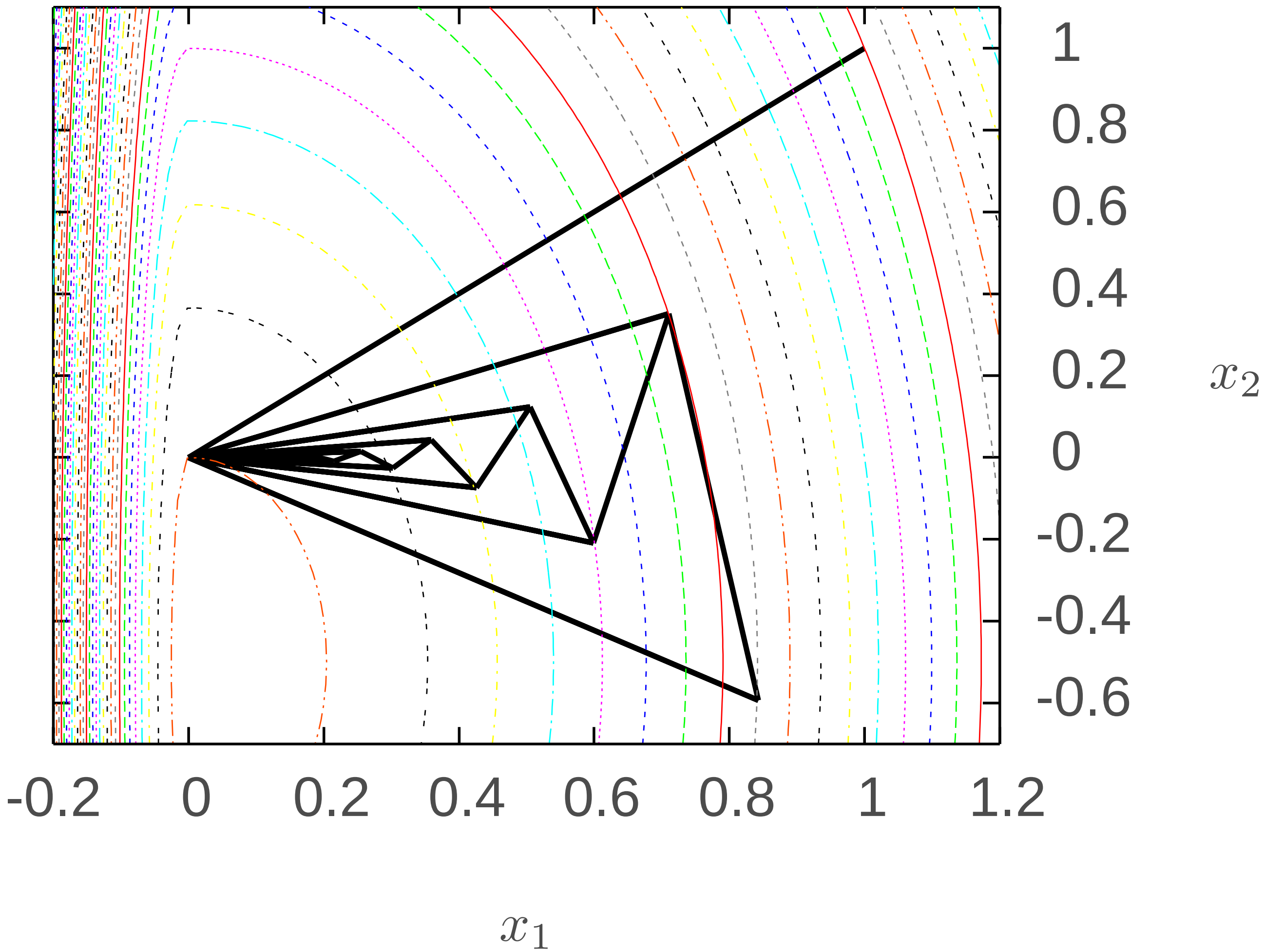
$$f(x) = \begin{cases} 360x_1^2 + x_2 + x_2^2 & \text{si } x \leq 0 \\ 6x_1^2 + x_2 + x_2^2 & \text{si } x \geq 0 \end{cases}$$

