Méthodes de descente

Michel Bierlaire

michel.bierlaire@epfl.ch

EPFL - Laboratoire Transport et Mobilité - ENAC

TRANSP-OR

ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE

Méthode de descente

Idée

1. Trouver une direction de descente d_k, c'est-à-dire telle que $\nabla f(x_k)^T d_k < 0$.
2. Trouver un pas α_k tel que $f(x_k + \alpha_k d_k) < f(x_k)$.
3. Calculer $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$.

Plus forte pente

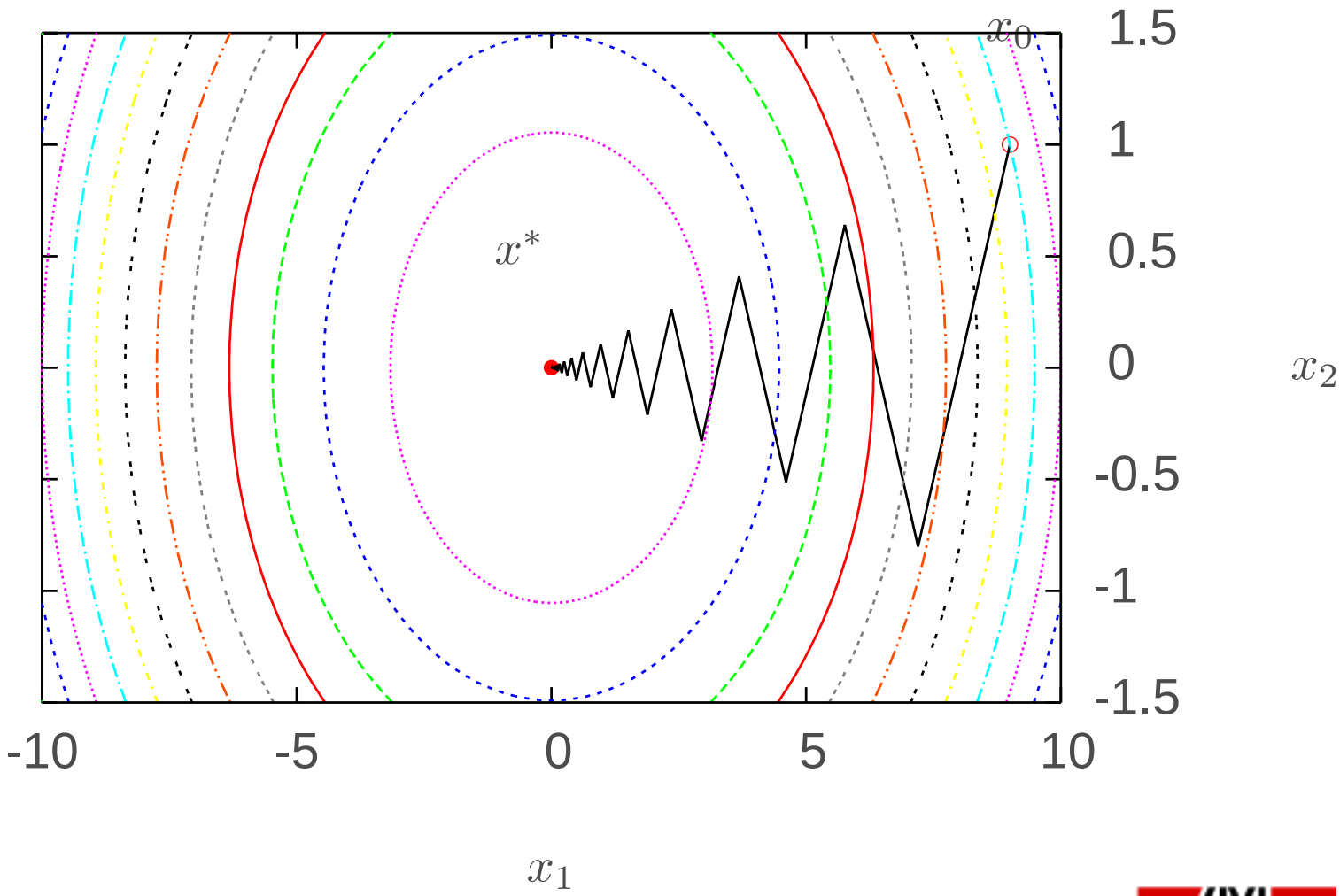
- Choix intuitif de la direction : $d_k = -\nabla f(x_k)$
- Choix du pas

$$\alpha_k = \text{argmin}_{\alpha \in \mathbb{R}_0^+} f(x_k + \alpha d_k).$$

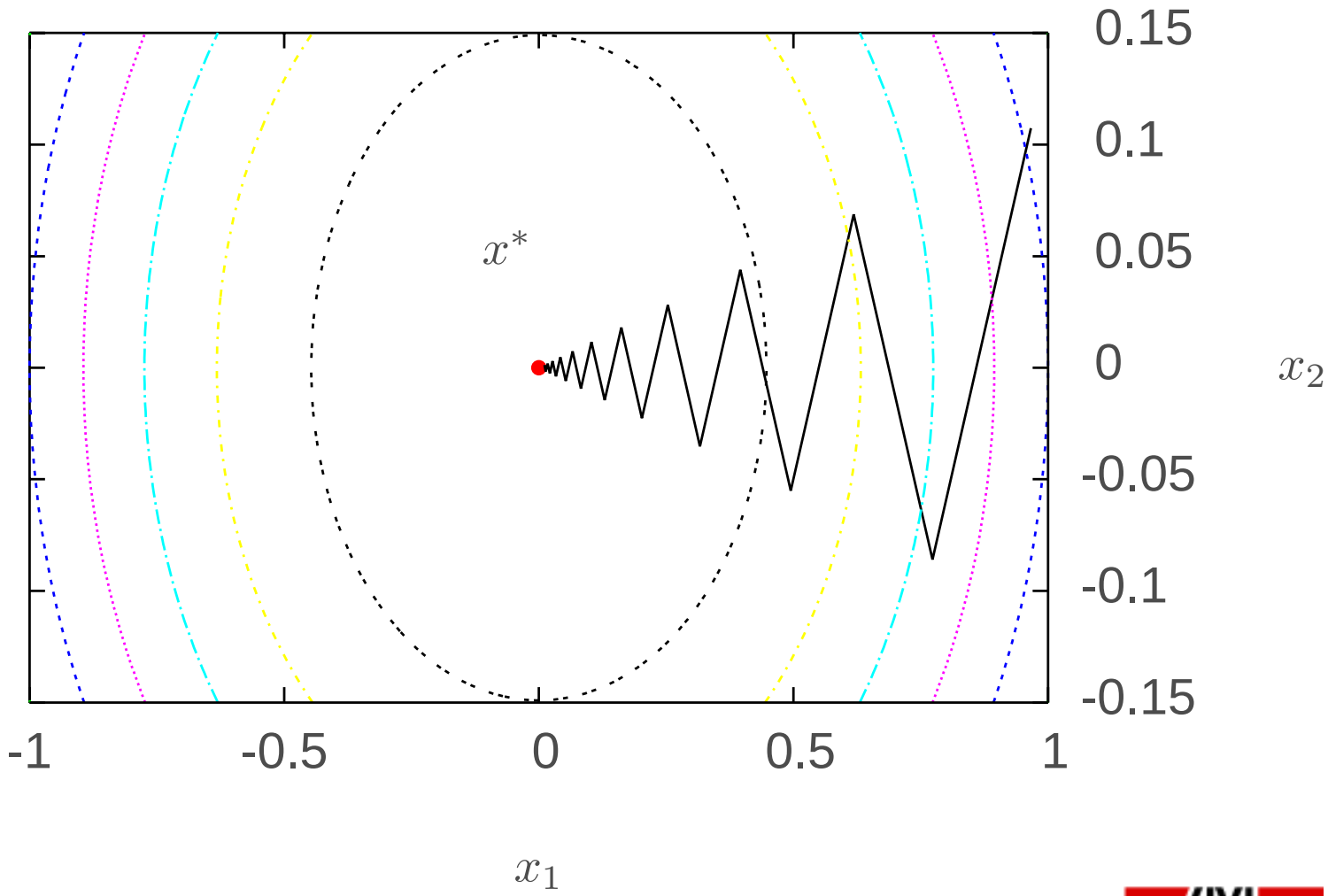
Exemple :

$$f(x) = \frac{1}{2}x_1^2 + \frac{9}{2}x_2^2$$

Plus forte pente



Plus forte pente



TRANSP-OR

ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE

Plus forte pente préconditionnée

$$f(x) = \frac{1}{2}x_1^2 + \frac{9}{2}x_2^2$$

Changement de variable :

$$\begin{aligned} x'_1 &= x_1 \\ x'_2 &= 3x_2 \end{aligned}$$

et

$$\tilde{f}(x') = \frac{1}{2}{x'_1}^2 + \frac{9}{2}(\frac{1}{3}x'_2)^2 = \frac{1}{2}{x'_1}^2 + \frac{1}{2}{x'_2}^2.$$

