Chapitre 2: Optimisation sans contrainte

Abdelkrim El MOUATASIM
Professeur Habilité en Mathématique Appliquée
https://sites.google.com/a/uiz.ac.ma/elmouatasim/

FPO - SMI - S6

27 février 2018

Plan

Organisation du cours

La forme générale d'optimisation est la suivante :

$$\begin{cases} \min & f(x) \\ \text{s.c.} & g(x) \leqslant 0 \\ & h(x) = 0 \\ & x \in \mathbb{R}^n. \end{cases} \tag{1}$$

Il va de soi que la plupart des problèmes réels ou industriels ne sont pas initialement sous la forme proposée. C'est pourquoi un des premiers travaux consiste en général à mettre le problème initial sous une forme standard. Par exemple, un problème donné sous forme

$$\max_{x \in \mathbb{R}^n} g(x),$$

se mettra sous la forme standard d'optimisation sans contraints de (1) en posant $f(x) = -g(x)$.

Considérons tout d'abord le cas d'un modèle de programmation non-linéaire dans lequel il n'y a aucune contrainte :

$$\min f(x_1, x_2, \ldots, x_n). \tag{2}$$

Il est alors possible de montrer que si $x^* = (x_1^*, x_2^*, \ldots, x_n^*)$ est un minimum local, alors

$$\frac{\partial f(x^*)}{\partial x_j} = 0, \; j = 1, 2, \ldots, n.$$

En d'autres mots, lorsque la dérivée s'annule en un point donné, ce point *peut être* un maximum local, mais l'inverse n'est pas nécessairement vérifié : ce point peut aussi être un minimum local ou un point de selle. Par contre, si f est convexe, un point où la dérivée s'annule est nécessairement un minimum global. De plus, si f est strictement convexe, un tel minimum global est unique.

Dans le cas d'une fonction non convexe, afin de trouver un minimum global, il faut

- identifier tous les minima locaux ;
- identifier celui de plus petit valeur ;
- vérifier que la fonction est bornée inférieurement (sinon, il n'y a pas de minimum global).

Le problème est qu'identifier tous les minima locaux peut être extrêmement difficile.

Considérons notre problème d'optimisation (1), que l'on écrira un peut différemment, en mettant les contraintes sous la forme $x \in K \subset \mathbb{R}^n$:

$$\min_{x \in K} f(x). \tag{3}$$

Definition

Une ensemble $K \subset \mathbb{R}^n$ est dit compact si, de toute suite $\{x_k\}$, où $x_k \in K, \quad \forall k$, on peut extraire une sous-suite convergente.

Theorem

Un ensemble $K \subset \mathbb{R}^n$ est compact si et seulement si il est fermé et borné.

Example

Dans $\mathbb{R}$, les intervalles fermés du type $[a, b]$ sont compacts. La notion de fermeture signifie qu'une suite $\{x_k\}$, où $x_k \in K, \quad \forall k$, doit converger vers une limite $x \in K$. Pour illustrer sur un exemple qu'un intervalle ouvert dans $\mathbb{R}$ ne peut pas être compact : soit $K = \,]\,0, 1\,]$ et la suite $x_k = \frac{1}{k}$, on a bien $x_k \in K$ mais $\lim_{k \to 0} x_k = 0 \notin K$.

Théoremes généraux d'existence

Theorem

Si $f : K \in \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ est continue et si de plus K est un ensemble compact, alors le problème (3) admet une solution optimale $x^* \in K$, qui vérifie donc

$$f(x^*) \leqslant f(x), \quad \forall x \in K.$$

Theorem

Soit $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ une fonction continue sur $\mathbb{R}^n$. Si

$$\lim_{\|x\| \to \infty} f(x) = \infty,$$

alors (1) admet une solution optimale x^*.

Théoremes généraux d'existence

Démonstration.

Soit $x_0 \in \mathbb{R}^n$. Puisque $\lim_{\|x\|\to\infty} f(x) = \infty$ il existe $M > 0$ tel que $\|x\| > M \Rightarrow f(x) > f(x_0)$, donc

$$\exists M > 0, \quad f(x) \leqslant f(x_0) \Rightarrow \|x\| \leqslant M.$$

Puisque x^* est caractérisé par $f(x^*) \leqslant f(x), \quad \forall x \in \mathbb{R}^n$, on a donc forcément $\|x^*\| \leqslant M$. Donc x^* est solution du problème

$$\min_{\|x\|\leqslant M} f(x),$$

et le théorème précédents s'applique, la boule $\{x \in \mathbb{R}^n, \quad \|x\| \leqslant M\}$ étant compacte. □

Unicité

Theorem

Si $f : K \subset \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ strictement convexe sur K convexe. Le minimum de f sur K, s'il existe, est unique

Démonstration.

Soit donc $x^* \in K$ tel que $f(x^*) \leqslant f(x), \quad \forall x \in K$. Supposons qu'il existe $y^* \neq x^*$ tel que $f(y^*) \leqslant f(x), \quad \forall x \in K$. Formons pour $\lambda \in \,]0,1[$ le vecteur

$$u = \lambda y^* + (1-\lambda)x^*.$$

D'après la stricte convexité de f et puisque nécessairement $f(y^*) = f(x^*)$ on a

$$f(u) < \lambda f(y^*) + (1-\lambda)f(x^*) = f(x^*),$$

ce qui contredit le fait que x^* soit un minimum. On a donc $x^* = y^*$. $\square$

Conditions nécessaires

Theorem

Soit $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ *différentiable et* x^* *vérifiant*

$$f(x^*) \leqslant f(x), \quad \forall x \in \mathbb{R}^n,$$

alors on a nécessairement

$$\nabla f(x^*) = 0.$$

Démonstration.