- Minimum : $\begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$.
- Simplexe initial :

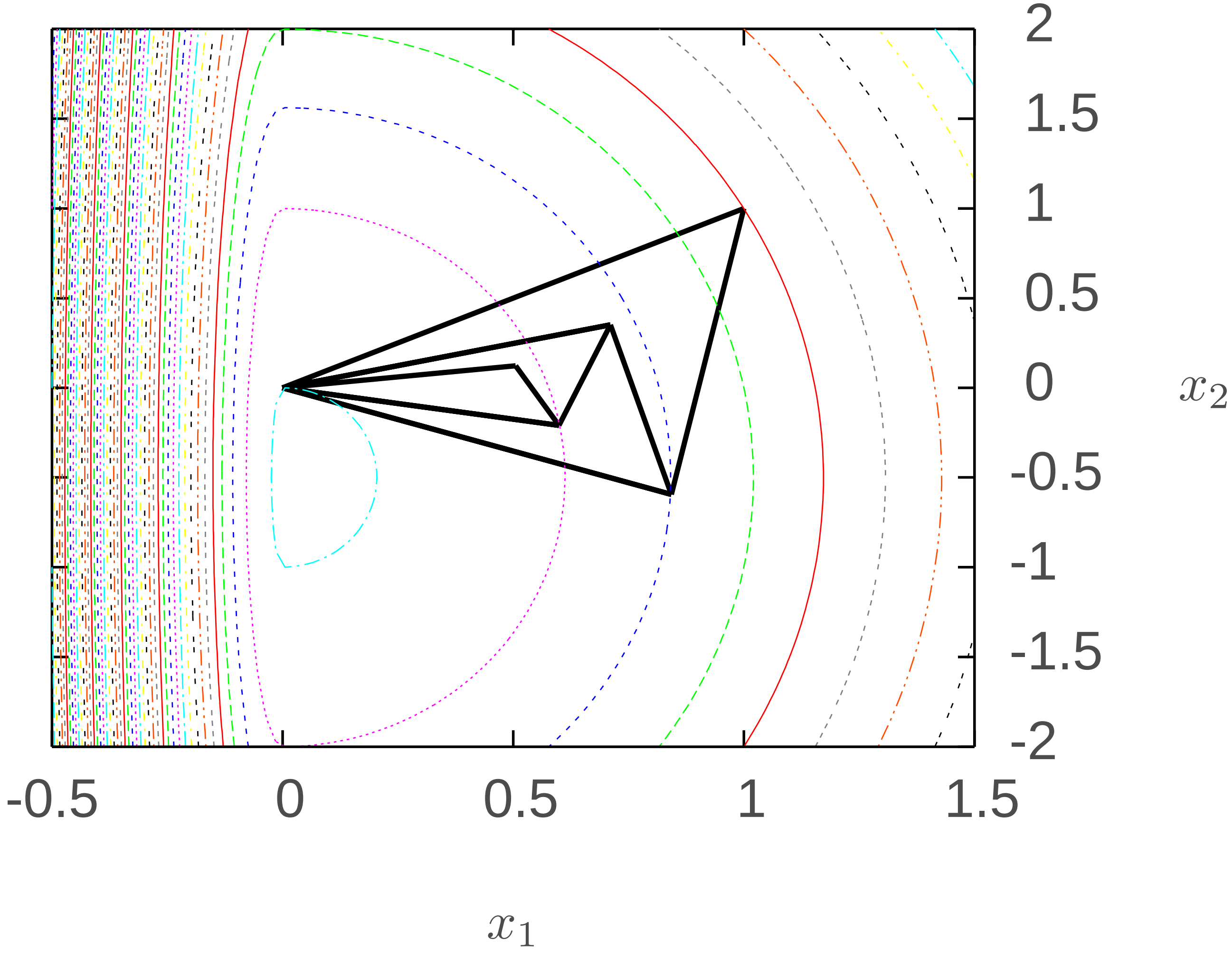
$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \frac{1+\sqrt{33}}{8} \\ \frac{1-\sqrt{33}}{8} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