Plus forte pente préconditionnée

$$\tilde{f}(x') = \frac{1}{2}{x'_1}^2 + \frac{1}{2}{x'_2}^2.$$

Direction :

$$d = -\nabla \tilde{f}(x') = \begin{pmatrix} -x'_1 \\ -x'_2 \end{pmatrix}.$$

Pas :

$$\begin{gathered} \operatorname{argmin}_\alpha f(x' - \alpha \nabla f(x')) = \\ \min_\alpha \tfrac{1}{2}(x'_1 - \alpha x'_1)^2 + \tfrac{1}{2}(x'_2 - \alpha x'_2)^2, \end{gathered}$$

Plus forte pente préconditionnée

Solution : $\alpha = 1$

$$\begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -x'_1 \\ -x'_2 \end{pmatrix} = 0,$$

Plus forte pente préconditionnée

- Après conditionnement, la méthode de la plus forte pente converge en une seule itération sur cet exemple
- D'une manière générale, un pré-conditionnement peut significativement accélérer la méthode

Algorithme : Plus forte pente préconditionnée

Objectif

Trouver une approximation de la solution du problème

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

Input

- La fonction $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ différentiable;
- Le gradient de la fonction $\nabla f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$;
- Une famille de préconditionneurs $(D_k)_k$ telle que D_k est définie positive pour tout k;
- $x_0 \in \mathbb{R}^n$;
- La précision demandée $\varepsilon \in \mathbb{R}$, $\varepsilon > 0$.

Algorithme : Plus forte pente préconditionnée

Output

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

Initialisation

$k = 0$

Itérations

1. $d_k = -D_k \nabla f(x_k)$,
2. Déterminer α_k, par exemple $\alpha_k = \operatorname{argmin}_{\alpha \geq 0} f(x_k + \alpha d_k)$,
3. $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$,
4. $k = k + 1$.

Critère d'arrêt Si $\|\nabla f(x_k)\| \leq \varepsilon$, alors $x^* = x_k$.

Plus forte pente préconditionnée

Il reste à préciser

- comment choisir D_k
- comment choisir α_k

et il reste à s'assurer que cela fonctionne...

Choix du pas

- Résolution de

$$\alpha_k = \text{argmin}_{\alpha \in \mathbb{R}_0^+} f(x_k + \alpha d_k).$$

  trop coûteuse
- Travail inutile si la direction n'est pas bonne
- Idée : prenons n'importe quel α tel que

$$f(x_k + \alpha d_k) < f(x_k)$$

- Malheureusement, cela ne suffit pas...

Choix du pas

- Exemple : $f(x) = x^2$
- Appliquons l'algorithme avec $x_0 = 2$, et

$$\begin{aligned} D_k &= 1/2|x_k| = \mathrm{sgn}(x_k)/2x_k \\ \alpha_k &= 2 + 3(2^{-k-1}). \end{aligned}$$

- D_k est bien (défini) positif pour tout k.
- $\nabla f(x_k) = 2x_k \Rightarrow d_k = -D_k \nabla f(x_k) = -\mathrm{sgn}(x_k)$
- La méthode s'écrit

$$x_{k+1} = \begin{cases} x_k - 2 - 3(2^{-k-1}) & \text{si } x_k \geq 0, \\ x_k + 2 + 3(2^{-k-1}) & \text{si } x_k < 0, \end{cases}$$

Choix du pas

Nous avons que

$$x_k = (-1)^k(1 + 2^{-k})$$

et

$$|x_{k+1}| < |x_k|.$$

(p. 264)

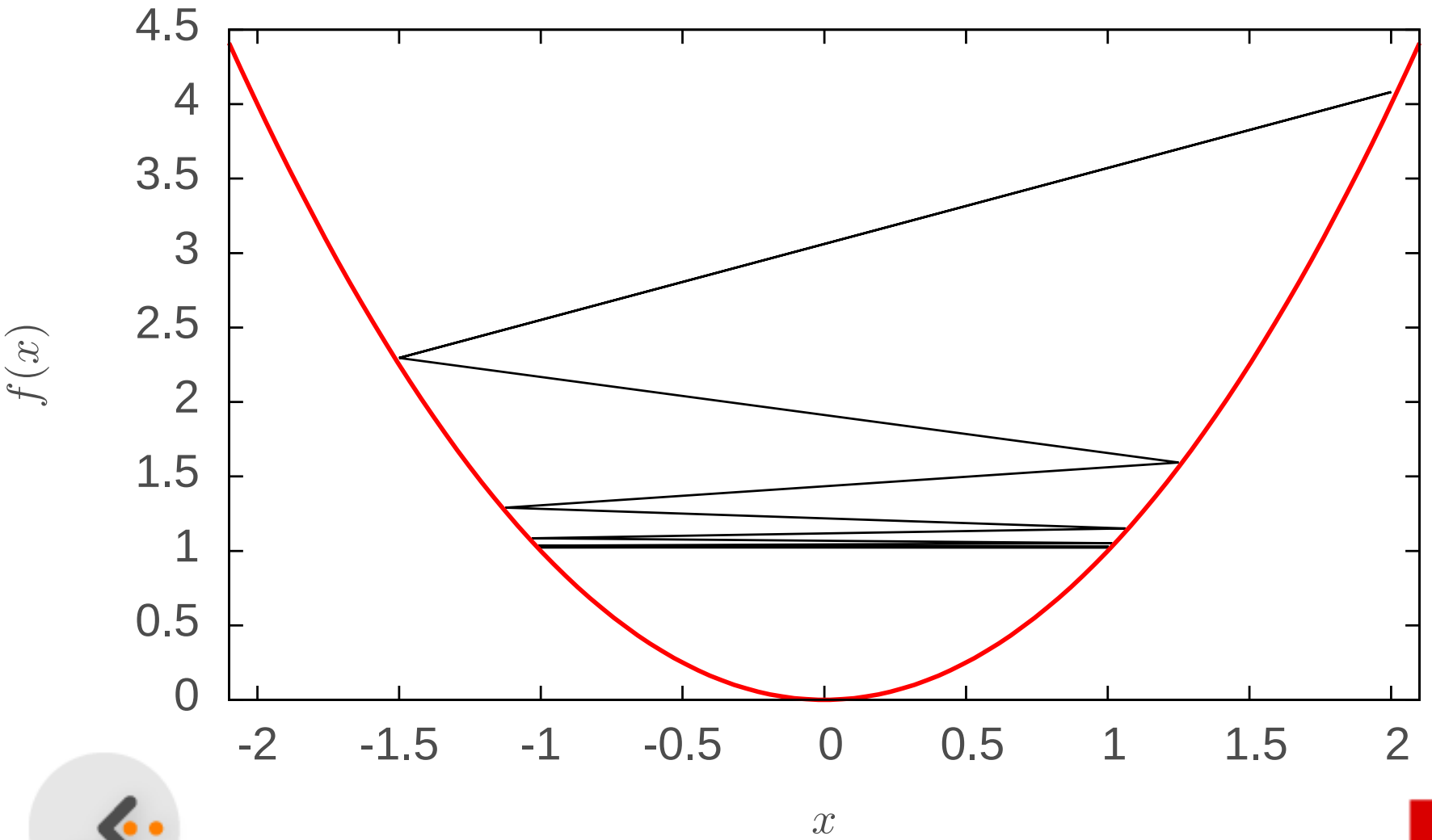
Dès lors

$$f(x_{k+1}) < f(x_k)$$

Cependant, la suite x_k a deux points d'accumulation: -1 et 1

k	x_k	d_k	α_k
0	+2.000000e+00	-1	+3.500000e+00
1	-1.500000e+00	1	+2.750000e+00
2	+1.250000e+00	-1	+2.375000e+00
3	-1.125000e+00	1	+2.187500e+00
4	+1.062500e+00	-1	+2.093750e+00
5	-1.031250e+00	1	+2.046875e+00
⋮			
46	+1.000000e+00	-1	+2.000000e+00
47	-1.000000e+00	1	+2.000000e+00
48	+1.000000e+00	-1	+2.000000e+00
49	-1.000000e+00	1	+2.000000e+00
50	+1.000000e+00	-1	+2.000000e+00

Choix du pas



Choix du pas

Pourquoi cela ne fonctionne pas ?