Pour tout $t \in \mathbb{R}^*$ et pour $h \in \mathbb{R}^n$ on a $f(x^*) \leqslant f(x^* + th)$. On a donc

$$\lim_{t \to 0+} \frac{f(x^*) - f(x^* + th)}{t} = \nabla f(x^*)^T h \leqslant 0,$$

et

$$\lim_{t \to 0-} \frac{f(x^*) - f(x^* + th)}{t} = \nabla f(x^*)^T h \geqslant 0,$$

donc $\nabla f(x^*)^T h = 0, \quad \forall h \in \mathbb{R}^n$, donc $\nabla f(x^*)^T = 0$ (prendre par exemple $h = \nabla f(x^*)$). $\square$

Conditions nécessaires et suffisantes

Theorem

Soit $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ convexe et différentiable. Si x^* vérifiant

$$\nabla f(x^*) = 0,$$

alors on

$$f(x^*) \leqslant f(x), \quad \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

Démonstration.

Soient $x \in \mathbb{R}^n$ et $\lambda \in [0, 1]$. Puisque f est convexe on a

$$f(\lambda x + (1-\lambda)x^*) \leqslant \lambda f(x) + (1-\lambda)f(x^*).$$

On retranche $f(x^*)$ de chaque côté de l'inégalité, on note que $\lambda x + (1-\lambda)x^* = x^* + \lambda(x - x^*)$, puis on divis par λ, ce qui donne l'inégalité

$$\frac{f(x^* + \lambda(x - x^*)) - f(x^*)}{\lambda} \leqslant f(x) - f(x^*).$$

Et si on fait tendre λ vers 0 on obtient $\nabla f(x^*)^T(x - x^*) \leqslant f(x) - f(x^*)$, donc $0 \leqslant f(x) - f(x^*)$. $\square$

Conditions nécessaires et suffisantes

Theorem

Soit $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ deux fois différentiable. Si

$$\begin{cases} \nabla f(x^*) = 0, \\ \nabla^2 f(x^*) \text{est définie positive}, \end{cases}$$

alors x^* est un minimum local de f.

Démonstration.

On a

$$\begin{aligned} f(x^* + th) &= f(x^*) + t\nabla f(x^*)^T h + \tfrac{t^2}{2} h^T \nabla^2 f(x^*) h + t^2 \|h\|^2 \epsilon(th), \\ &= f(x^*) + \tfrac{t^2}{2} h^T \nabla^2 f(x^*) h + t^2 \|h\|^2 \epsilon(th). \end{aligned}$$

On a donc pour $t > 0$

$$\frac{f(x^* + th) - f(x^*)}{t^2} = \frac{1}{2} h^T \nabla^2 f(x^*) h + \|h\|^2 \epsilon(th).$$

Donc si t est suffisamment petit on aura bien $f(x^* + th) - f(x^*) > 0$ puisque $h^T \nabla^2 f(x^*) h > 0$. $\square$

Cas de fonctions à deux variables

Tout comme

$$\frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial y \partial x},$$

on a :

$$\Delta_1 = \frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial x^2},$$

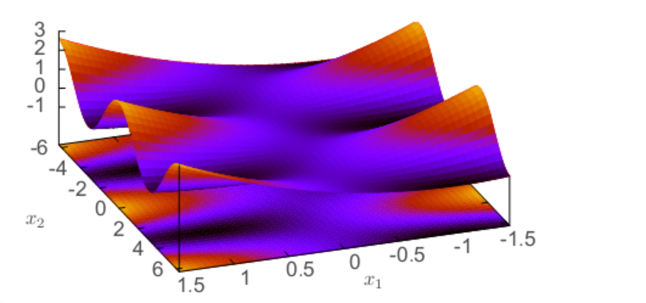
$$\Delta_2 = \frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial x^2}\frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial y^2} - (\frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial x \partial y})^2,$$

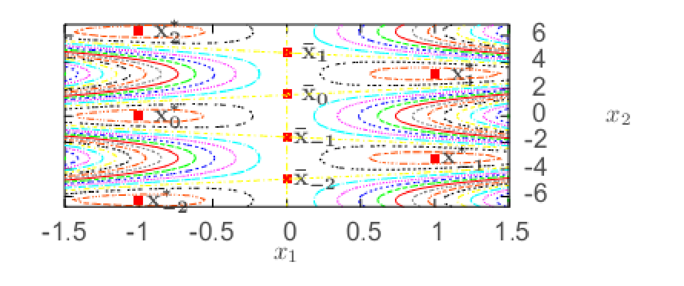
Ainsi

- $\Delta_1 > 0$ et $\Delta_2 > 0 \longrightarrow$ minimum.
- $\Delta_1 < 0$ et $\Delta_2 > 0 \longrightarrow$ maximum.
- Δ_1 quelconque et $\Delta_2 < 0. \longrightarrow$ point-selle.
- Δ_1 quelconque et $\Delta_2 = 0. \longrightarrow$ on ne peut pas conclure.

Example

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





Example (suite)

Utilisons les cond. d'opt. pour identifier les minima locaux

$$\nabla f(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} x_1 + \cos x_2 \\ -x_1 \sin x_2 \end{pmatrix}.$$

Le gradient s'annule pour

- $x_k^* = ((-1)^{k+1}, k\pi)^T, \quad k \in \mathbb{Z},$
- $\bar{x}_k = (0, \frac{\pi}{2} + k\pi)^T, \quad k \in \mathbb{Z},$

$$\nabla^2 f(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 1 & -\sin x_2 \\ -\sin x_2 & -x_1 \cos x_2 \end{pmatrix}.$$

$$\nabla^2 f(x_k^*) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \nabla^2 f(\bar{x}_k) = \begin{pmatrix} 1 & (-1)^{k+1} \\ (-1)^{k+1} & 0 \end{pmatrix}.$$

- x_k^* vérifie les conditions suffisantes d'optimalité pour tout k
- $\bar{x}_k$ ne vérifie les conditions nécessaires d'optimalité pour aucun k.