- Nelder-Mead converge vers $(0\ 0)^T$, non stationnaire

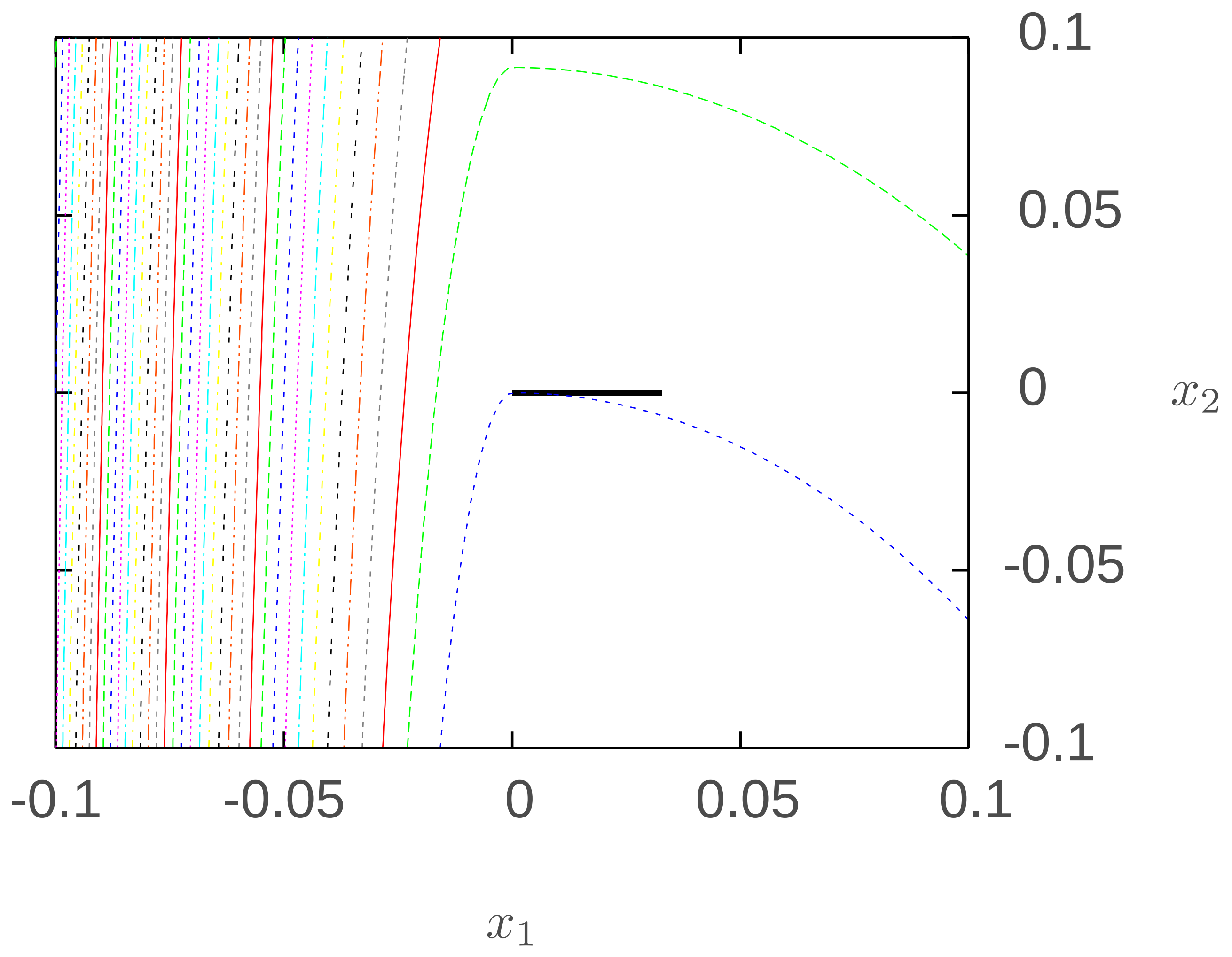
Exemple de McKinnon



Exemple de McKinnon: 4 itérations



Exemple de McKinnon: itération 20



Recherche multi-directionnelle de Torczon

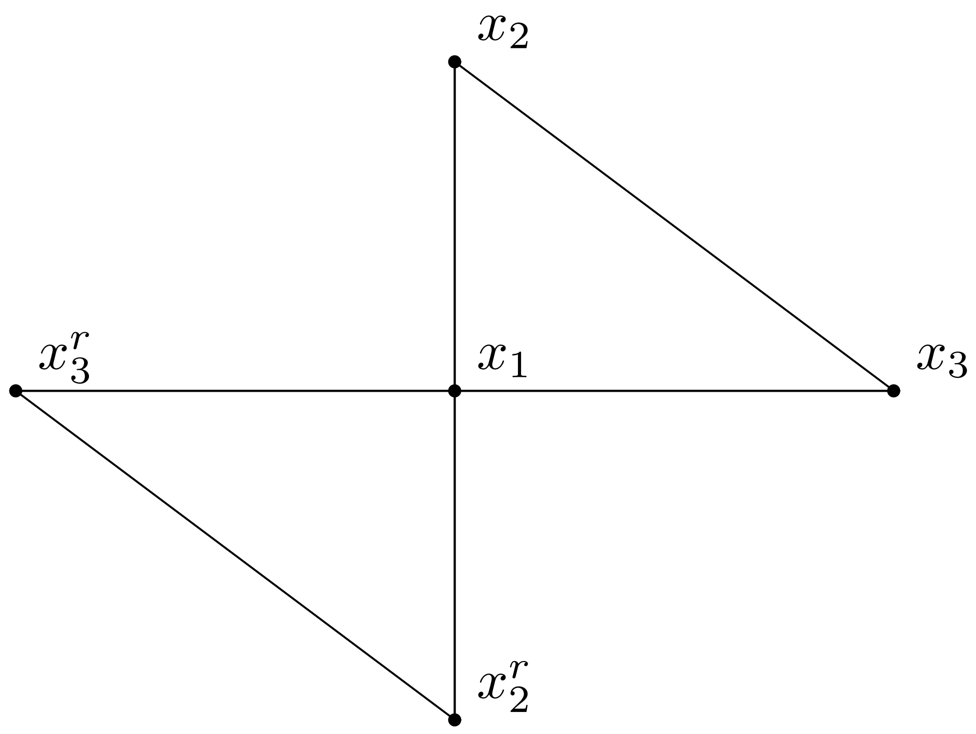
- Problème de Nelder-Mead : simplexe dégénéré
- Trois points presque colinéaires
- Méthode de Torczon : la géométrie du simplexe est maintenue
- Pas de dégénérescence

Recherche multi-directionnelle de Torczon

- $\mathcal{S} = \{x_1, \ldots, x_{n+1}\}$ formant un simplexe
- $f(\mathcal{S}) = \min_{i=1,\ldots,n+1} f(x_i)$
- Convention de numérotation : $f(\mathcal{S}) = f(x_1)$
- Idée : effectuer une réflexion autour de x_1 pour obtenir $\mathcal{S}_r = \{x_1^r, \ldots, x_{n+1}^r\}$ avec

$$\begin{aligned} x_1^r &= x_1 \\ x_i^r &= 2x_1 - x_i \quad i = 2, \ldots, n+1 \end{aligned}$$

Recherche multi-directionnelle de Torczon



Recherche multi-directionnelle de Torczon

- Si $f(\mathcal{S}_r) < f(x_1)$, on essaie d'aller plus loin, en considérant le simplexe généré par expansion $\mathcal{S}_e = \{x_1^e, \ldots, x_{n+1}^e\}$ avec