- Origine théorique : théorème de Taylor
- Théorie locale
- Ici, les pas sont trop longs
- Le fait que $f(x_{k+1}) < f(x_k)$ est du à la chance et non au fait que $d^T \nabla f(x_k) < 0$
- Les pas sont trop longs par rapport au bénéfice obtenu

Notion de diminution suffisante

Diminution suffisante

Soit $\gamma > 0$. On veut

$$f(x_k) - f(x_k + \alpha_k d_k) \geq \alpha_k \gamma,$$

ou encore

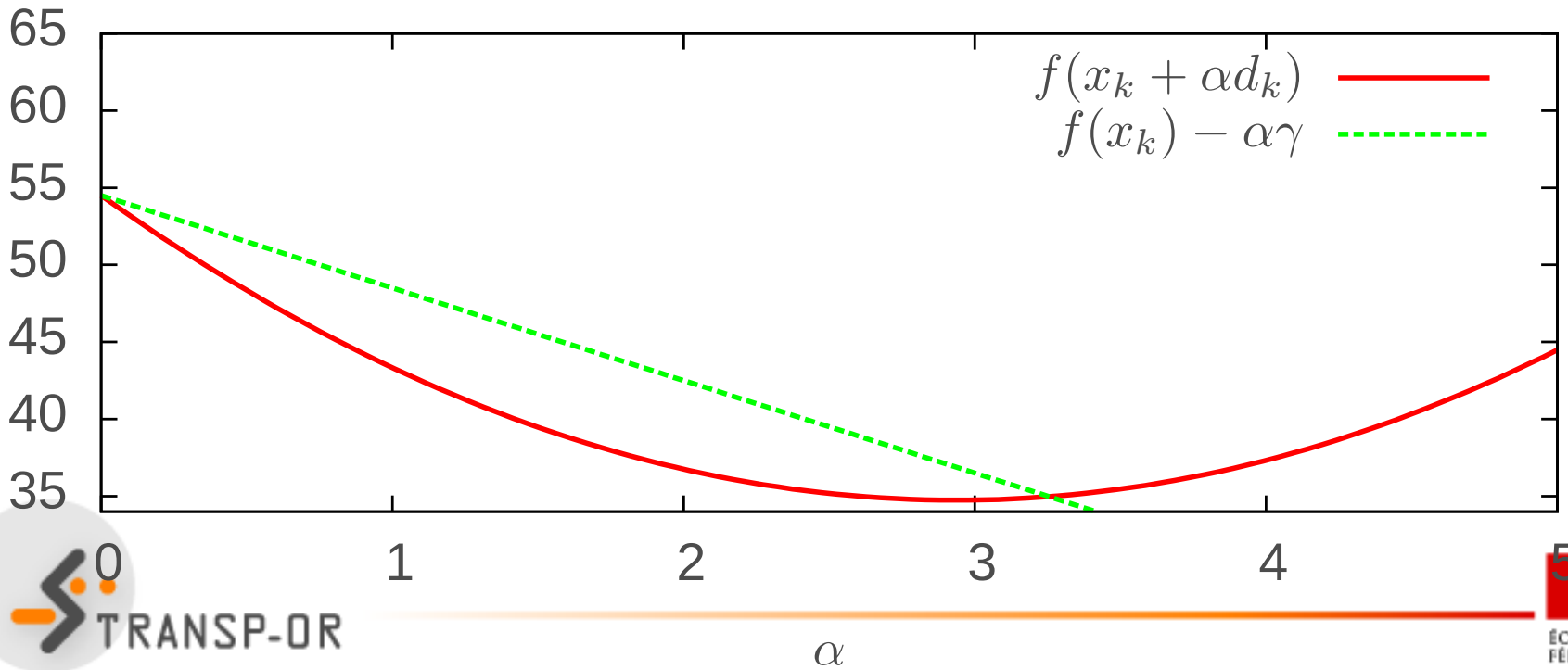
$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq f(x_k) - \alpha_k \gamma.$$

Diminution suffisante

Exemple :

$$f(x) = \frac{1}{2}x_1^2 + \frac{9}{2}x_2^2$$

$$x_0 = \begin{pmatrix} 10 \\ 1 \end{pmatrix} \quad d = \begin{pmatrix} \frac{-10}{\sqrt{181}} \\ \frac{-9}{\sqrt{181}} \end{pmatrix} \quad \gamma = 6$$

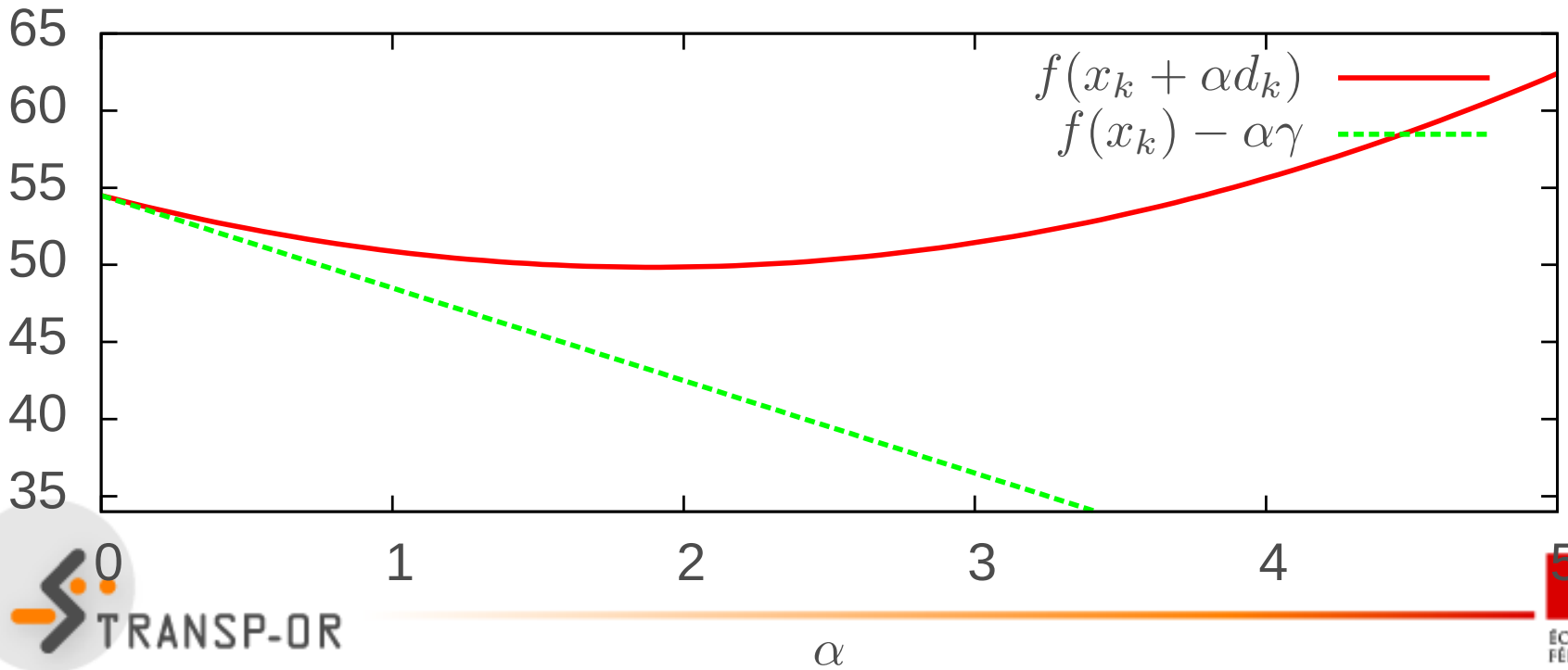


Diminution suffisante

Exemple :

$$f(x) = \frac{1}{2}x_1^2 + \frac{9}{2}x_2^2$$

$$x_0 = \begin{pmatrix} 10 \\ 1 \end{pmatrix} \quad d = \begin{pmatrix} \frac{-2}{\sqrt{5}} \\ \frac{1}{\sqrt{5}} \end{pmatrix} \quad \gamma = 6$$



Diminution suffisante

- γ ne peut pas être constant
- Il doit dépendre de la direction
- Utilisons la théorie

Rappel

Direction de descente *Soit $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ une fonction différentiable. Soient $x \in \mathbb{R}^n$ tel que $\nabla f(x) \neq 0$ et $d \in \mathbb{R}^n$. Si d est une direction de descente, alors il existe $\eta > 0$ tel que*

$$f(x + \alpha d) < f(x) \quad \forall 0 < \alpha \leq \eta.$$

De plus, pour tout $\beta < 1$, il existe $\widehat{\eta} > 0$ tel que

$$f(x + \alpha d) < f(x) + \alpha\beta\nabla f(x)^T d,$$

pour tout $0 < \alpha \leq \widehat{\eta}$.

(voir début du cours et p. 36)

Diminution suffisante

Choisissons

$$\gamma = -\beta \nabla f(x_k)^T d_k$$

avec $0 < \beta < 1$.