Résolution d'équations

- L'identification des points critiques revient à résoudre

$$\nabla f(x) = 0.$$

- Il s'agit d'un système de n équations à n inconnues.
- On verra que les conditions d'optimalité pour les problèmes avec contraintes se ramènent également à un système d'équations.
- Analysons d'abord les algorithmes permettant de résoudre ces systèmes d'équations.
- Ils seront ensuite adaptés pour les problèmes d'optimisation.

Histoire d'algorithme

- Abu Ja'far Muhammad ibn Musa Al-Khwarizmi (780-840)
- Traité al Kitab almukhtasar fi hisab al-jabr w'al muqabala, qui est à l'origine de l'algèbre
- traduction latine de cet ouvrage, intitulée Algoritmi de numero indorum

Organisation du cours

1. Introduction
   - Formulation générale des problèmes d'optimisation
   - Résultats d'existence et d'unicité
   - Conditions d'optimalité
   - Algorithme
   - Histoire
2. Fonctions à une seule variable
   - Méthode de la bissection
   - Méthode de Newton
3. Fonctions à plusieurs variables
   - Méthode du gradient
   - La méthode de Newton

Considérons en premier lieu le cas le plus simple : la fonction objectif f est concave et comporte une seule variable. Il est alors possible de montrer que, si x^* est une solution optimale et il existe x^i et x^u tels que $x^i \leqslant x^* \leqslant x^u$ et $f(x^i) \neq f(x^*)$, $f(x^u) \neq f(x^*)$, alors il existe a et b tels que $a \leqslant x^* \leqslant b$ et

$$\frac{df(x)}{dx} > 0, \text{ si } x < a,$$
$$\frac{df(x)}{dx} = 0, \text{ si } x = x^*,$$
$$\frac{df(x)}{dx} < 0, \text{ si } x > b.$$

Si f est strictement concave en x^*, alors $a = x^* = b$, comme illustré sur la Figure 1.

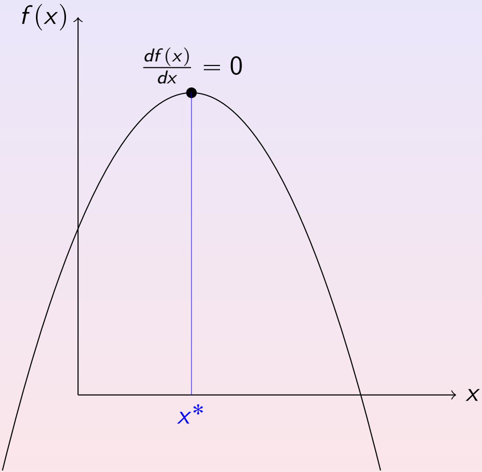


Figure : Maximum d'une fonction strictement concave

Algorithm (Méthode de la bissection)

1. *Nous fixons d'abord une borne inférieur* x^i *pour laquelle la dérivée en ce point est strictement positive.*
2. *Nous déterminons également une borne supérieure* x^u *pour laquelle la dérivée en ce point est strictement négative.*
3. *Si les deux bornes ne sont pas suffisamment près l'une de l'autre, i.e. la distance* $x^u - x^i$ *est trop grande, nous prenons le point milieu entre les deux bornes comme point candidat* x^c *:*

$$x^c = \frac{x^i + x^u}{2},$$

et nous passons à l'étape suivante. Sinon, c'est-à-dire si

$$|x^u - x^i| \leqslant 2\epsilon,$$

avec $\epsilon > 0$ *suffisamment petit, nous nous arrêtons :* x^c *est une approximation suffisamment précise de la solution optimale.*

Algorithm (Méthode de la bissection : suite)

4 *Si la dérivée en* x^c *est nulle, arrêt :* x^c *est la solution optimale.*

5 *Si la dérivée en* x^c *est positive, nous posons* $x^i = x^c$.

6 *Si la dérivée en* x^c *est négative, nous posons* $x^u = x^c$.

7 *Retour à l'étape 3.*

Programmation sous Scilab de la méthode de la bi-section

```
function x=bissection(a,b,prec)
// prec = precision
  x=0.5*(a+b);
  if (b-a>prec)
    if (df(a)*df(x)<0)
      x=bissection(a,x,prec);
    else
      x=bissection(x,b,prec);
    end
  end
endfunction
```

Example

Soit $f(x) = \frac{1}{4}x^4 + \frac{1}{3}x^3 - \frac{3}{2}x^2 - 3x$. Si x est l'optimum de f donc $f'(x) = x^3 + x^2 - 3x - 3 = 0$. Dans l'intervalle $[x_1 = 1, x_2 = 2]$ il y a une racine car est continue et $f'(1)f'(2) = -4 * 3 < 0$. On connait les racines pour ce cas : $f'(x) = (x^2 - 3)(x + 1) = 0$, on a trois racines réels : $r_1 = -1, r_2 = -\sqrt{3}, r_3 = \sqrt{3}$