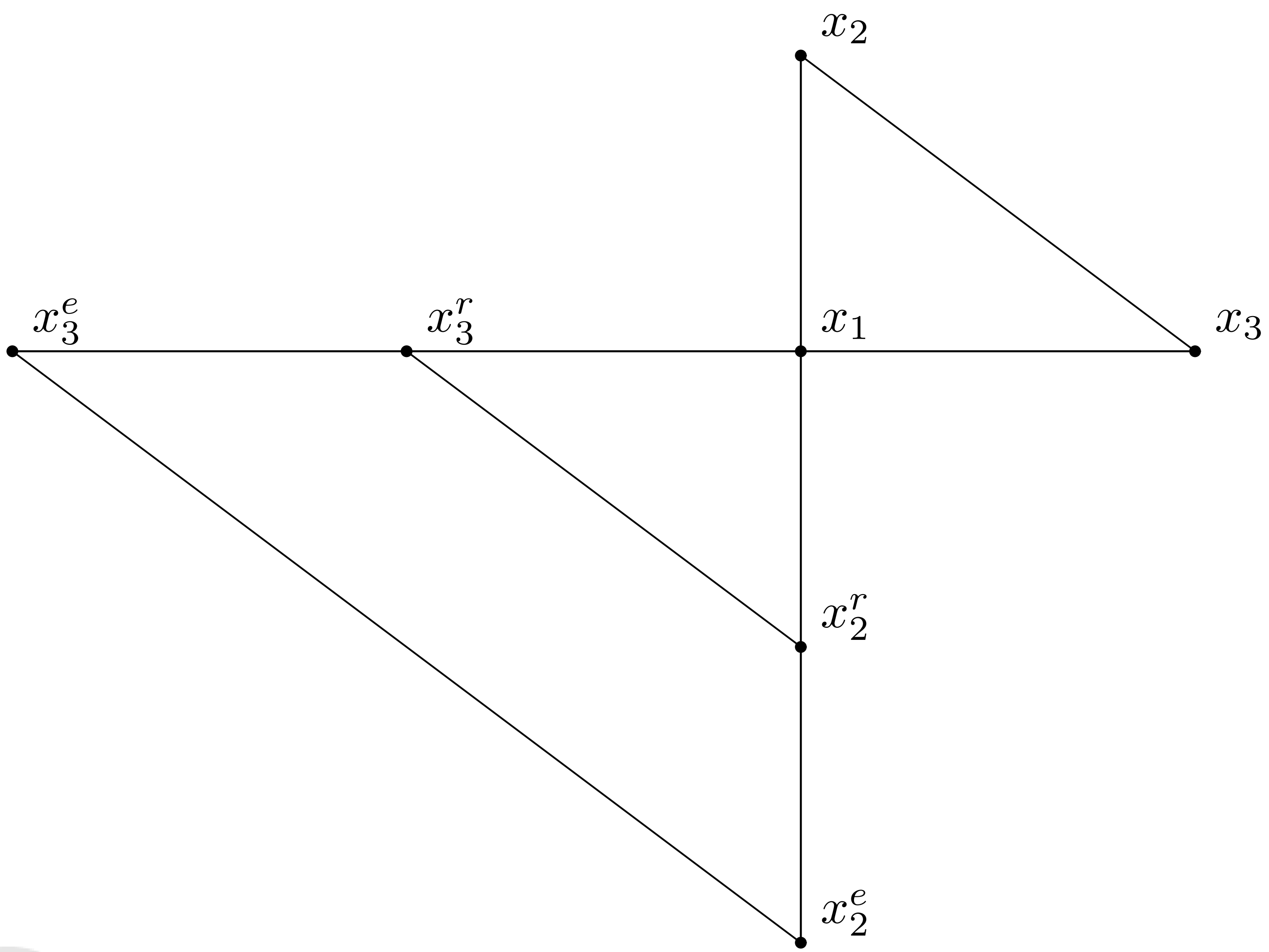
$$
\begin{aligned}
x_1^e &= x_1 \\
x_i^e &= 3x_1 - 2x_i, \quad i = 2, \ldots, n+1
\end{aligned}
$$

  - Si $f(\mathcal{S}_e) < f(\mathcal{S}_r)$, alors on choisit $\mathcal{S}_e$ pour la prochaine itération.
  - Sinon, on choisit $\mathcal{S}_r$.