Diminution suffisante

Diminution suffisante : première condition de Wolfe

Soient $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ *une fonction différentiable, un point* $x_k \in \mathbb{R}^n$*, une direction (de descente)* $d_k \in \mathbb{R}^n$ *telle que* $\nabla f(x_k)^T d_k < 0$ *et un pas* $\alpha_k \in \mathbb{R}$, $\alpha_k > 0$. *On dira que la fonction* f diminue suffisamment *en* $x_k + \alpha_k d_k$ *par rapport à* x_k *si*

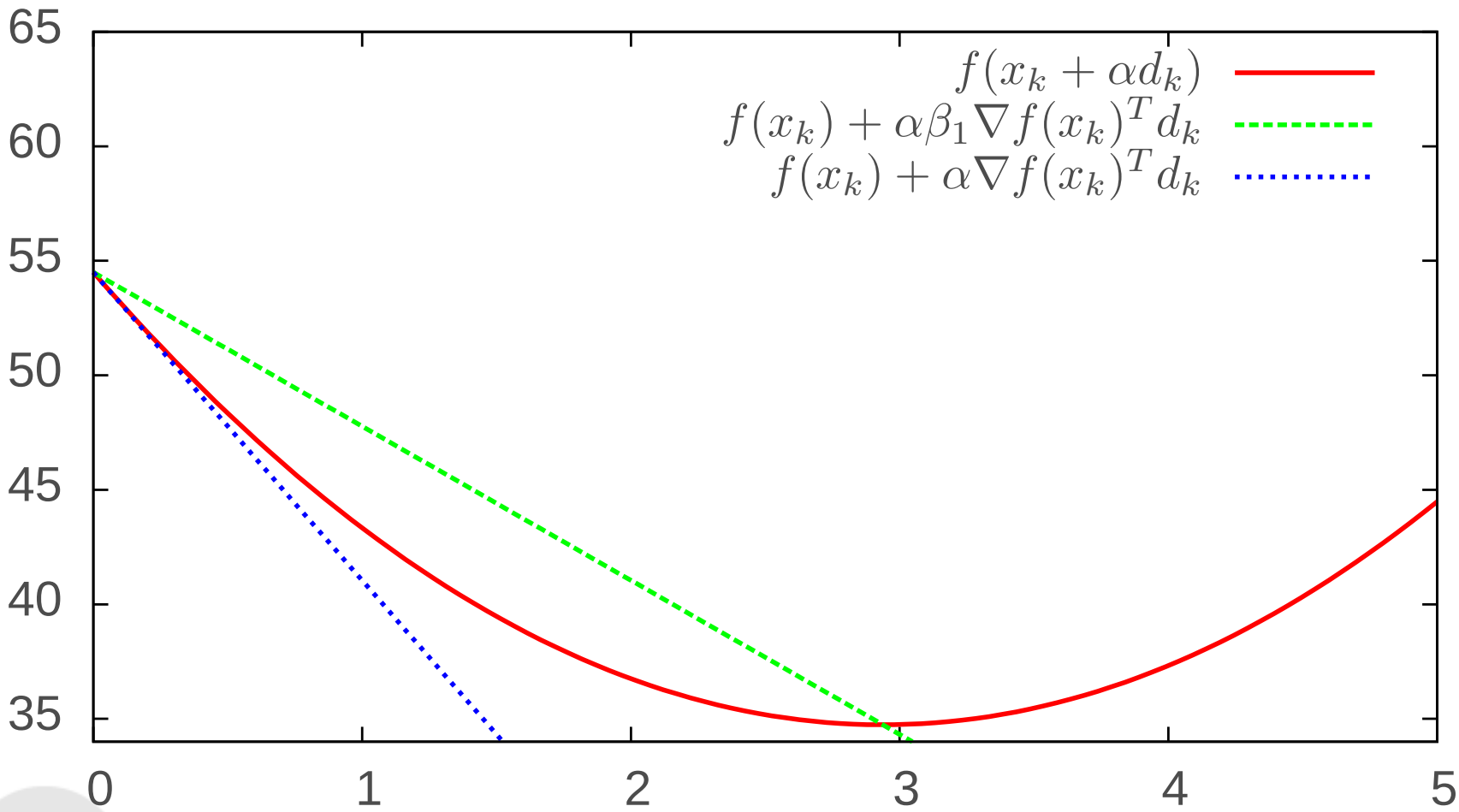
$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq f(x_k) + \alpha_k \beta_1 \nabla f(x_k)^T d_k,$$

avec $0 < \beta_1 < 1$. *Cette condition s'appelle la* première condition de Wolfe