1. $x_m = \frac{x_1+x_2}{2} = 1.5$ et $f'(x_m) = -1.875$
2. Puisque $f'(x_m)f'(x_2) < 0$ alors $x_1 = x_m = 1.5$ et $x_2 = 2$
3. $x_m = \frac{x_1+x_2}{2} = 1.75$ et $f'(x_m) = 0.17187$
4. Puisque $f'(x_1)f'(x_m) = -1.875 * 0.17187 < 0$ alors $x_1 = 1.5$ et $x_2 = x_m = 1.75$
5. $x_m = \frac{x_1+x_2}{2} = 1.625$ alors $f'(x_m) = -0.94335$
6. Puisque $f'(x_m)f'(x_2) = -0.94335 * 0.17187 < 0$ la racine se trouve donc dans l'intervalle réduit $[x_1 = 1.625, x_2 = 1.75]$
7. $x_m = \frac{x_1+x_2}{2} = 1.6875$ alors $f'(x_m) = -0.40942$
8. Puisque $f'(x_m)f'(x_2) = -0.40942 * 0.17187 < 0$ la racine se trouve donc dans l'intervalle réduit $[x_1 = 1.6875, x_2 = 1.75]$.
   Et ainsi de suite...

Example (suite)

Méthode de la bissection : $f'(x) = x^3 + x^2 - 3x - 3 = 0$						
x_1	x_2	x_m	$f'(x_1)$	$f'(x_2)$	$f'(x_m)$	Err.abs
1.0	2.0	1.5	-4.0	3.0	-1.875	0.5
1.5	2.0	1.75	-1.875	3.0	+0.171 87	0.25
1.5	1.75	1.625	-1.875	0.171 87	-0.943 35	0.125
1.625	1.75	1.6875	-0.943 35	0.171 87	-0.409 42	0.0625
1.6875	1.75	1.718 75	-0.409 42	0.171 87	-0.124 78	0.03125

On voit clairement que l'intervalle devient de plus petit ($|x_2 - x_1|$)et que l'on se dirige vers 1.732050($\simeq r_3 = \sqrt{3}$).
Puisque $f'(r_3) = 0$ et $f''(r_3) > 0$ donc r_3 est un minimum local de f.
On voit aussi que la méthode a certain désavantager (lenteur en particulier, et comment on s'arrête ?) : critéres d'arrêts

1. L'erreur absolue : $|r - x_m| \simeq \frac{|x_1 - x_2|}{2} < \epsilon_{abs}$
2. L'erreur relative : $\frac{|r - x_m|}{|r|} \simeq \frac{|x_1 - x_2|}{|x_m|} < \epsilon_{rel}$
3. On peut arrêter l'algorithme si $|f'(x_m)| < \epsilon_f$

Méthode bi-section : Erreurs

Soit $[x_1 - x_2] = [a, b]$ l'intervalle de départ de longueur $L = b - a$. Aprés une itération on a $x_m = \frac{x_1 - x_2}{2}$ et le nouvel intervalle $[x_1 - x_2]$ est de longueur $\frac{L}{2}$. A l'étape n,la longueur est $\frac{L}{2^n}$. On sait que $r \in [x_1, x_2]$ et

$$|r - x_m| \leqslant \frac{L}{2^n}$$

Étant donnée une erreur absolue Δr, c'est quoi la valeur de n (nombre d'itérations)pour avoir

$$|r - x_m| \leqslant \frac{L}{2^n} < \Delta r$$

La réponse est : $n > \frac{\ln\left(\frac{L}{\Delta r}\right)}{\ln 2}$

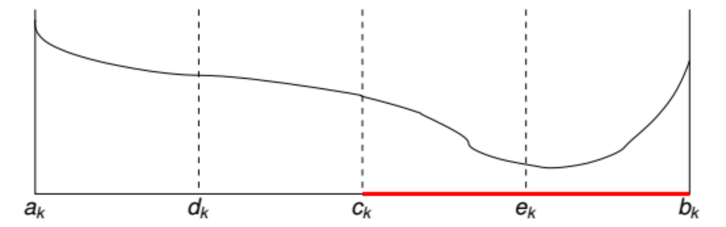
Exemple : Dans l'exemple précédent, $L = 2.0 - 1.0$. Si on veut une erreur absolue plus petit que $0.5\ 10^{-2}$, ce qui revient á assurer 3 chiffres significatifs,il faut au mois :

$n > \frac{\ln\left(\frac{L}{\Delta r}\right)}{\ln 2} = n > \frac{\ln\left(\frac{1.0}{0.5\ 10^{-2}}\right)}{\ln 2} = 7.64$. Donc il nous fera 8 itération pour assurer la précision fixée.

Méthode de la régle d'Or

L'algorithme par dichotomie

- à l'itération k : intervalle $[a_k, b_k]$
- $d_k = \frac{3a_k+b_k}{4}$ $\quad c_k = \frac{a_k+b_k}{2}$ $\quad e_k = \frac{a_k+3b_k}{4}$
- $f(c_k) > f(e_k) \Longrightarrow a_{k+1} = c_k$ et $b_{k+1} = b_k$
- $f(d_k) > f(c_k) \Longrightarrow a_{k+1} = a_k$ et $b_{k+1} = c_k$
- sinon $a_{k+1} = d_k$ et $b_{k+1} = e_k$
- arrêt : quand $b_k - a_k \leqslant \epsilon$



Méthode de Newton

Soit une équation à résoudre de la forme :

$$f'(x) = 0$$

À partir d'une valeur initiale x_0 de la solution, on cherche une correction δx telle que :

$$0 = f'(x_0 + \delta x) \approx f'(x_0) + f''(x_0)\delta x$$

on peut alors isoler la correction recherchée :

$$\delta x = -\frac{f'(x_0)}{f''(x_0)}$$

la correction δx est en principe la quantité que l'on doit ajouter à x_0 pour annuler la fonction $f'(x)$.puisque nous avons négligé les termes d'ordre supérieur ou égal à 2 dans le développement de taylor, cette correction n'est pas parfaite et l'on pose :