TRANSP-OR

ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE

Recherche multi-directionnelle de Torczon

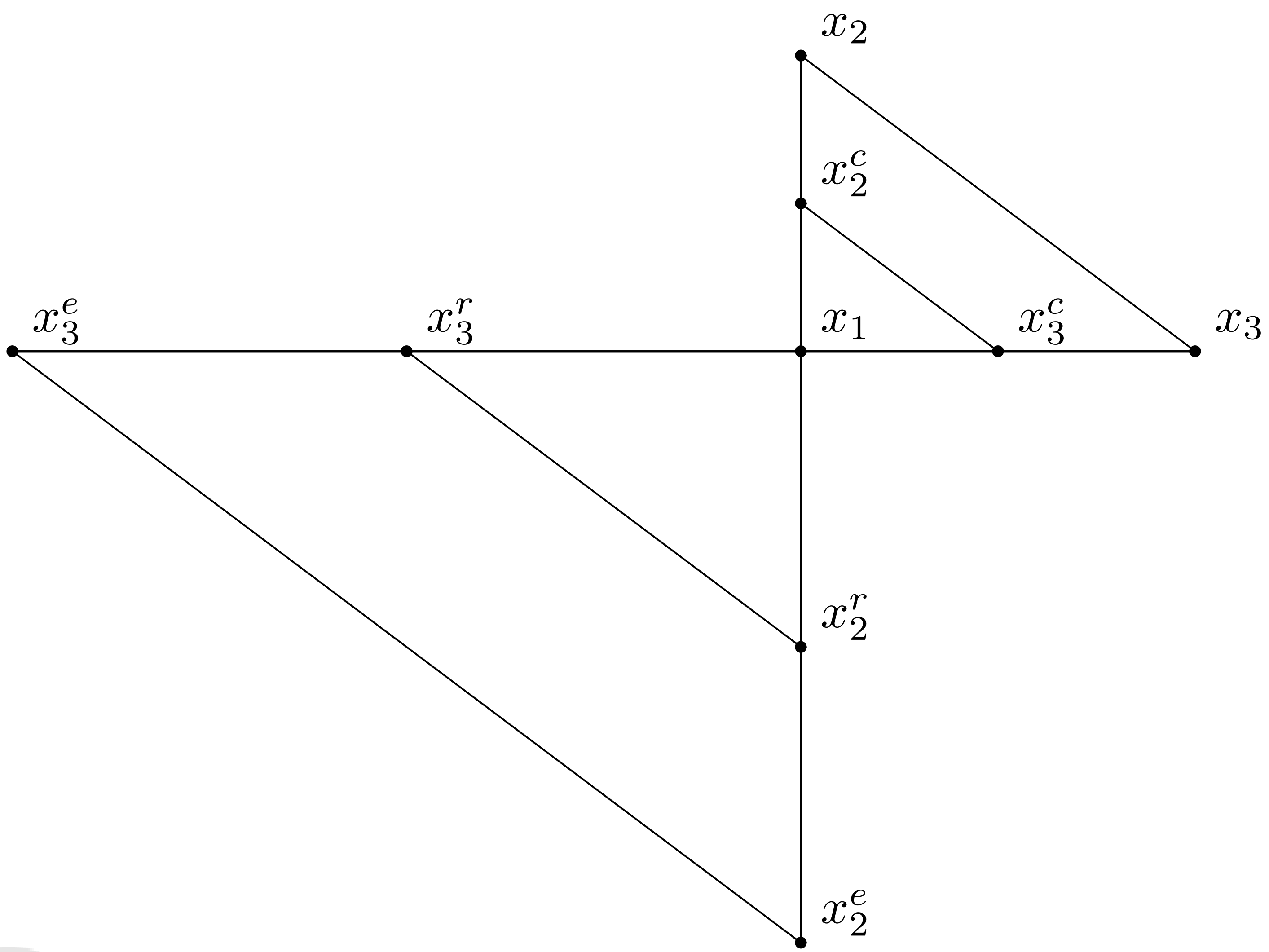


Recherche multi-directionnelle de Torczon

- Si $f(\mathcal{S}_r) \geq f(x_1)$, alors il faut contracter le simplexe, et générer $\mathcal{S}_c = \{x_1^c, \ldots, x_{n+1}^c\}$ avec

$$\begin{aligned} x_1^c &= x_1 \\ x_i^c &= \frac{1}{2}(x_1 + x_i), \quad i = 2, \ldots, n+1. \end{aligned}$$

Recherche multi-directionnelle de Torczon



Algorithme : Torczon

Objectif

Trouver (une approximation d'')un minimum local du problème

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x). \tag{2}$$

Entrées

- La fonction $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$;
- L'ensemble de vecteurs de $\mathbb{R}^n$ affinement indépendants $\mathcal{S}_0 = \{x_1, \ldots, x_{n+1}\}$ tels que $f(x_1) \leq f(x_{i+1})$, et $f(x_{n+1}) \geq f(x_i)$, $i = 1, \ldots, n$;
- La précision demandée $\varepsilon \in \mathbb{R}$, $\varepsilon > 0$.

Algorithme : Torczon

Sortie

Une approximation de la solution $x^* \in \mathbb{R}$.

Initialisation

$k = 0$.

Algorithme : Torczon

Itérations

1. Calculer $\mathcal{S}_r$ composé de x_1 et $x_i^r = 2x_1 - x_i$, $i = 2, \ldots, n+1$.
2. Si $f(\mathcal{S}_r) < f(x_1)$:
   (a) Calculer $\mathcal{S}_e$ composé de x_1 et $x_i^e = 3x_1 - 2x_i = 2x_i^r - x_1$, $i = 2, \ldots, n+1$.
   (b) Si $f(\mathcal{S}_e) < f(\mathcal{S}_r)$ alors $\mathcal{S}_{k+1} = \mathcal{S}_e$.
   (c) Sinon, $\mathcal{S}_{k+1} = \mathcal{S}_r$.
3. Si $f(\mathcal{S}_r) \geq f(x_1)$, calculer $\mathcal{S}_{k+1}$ composé de x_1 et $x_i^c = (x_1 + x_i)/2$, $i = 2, \ldots, n+1$.
4. $k = k + 1$.