TRANSP-OR

ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE

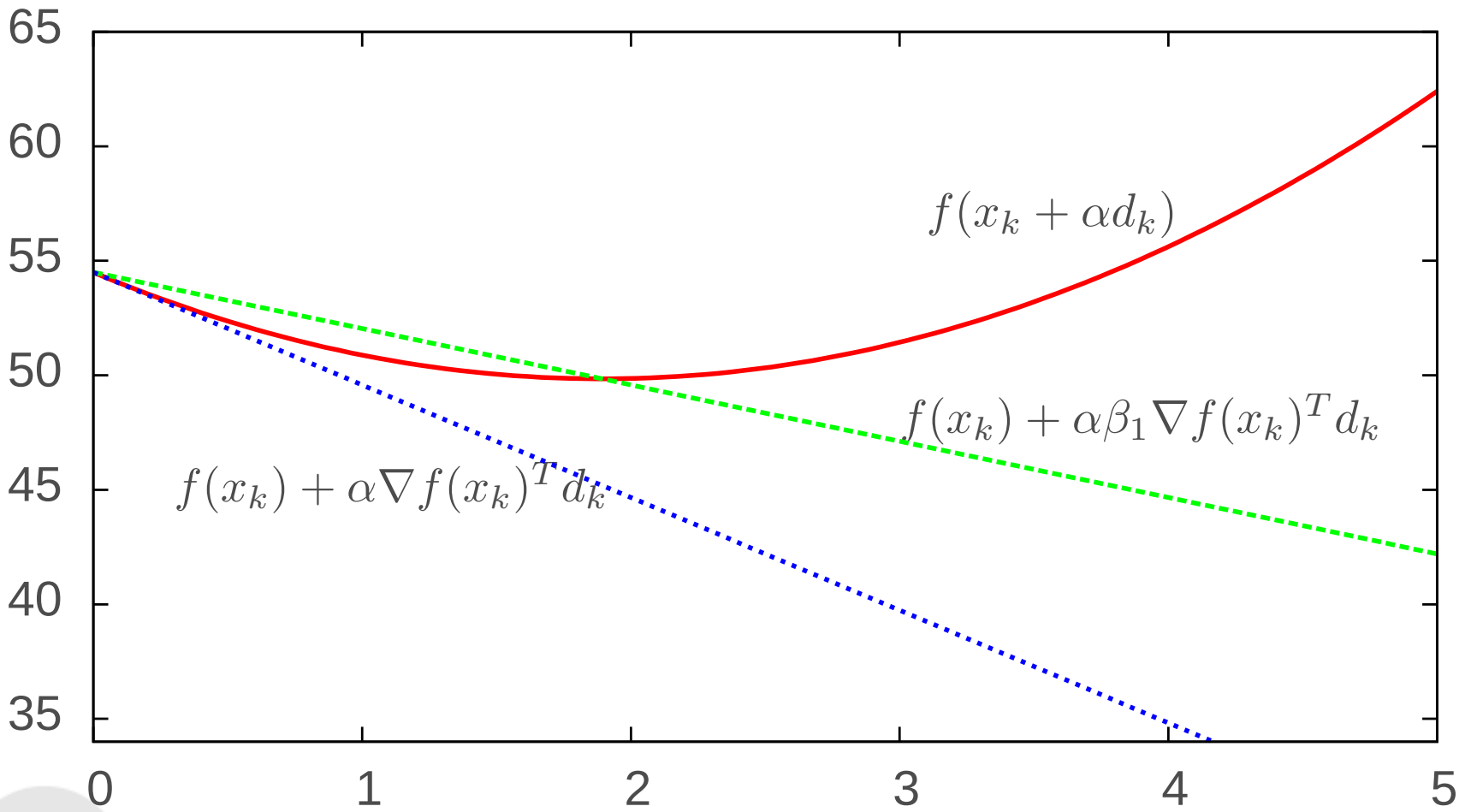
Diminution suffisante $\beta_1 = 0.5$



TRANSP-OR

ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE

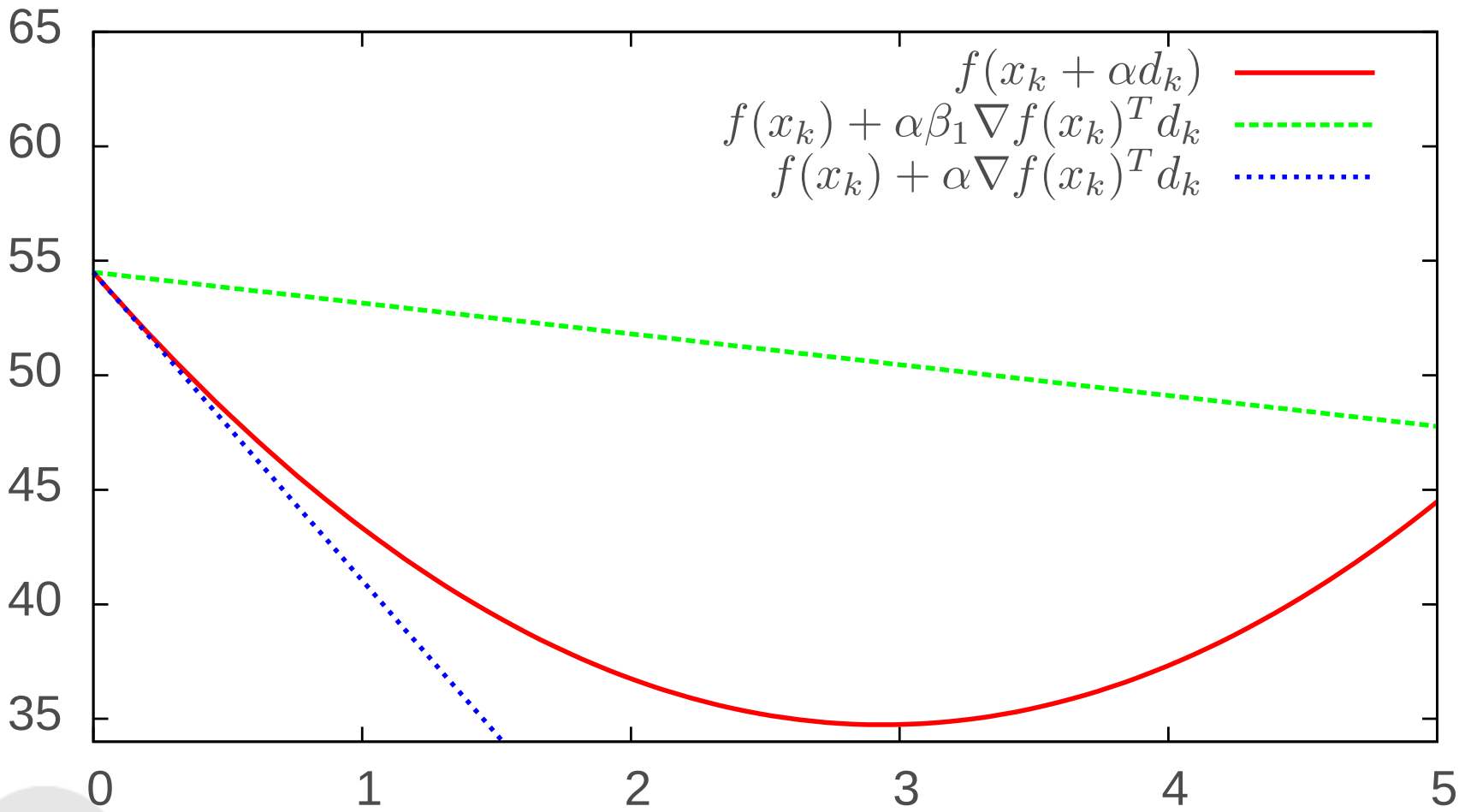
Diminution suffisante $\beta_1 = 0.5$



TRANSP-OR

ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE

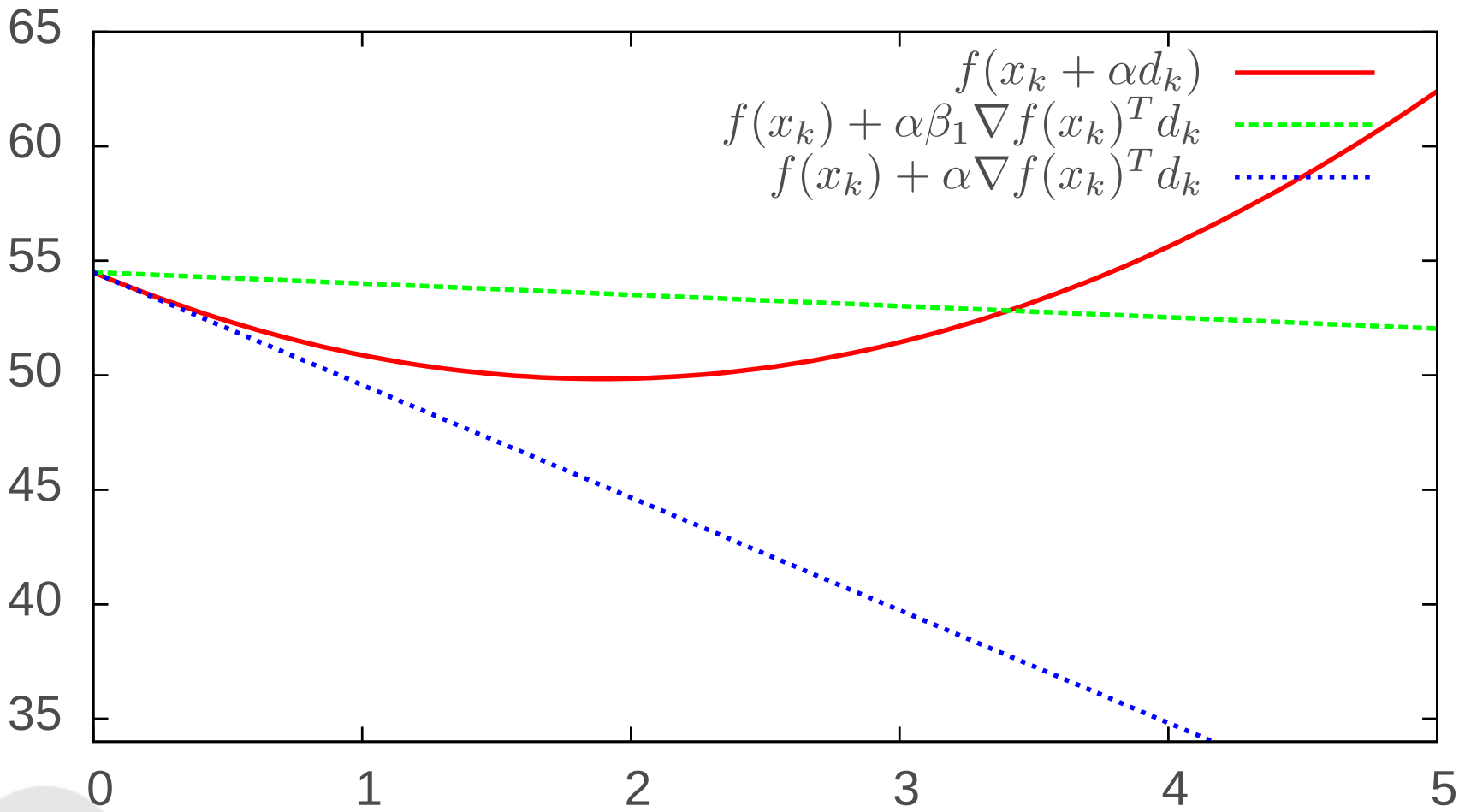
Diminution suffisante $\beta_1 = 0.1$



TRANSP-OR

ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE

Diminution suffisante $\beta_1 = 0.1$



TRANSP-OR

ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE

Choix du pas

- Exemple : $f(x) = x^2$
- Appliquons l'algorithme avec $x_0 = 2$, et

$$\begin{aligned} D_k &= 1/2x_k \\ \alpha_k &= 2^{-k-1}. \end{aligned}$$

- D_k est bien (défini) positif pour tout k.
- $\nabla f(x_k) = 2x_k \Rightarrow d_k = -D_k \nabla f(x_k) = -1$
- La méthode s'écrit

$$x_{k+1} = x_k - 2^{-k-1}$$

Choix du pas

Nous avons que

$$x_k = 1 + 2^{-k}.$$

(p. 269)

Dès lors

$$f(x_{k+1}) < f(x_k)$$

Cependant,

$$\lim_{k \to \infty} x_k = 1 \neq 0$$

k	x_k	d_k	α_k
0	+2.000000e+00	-1	+5.000000e-01
1	+1.500000e+00	-1	+2.500000e-01
2	+1.250000e+00	-1	+1.250000e-01
3	+1.125000e+00	-1	+6.250000e-02
4	+1.062500e+00	-1	+3.125000e-02
5	+1.031250e+00	-1	+1.562500e-02
⋮			
46	+1.000000e+00	-1	+7.105427e-15
47	+1.000000e+00	-1	+3.552714e-15
48	+1.000000e+00	-1	+1.776357e-15
49	+1.000000e+00	-1	+8.881784e-16
50	+1.000000e+00	-1	+4.440892e-16

Choix du pas

Pourquoi cela ne fonctionne pas ?