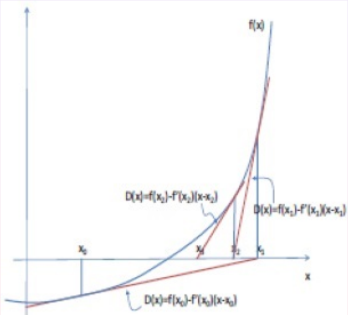
$$x_1 = x_0 + \delta \mathrm{x}$$

Interprétation géométrique de la méthode de Newton

Menons par le point $(x_n, f'(x_n))$ la tangente à la courbe $y = f'(x)$ fournie par

$$D(x) = f'(x_n) + f''(x_n)(x - x_n)$$

si on cherche le point d'intersection de la tangente, $D(x) = 0$, avec l'axe des x, on retrouve
le point x_{n+1} tel que défini par l'algorithme.



Algorithme de la méthode de Newton

1. Étant donné ϵ_a, un critére d'arrêt
2. Étant donné N, le nombre maximal d'intératios
3. Étant donné x_0,une valeur initial de la solution
4. Effectuer : $x_{n+1} = x_n - \frac{f'(x_n)}{f''(x_n)}$
5. si $\frac{|x_{n+1} - x_n|}{|x_{n+1}|} < \epsilon_a$:
    - convergence atteint
    - écrir la solution x_{n+1} :arrêt
6. si le nombre maximal d'itérations N est atteint :
    - convergence non atteinte en N iterations : arrêt
7. retour à l'étape 4.

Programmation sous Scilab de la méthode de Newton

```
function x=Newton(x0,prec)
  x=x0-df(x0)/d2f(x0);
  if abs(df(x))>prec
    x=Newton(x,prec);
  end
endfunction
```

Example

$\min_x f(x) = -\exp(-x) - \frac{1}{2}x^2$

Méthode de Newton : $f'(x) = e^{-x} - x$			
n	x_n	$\lvert e_n \rvert$	$\left\lvert \frac{e_{n+1}}{e_n} \right\rvert$
0	0.000 0000	$0.5671 * 10^{+0}$	$0.1183 * 10^{+0}$
1	0.500 0000	$0.6714 * 10^{-1}$	$0.1239 * 10^{-1}$
2	0.566 3110	$0.8323 * 10^{-3}$	$0.1501 * 10^{-3}$
3	0.567 1432	$0.1250 * 10^{-6}$	$\simeq 0$
4	0.567 1433	$0.4097 * 10^{-9}$	—

On remarque la convergence très rapide de cette méthode.

Étude de convergence

On peut associer la méthode de Newton à l'application de la méthode de point fixe sur une fonction g particulière

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

On retrouve les résultats de convergence obtenue pour le point fixe. On peut cependant revoir les résultats en fonction de f' puisque la relation en f' et g est maintenant fixée.

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

Pour une racine r de f' on aura donc

$$g^{'}(r) = 0$$

et on a ainsi la convergence quadratique que l'on recherche.

Principe

- Déterminer un intervalle $[a, b]$ sur lequel il y a convergence de Newton n'est pas toujours facile. Il existe cependant un théorème qui donne une condition suffisante.

Theorem (convergence globale de la méthode de Newton)

Si la fonction $f'(x)$ définie sur $[a, b]$ vérifie :

1. $f'(a)f'(b) < 0$
2. $\forall x \in [a, b] \quad f''(x) \neq 0$ *(stricte monotonie de f')*
3. $\forall x \in [a, b] \quad f'''(x) \neq 0$ *(concativité de f' dans le même sens.)*

Alors en choisissant x_0 de $[a, b]$ tel que $f'(x_0)f'''(x_0) > 0$, les itérations de Newton convergent vers l'unique solution x^* de $f'(x) = 0$ dans $[a, b]$. De plus, la convergence est quadratique.

Méthode de Newton :Remarques

- La fonction f' doit être dérivable.
- x_{k+1} peut ne pas être calculable si $f''(x_k) = 0$ ou si x_k n'est pas dans le domaine de définition de f'.
- chaque itération nécessite une évaluation de f' et une évaluation de f''.
- cette méthode est souvent appelée aussi méthode de Newton-Raphson.
- la méthode de Newton est une méthode de point fixe puisque x_{k+1} peut s'écrire sous la forme $x_{k+1} = g(x_k)$ avec

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

Organisation du cours

Principe des méthodes de descente

Definition

Soit $f : \mathbb{R}^n \Longrightarrow \mathbb{R}$. On dira qu'un vecteur d est une direction de descente en x s'il existe $\bar{t} > 0$ tel que

$$f(x + td) < f(x), \quad t \in]0, \bar{t}].$$

Le principe d'une méthode de descente consiste à faire les itérations suivantes

$$x_{k+1} = x_k + t_k d_k, \quad t_k > 0, \tag{4}$$

tout en assurant la propriété

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

Le vecteur d_k est la direction de descente en x_k. Le scalaire t_k est appelé le **pas** de la méthode à l'itération k.

On peut caractériser les directions en x_k à l'aide du gradient :

Theorem

Soit $d \in \mathbb{R}^n$ vérifiant

$$\nabla f(x)^T d < 0,$$

alors d est une direction de descente en x.

Démonstration.