Algorithme : Torczon

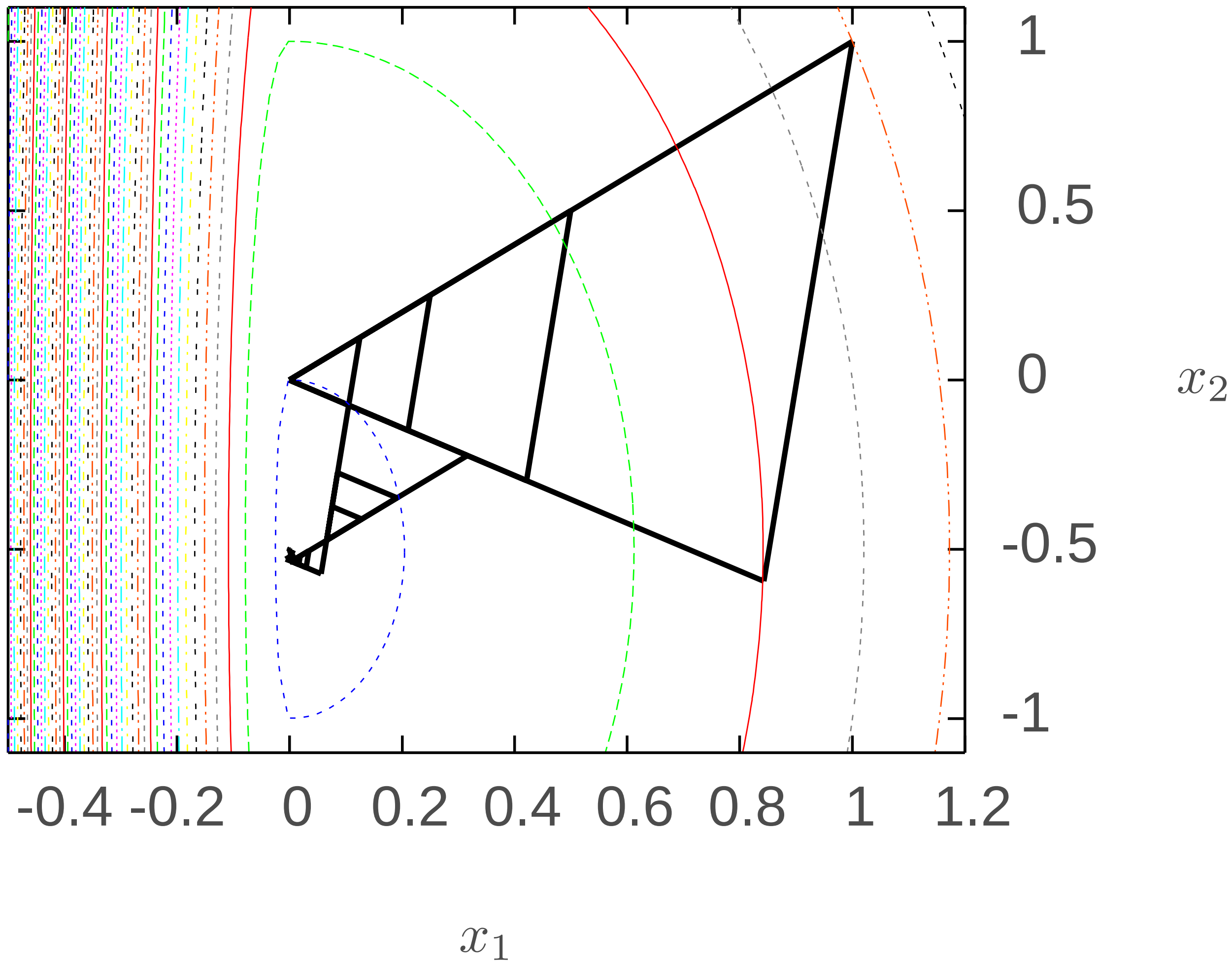
Itérations (suite)

5. Renuméroter pour que x_1 soit le meilleur point et x_{n+1} le moins bon dans le nouveau simplexe.

Critère d'arrêt

Si $\|x_{n+1} - x_1\| \leq \varepsilon$, alors $x^* = x_1$.

Exemple de McKinnon



$(x_1)_1$	$(x_1)_2$	$f(x_1)$	
0.0000e+00	0.0000e+00	0.0000e+00	C
0.0000e+00	0.0000e+00	0.0000e+00	C
0.0000e+00	0.0000e+00	0.0000e+00	C
1.0538e-01	-7.4134e-02	-2.0035e-03	E
6.6151e-02	-4.7240e-01	-2.2298e-01	C
6.6151e-02	-4.7240e-01	-2.2298e-01	C
6.6151e-02	-4.7240e-01	-2.2298e-01	R
3.6514e-03	-5.3490e-01	-2.4870e-01	C
3.6514e-03	-5.3490e-01	-2.4870e-01	C
3.6514e-03	-5.3490e-01	-2.4870e-01	C
3.6514e-03	-5.3490e-01	-2.4870e-01	C
3.6514e-03	-5.3490e-01	-2.4870e-01	R
⋮			
1.7987e-05	-5.0001e-01	-2.5000e-01	C
1.7987e-05	-5.0001e-01	-2.5000e-01	R
5.1230e-06	-5.0000e-01	-2.5000e-01	C
5.1230e-06	-5.0000e-01	-2.5000e-01	C