- Dégénérescence
- Pas trop petits

Notion de progrès suffisant

- $\nabla f(x_k)^T d_k < 0$
- Si α_k minimum dans la direction alors $\nabla f(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k = 0$
- La dérivée directionnelle augmente

Choix du pas

Progrès suffisant : seconde condition de Wolfe

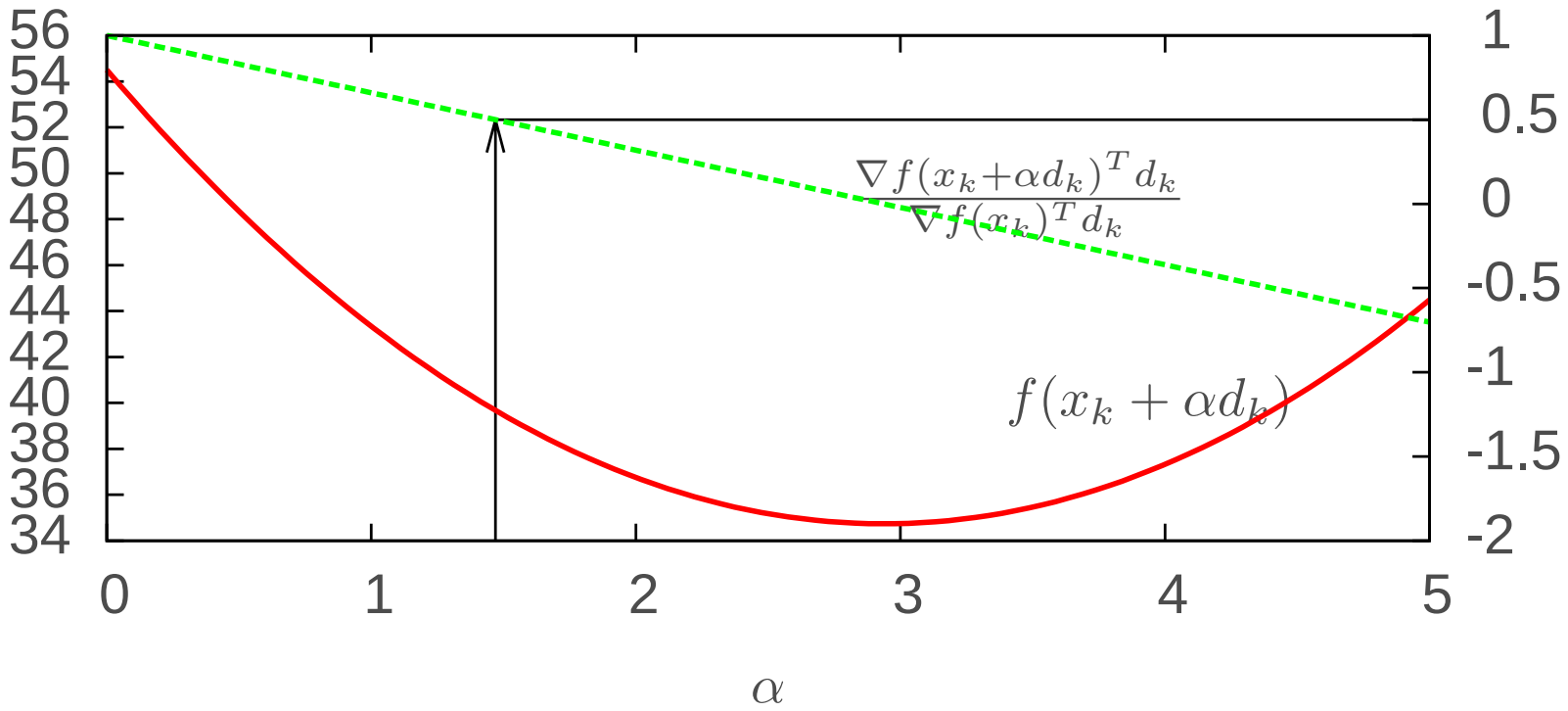
Soient $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ *une fonction différentiable, un point* $x_k \in \mathbb{R}^n$*, une direction (de descente)* $d_k \in \mathbb{R}^n$ *telle que* $\nabla f(x_k)^T d_k < 0$ *et un pas* $\alpha_k \in \mathbb{R}$, $\alpha_k > 0$. *On dira que le point* $x_k + \alpha_k d_k$ *apporte un* progrès suffisant *par rapport à* x_k *si*

$$\nabla f(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k \geq \beta_2 \nabla f(x_k)^T d_k,$$

avec $0 < \beta_2 < 1$. *Cette condition s'appelle la* seconde condition de Wolfe.

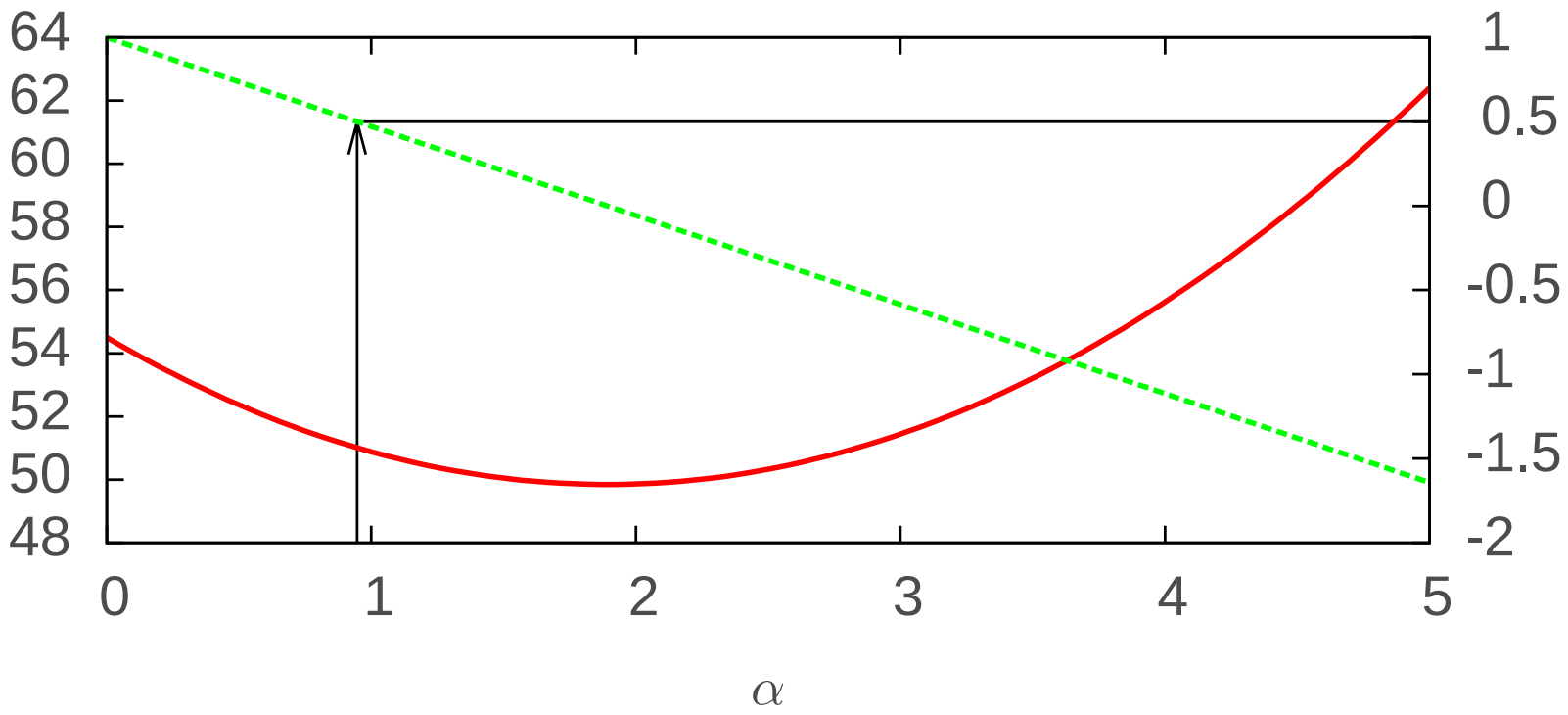
Diminution suffisante $\beta_2 = 0.5$

$$d_k = (-10/\sqrt{181} \quad -9/\sqrt{181})^T \qquad \alpha \geq 1.4687$$



Diminution suffisante $\beta_2 = 0.5$

$$d_k = (-2/\sqrt{5} \quad 1/\sqrt{5})^T \qquad \alpha \geq 0.94603$$



Conditions de Wolfe

Validité des conditions de Wolfe *Soient $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ une fonction différentiable, un point $x_k \in \mathbb{R}^n$ et une direction (de descente) $d_k \in \mathbb{R}^n$ telle que $\nabla f(x_k)^T d_k < 0$ et f est bornée inférieurement dans la direction d_k, c'est-à-dire il existe f_0 tel que $f(x_k + \alpha d_k) \geq f_0$ pour tout $\alpha \geq 0$. Si $0 < \beta_1 < 1$, il existe η tel que la première condition de Wolfe soit vérifiée pour tout $\alpha_k \leq \eta$. De plus, si $0 < \beta_1 < \beta_2 < 1$, il existe $\alpha_2 > 0$ tel que les deux conditions de Wolfe soient toutes deux vérifiées.*

(p. 271)

Algorithme : Recherche linéaire

Objectif

Trouver un pas α^* tel que les conditions de Wolfe soient vérifiées.

Input

- La fonction $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ différentiable;
- Le gradient de la fonction $\nabla f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$;
- Un vecteur $x \in \mathbb{R}^n$;
- Une direction de descente d telle que $\nabla f(x)^T d < 0$;
- Une première approximation de la solution $\alpha_0 > 0$.

Algorithme : Recherche linéaire

Input (suite)

- Des paramètres β_1 et β_2 tels que $0 < \beta_1 < \beta_2 < 1$.
- Un paramètre $\lambda > 1$.

Output

Un pas α^* tel que les conditions de Wolfe soient vérifiées.

Algorithme : Recherche linéaire

Initialisation

$i = 0$, $\alpha_\ell = 0$, $\alpha_r = +\infty$.