On a pour $t > 0$

$$f(x + td) = f(x) + t\nabla f(x)^T d + t\epsilon(t),$$

donc si on écrit

$$\frac{f(x + td) - f(x)}{t} = \nabla f(x)^T d + \epsilon(t),$$

on voit bien que pour t suffisamment petit on aura $f(x + td) - f(x) < 0$. $\square$

Dans la méthode (4) le choix de t_k est lié à la fonction

$$\varphi(t) = f(x_k + td_k),$$

en particulier, une façon de choisir t_k peut être de résoudre le problème d'optimisation (à une seul variable)

$$\min_{t>0} \varphi(t).$$

Le pas $\hat{t}_k$ obtenu ainsi s'appelle le pas optimal. La fonction $\varphi(t) = f(x_k + td_k)$ étant différentiable, on a alors nécessairement

$$\varphi'(\hat{t}_k) = \nabla f(x_k + \hat{t}_k d_k)^T d_k = 0.$$

Considérons une fonction concave f de *plusieurs variables*. La méthode de la bissection ne peut plus s'appliquer, aussi nous devons nous tourner vers une meilleure alternative. La gradient de f au point x' est défini comme

$$\nabla_x f(x') = \begin{pmatrix} \frac{\partial f(x')}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f(x')}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial f(x')}{\partial x_n} \end{pmatrix}.$$

Il est possible de montrer que le gradient correspond a une direction d'augmentation de la valeur de f. Ainsi, dans la méthode du gradient, nous nous déplaçons dans la direction du gradient en tentant d'augmenter au maximum la valeur de l'objectif.

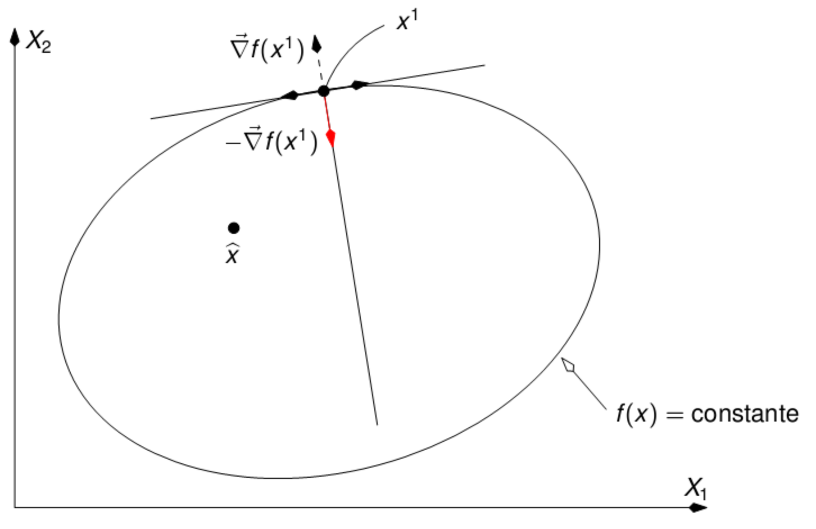
A partir d'un point initial x', nous effectuons un déplacement dans la direction du gradient vers un nouveau point x :

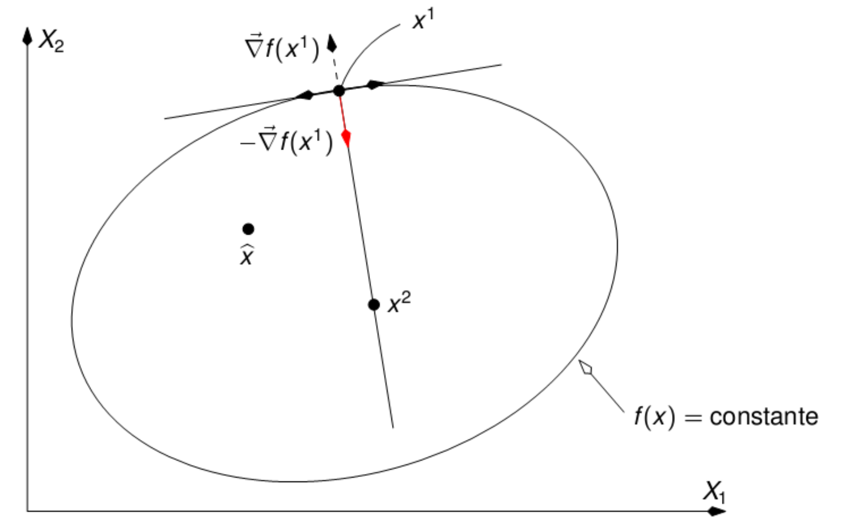
$$x = x' + s,$$

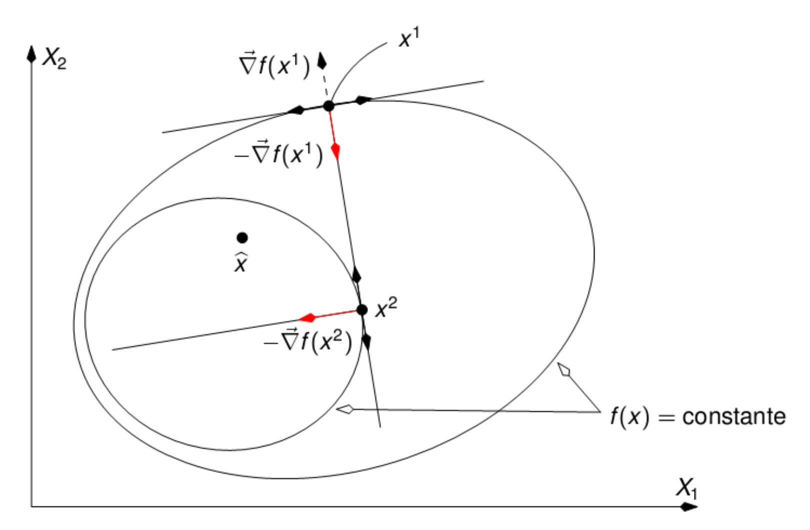
où $s = t^* \nabla_x f(x)$. Dans cette formule, t^* est la solution du problème de maximisation suivant :