Itérations

- Si α_i vérifie les conditions, alors $\alpha^* = \alpha_i$. STOP.
- Si α_i viole Wolfe-1, i.e. $f(x_k + \alpha_k d_k) > f(x_k) + \alpha_k \beta_1 \nabla f(x_k)^T d_k$, alors le pas est trop long et

$$\begin{aligned} \alpha_r &= \alpha_i \\ \alpha_{i+1} &= \frac{\alpha_\ell + \alpha_r}{2} \end{aligned}$$

TRANSP-OR

ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE

Algorithme : Recherche linéaire

Itérations

- Si α_i ne viole pas Wolfe-1 et viole Wolfe-2, i.e.

$$\nabla f(x + \alpha_i d)^T d < \beta_2 \nabla f(x)^T d$$

alors le pas est trop court et

$$\begin{aligned} \alpha_\ell &= \alpha_i \\ \alpha_{i+1} &= \begin{cases} \frac{\alpha_\ell + \alpha_r}{2} & \text{si } \alpha_r < +\infty \\ \lambda \alpha_i & \text{sinon} \end{cases} \end{aligned}$$

- i = i+1

Algorithme : Recherche linéaire

$$f(x) = \tfrac{1}{2}x_1^2 + \tfrac{9}{2}x_2^2 \quad x = \begin{pmatrix} 10 \\ 1 \end{pmatrix} \quad d = \begin{pmatrix} \frac{-2}{\sqrt{5}} \\ \frac{1}{\sqrt{5}} \end{pmatrix}$$

$$\alpha_0 = 10^{-3} \quad \beta_1 = 0.3 \quad \beta_2 = 0.7 \quad \lambda = 20.$$

α_i	α_ℓ	α_r	Cond. violée
1.00000000e-03	0.00000000e+00	9.99999000e+05	Wolfe-2
2.00000000e-02	1.00000000e-03	9.99999000e+05	Wolfe-2
4.00000000e-01	2.00000000e-02	9.99999000e+05	Wolfe-2
8.00000000e+00	4.00000000e-01	9.99999000e+05	Wolfe-1
4.20000000e+00	4.00000000e-01	8.00000000e+00	Wolfe-1
2.30000000e+00	4.00000000e-01	4.20000000e+00	—

TRANSP-OR

ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE

Méthode de Newton

- Combiner les idées de
  1. plus forte pente préconditionnée
  2. Newton
  3. recherche linéaire
- Itération de Newton locale

$$x_{k+1} = x_k - \nabla^2 f(x_k)^{-1} \nabla f(x_k),$$

- Itération de plus forte pente préconditionnée

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k D_k \nabla f(x_k),$$

- Si $\nabla^2 f(x_k)^{-1}$ déf. positive, et $\alpha_k = 1$ acceptable, itérations équivalentes.

Méthode de Newton

- Si $\alpha_k = 1$ non acceptable, algorithme de recherche linéaire
- Si $\nabla^2 f(x_k)^{-1}$ non définie positive, définir

$$D_k = (\nabla^2 f(x_k) + E)^{-1}$$

avec E telle que D_k soit définie positive. Typiquement, $E = \tau I$

- Exemple :

$$\nabla^2 f(x_k) = \begin{pmatrix} -2 & 0 \\ 0 & -3 \end{pmatrix} \quad E = 3.1 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \nabla^2 f(x_k) + E = \begin{pmatrix} 1.1 & 0 \\ 0 & 0.1 \end{pmatrix}$$

Algorithme : Newton avec recherche linéaire

Objectif

Trouver une approximation d'un minimum local du problème

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

Input

- La fonction $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ différentiable;
- Le gradient de la fonction $\nabla f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$;
- Le hessien de la fonction $\nabla^2 f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^{n \times n}$;
- Une première approximation de la solution $x_0 \in \mathbb{R}^n$;
- La précision demandée $\varepsilon \in \mathbb{R}$, $\varepsilon > 0$.

Algorithme : Newton avec recherche linéaire

Output

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

Initialisation

$k = 0$

Algorithme : Newton avec recherche linéaire

Itérations

- Calculer une matrice triangulaire inférieure L_k et τ tels que

$$L_k L_k^T = \nabla^2 f(x_k) + \tau I,$$

  en utilisant l'algorithme précédent
- Trouver z_k en résolvant le système triangulaire $L_k z_k = \nabla f(x_k)$.
- Trouver d_k en résolvant le système triangulaire $L_k^T d_k = -z_k$.

Algorithme : Newton avec recherche linéaire

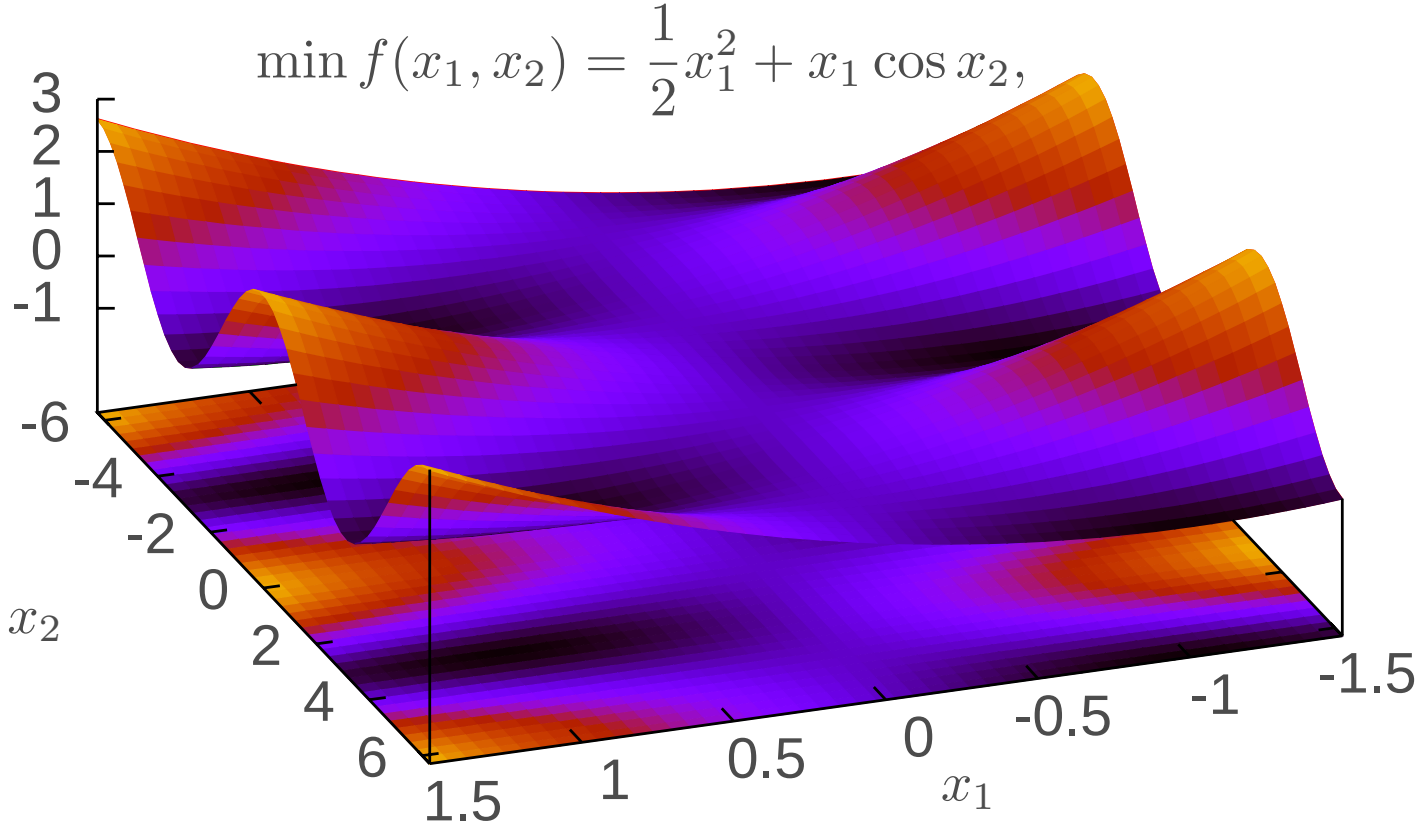
Itérations (suite)

- Déterminer α_k en appliquant la recherche linéaire avec $\alpha_0 = 1$.
- $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$.
- $k = k + 1$.

Critère d'arrêt

Si $\|\nabla f(x_k)\| \leq \varepsilon$, alors $x^* = x_k$.