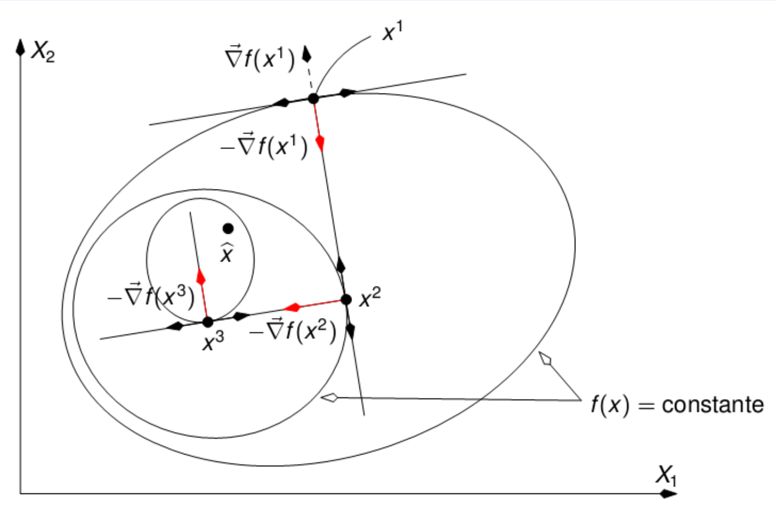
$$\max_{t \geqslant 0} f(x' + t \nabla_x f(x')).$$

C'est un problème de maximisation d'une fonction concave d'une seule variable : nous pouvons par conséquent le résoudre, par exemple en employant la méthode de la bissection
Nous posons ensuite $x' = x$, et nous itérons ainsi jusqu'à ce que le gradient s'annule (ou presque).


X_2
x^1
$\vec{\nabla} f(x^1)$
$-\vec{\nabla} f(x^1)$
$\hat{x}$
$f(x) = \text{constante}$
X_1


X_2
$\vec{\nabla} f(x^1)$
x^1
$-\vec{\nabla} f(x^1)$
$\widehat{x}$
x^2
$f(x) = \text{constante}$
X_1


X_2
$\vec{\nabla} f(x^1)$
x^1
$-\vec{\nabla} f(x^1)$
$\hat{x}$
x^2
$-\vec{\nabla} f(x^2)$
$f(x) = \text{constante}$
X_1



Remarque

La valeur de f diminue à mesure que les courbes de niveau se rapproche du centre des ellipses !

Nous avons par conséquent l'algorithme suivant.

Algorithm (Méthode du gradient)

1. *Déterminer une solution initiale* x_0. *Posons* $k = 0$. *Nous fixons également une constante* $\epsilon > 0$ *suffisamment petite.*
2. *Résoudre le problème suivant :*
$$\max_{t \geqslant 0} f(x_k + t\nabla_x f(x_k)). \tag{5}$$
3. *Soit* t^* *la solution optimale de* (5). *Posons*
$$x_{k+1} = x_k + t^* \nabla_x f(x_k),$$
et incrémentons k.
4. *Si*
$$\left|\frac{\partial f(x_k)}{\partial x_j}\right| \leqslant \epsilon, \ j = 1, 2, \ldots, n,$$
arrêt. Sinon, nous retournons en 2.

Convergence

Theorem

Soit $f \in C^1$. Tout point limite x^* d'une sous suite convergent de la suite générée par la méthode du gradient est tel que $\nabla f(x^*) = 0$.

Démonstration.

Considérons la sous suite $\{x^{k_j}\}$ de $\{x^k\}$ telle que

$$\{x^{k_j}\} \longrightarrow x^*.$$

Par conséquent, se référant aux suites
$\{x^k\} = \{..., x^{k_j}, x^{k_j+1}, ..., x^{k_j+\tau}, ...\}$
$\{x^{k_j}\} = \{..., x^{k_j}, x^{k_{j+1}}, ...\}$ où $x^{k_{j+1}} = x^{k_j+\tau}$.
Ainsi, se référant à la suite $\{x^k\}$

$$f(x^{k_{j+1}}) = f(x^{k_j+\tau}) \leqslant ... \leqslant f(x^{k_j+1}) = \min_{t\geqslant 0}\{f(x^{k_j} - t\nabla f(x^{k_j}))\}.$$

Convergence

Démonstration.

Donc

$$f(x^{k_{j+1}}) \leqslant f(x^{k_j} - t\nabla f(x^{k_j})) \quad \forall t \geqslant 0.$$

Puisque $f \in C^1$, f est continue sur $\mathbb{R}^n$ et

$$\lim_{j\to\infty} f(x^{k_{j+1}}) = f(x^*)$$

$$\lim_{j\to\infty} [f(x^{k_j} - t\nabla f(x^{k_j}))] = f(x^* - t\nabla f(x^*)) \quad \forall t \geqslant 0.$$

Donc

$$f(x^*) \leqslant f(x^* - t\nabla f(x^*)) \quad \forall t \geqslant 0. \tag{6}$$

Par conséquent $\nabla f(x^*) = 0$ car autrement si $\nabla f(x^*) \neq 0$, alors $-\nabla f(x^*)$ est une direction de descente, donc il existe $t > 0$ tq $f(x^* - t\nabla f(x^*)) < f(x^*)$ ce qu'est contradiction avec la relation (6). □

Déplacement en zig-zag

Theorem

Si $x^{k+1} = x^k - t_k \nabla f(x^k)$ *où* t_k *est tel que* $f(x^k - t_k \nabla f(x^k)) = \min_{t \geqslant 0}\{f(x^* - t\nabla f(x^*))\}$, *alors* $\nabla f(x^{k+1})^T \nabla f(x^k) = 0$.