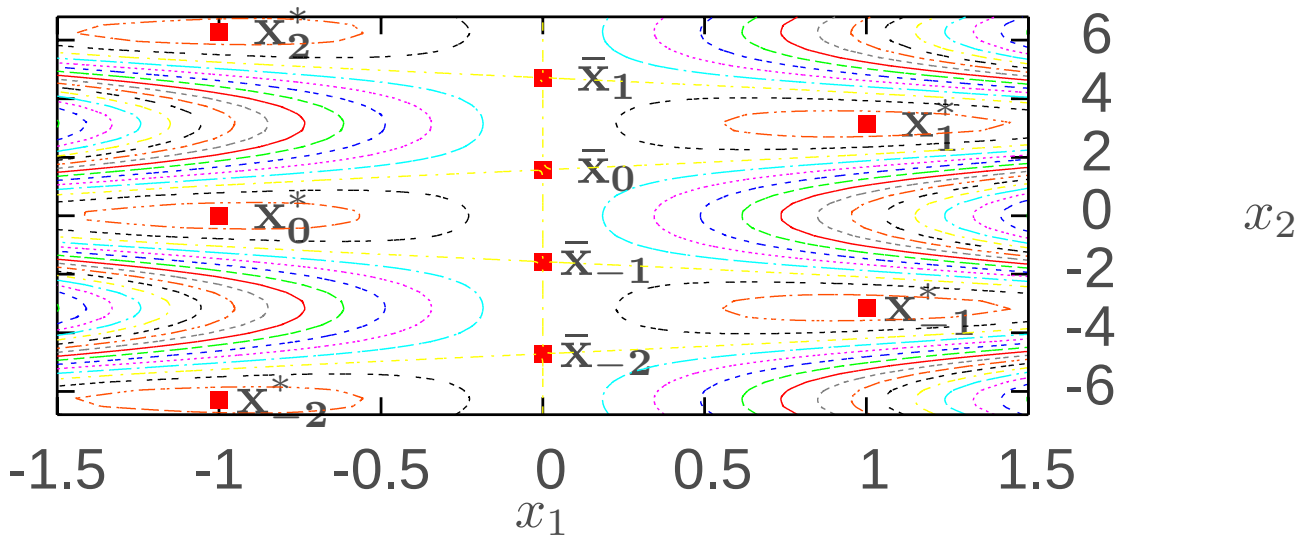
Newton avec recherche linéaire



Point de départ $x_0 = (1\ 1)^T$.

Newton avec recherche linéaire

$$\min f(x_1, x_2) = \frac{1}{2}x_1^2 + x_1 \cos x_2,$$

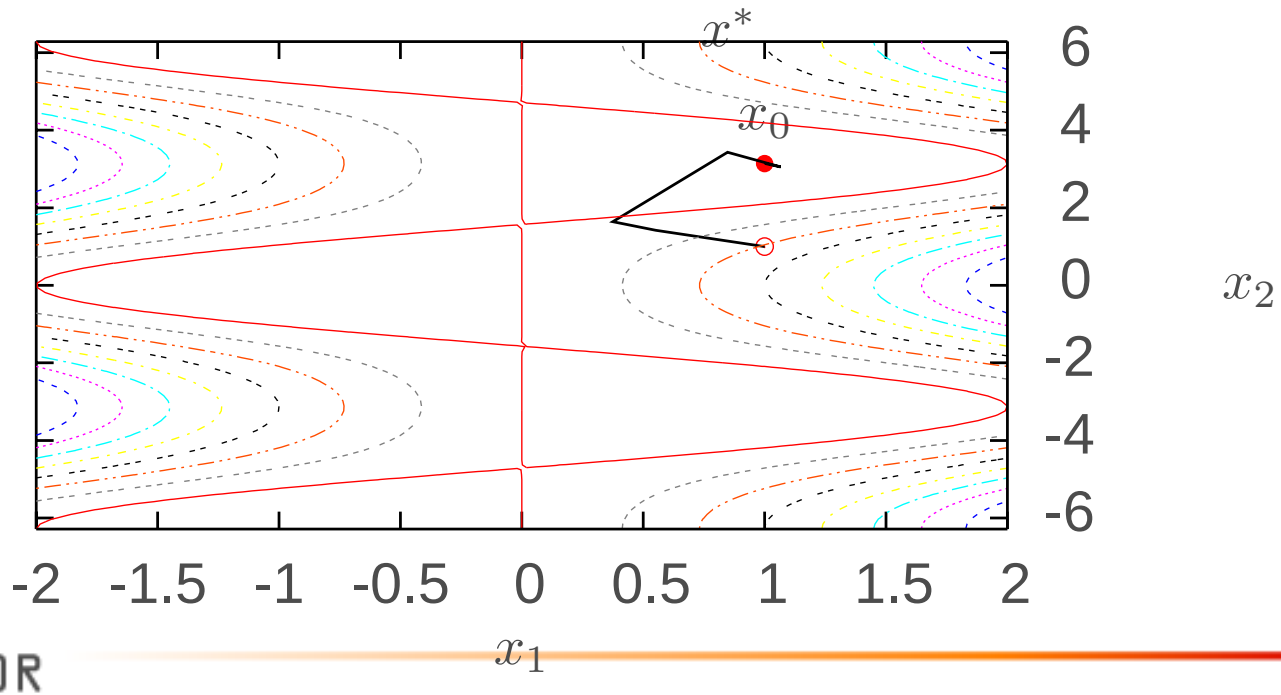


Point de départ $x_0 = (1\ 1)^T$.

Newton avec recherche linéaire

Solution:

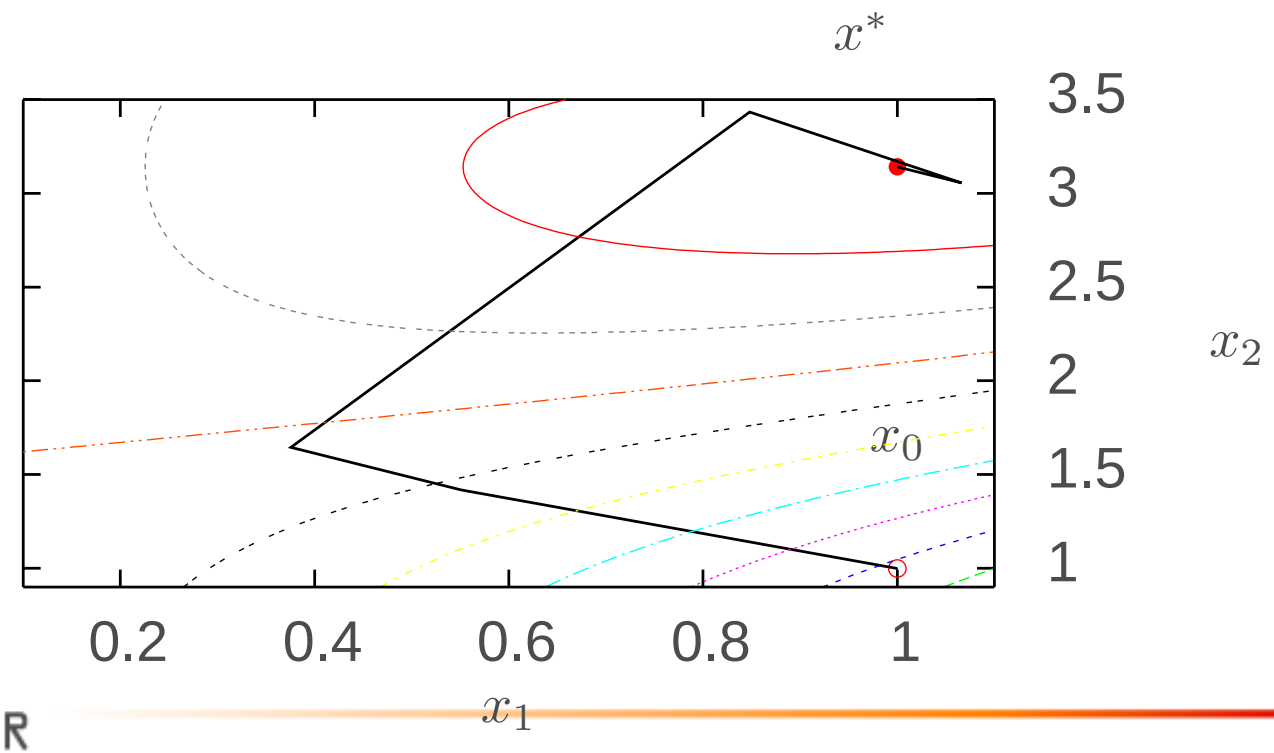
$$x^* = \begin{pmatrix} 1 \\ \pi \end{pmatrix} \quad \nabla f(x^*) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \nabla^2 f(x^*) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$



Newton avec recherche linéaire

Solution:

$$x^* = \begin{pmatrix} 1 \\ \pi \end{pmatrix} \quad \nabla f(x^*) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \nabla^2 f(x^*) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$



Newton avec recherche linéaire

k	$f(x_k)$	$\|\nabla f(x_k)\|$	α_k	τ
0	1.04030231e+00	1.75516512e+00		
1	2.34942031e-01	8.88574897e-01	1	1.64562250e+00
2	4.21849003e-02	4.80063696e-01	1	1.72091923e+00
3	-4.52738278e-01	2.67168927e-01	3	8.64490594e-01
4	-4.93913638e-01	1.14762780e-01	1	0.00000000e+00
5	-4.99982955e-01	5.85174623e-03	1	0.00000000e+00
6	-5.00000000e-01	1.94633135e-05	1	0.00000000e+00
7	-5.00000000e-01	2.18521663e-10	1	0.00000000e+00
8	-5.00000000e-01	1.22460635e-16	1	0.00000000e+00

Résumé

- Algorithme complet
- Combinaison entre
  - méthode de Newton locale
  - plus forte pente préconditionnée
  - recherche linéaire