Démonstration.

Si $\nabla f(x^k) = 0$, alors la preuve est complétée.
Si $\nabla f(x^k) \neq 0$, considérons la fonction $\varphi : \mathbb{R}^+ \longrightarrow \mathbb{R}$

$$\varphi(t) = f(x^k - t\nabla f(x^k)).$$

Par dérivation en chaîne,

$$\varphi'(t) = -\nabla f(x^k)^T \nabla f(x^k - t\nabla f(x^k)).$$

Puisque t_k est un minimum local de $\varphi(t)$, alors $\varphi'(t_k) = 0$, et $\nabla f(x^k)^T \nabla f(x^{k+1}) = 0$ $\square$

Notes :

1. L'ordre de convergence de la méthode du gradient est linéaire.
2. Au début de son application, la méthode permet de faire diminuer la valeur de la fonction économique relativement rapidement, mais son efficacité à ce chapitre diminue au cours des itérations.
3. La méthode du gradient est la méthode la plus rapide marginalement ("steepest descent methode") :

$$\nabla f(x)^T d = \|\nabla f(x)\| \|d\| \cos\theta$$

où θ est l'angle entre d et $\nabla f(x)$. Ainsi, parmi les directions d de norme 1, celle minimisant $\nabla f(x)^T d$ a un angle de 180° car $\cos(180°) = -1$. Ainsi, cette direction d correspond à

$$-\frac{\nabla f(x)}{\|\nabla f(x)\|}.$$

Point faible de la méthode du gradient

$\Longrightarrow$ Pour éviter les zigzags et accélérer la convergence, on peut avoir recours à l'un des procédés suivants :

- diminuer le pas ne pas aller jusqu'en $\tilde{x}$.

Polyak (1966) : effectuer des pas prédéterminés en imposant une suite (t^k) telle que $t^k \downarrow 0$ et $\sum_k t^k = +\infty \Rightarrow (x^k)$ tend vers $\hat{x}$

- utiliser d'autres directions :

Forsythe (1986), Luenberger (1973) : toutes les m itérations, au lieu de partir dans la direction de l'anti-gradient en x^k, "couper" en partant dans la direction $\delta = x^k - x^{k-m}$

- utiliser des directions "conjuguées"

La méthode de Newton permet de construire un algorithme permettant de résoudre le système d'équations non-linéaires

$$g(x) = 0,$$

où $g : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$ est différentiable : on se donne $x_0 \in \mathbb{R}^n$ et on fait les itérations

$$x_{k+1} = x_k - Jg(x_k)^{-1} g(x_k), \tag{7}$$

où $Jg(x)$ est la dérivée (au jacobienne)de g au point x. L'application de cette méthode au problème d'optimisation

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x), \tag{8}$$

consiste à l'utiliser pour résoudre le système d'optimalité du problème (8), c'est à dire que l'on pose $g(x) = \nabla f(x)$ dans (7) : on obtient les itérations

$$x_{k+1} = x_k - \nabla^2 f(x_k)^{-1} \nabla f(x_k). \tag{9}$$

Algorithme de Newton

L'algorithme de Newton combine la stratégie de Newton de choix de la direction de descente avec, à chaque étape, une recherche du pas optimal :

Algorithm

Newton(f,x_0,tolerance)

$$x \leftarrow x_0, \quad g \leftarrow \nabla f(x_0), \quad H \leftarrow \nabla^2 f(x_0)$$

Tant que : $g^T H^{-1} g \geqslant$ *tolerance*

Calculer le pas optimal t dans la direction : $u = -H^{-1}g$

$$x \leftarrow x + tu, \quad g \leftarrow \nabla f(x), \quad H \leftarrow \nabla^2 f(x)$$

Retourner x

Convergence

Proposition

Si le point initial x^0 est choisi dans un voisinage d'un minimum local où le hessien est défini positif, alors $\{x^k, k \geqslant 0\}$ converge vers ce minimum local.

- Convergence rapide : quadratique (plus rapide que le gradient à pas optimal).
- "dans un voisinage" :... initialisation difficile.
- Combiner les méthodes : gradient (pour s'approcher du voisinage) et Newton (pour accélérer la convergence une fois dans le voisinage).

Convergence

Proposition

Si le point initial x^0 est choisi dans un voisinage d'un minimum local où le hessien est défini positif, alors $\{x^k, k \geqslant 0\}$ converge vers ce minimum local.

- Convergence rapide : quadratique (plus rapide que le gradient à pas optimal).
- "dans un voisinage" :... initialisation difficile.
- Combiner les méthodes : gradient (pour s'approcher du voisinage) et Newton (pour accélérer la convergence une fois dans le voisinage).

Convergence

Proposition

Si le point initial x^0 est choisi dans un voisinage d'un minimum local où le hessien est défini positif, alors $\{x^k, k \geqslant 0\}$ converge vers ce minimum local.

- Convergence rapide : quadratique (plus rapide que le gradient à pas optimal).
- "dans un voisinage" :... initialisation difficile.
- Combiner les méthodes : gradient (pour s'approcher du voisinage) et Newton (pour accélérer la convergence une fois dans le voisinage).

Convergence

La méthode de Newton est intéressant car sa convergence est quadratique au voisinage de la solution, c'est à dire que l'on a

$$\|x_{k+1} - \hat{x}\| \leqslant \gamma \|x_k - \hat{x}\|^2, \gamma > 0,$$

mais la convergence n'est assurée que si x_0 est suffisamment proche de $\hat{x}$, ca qui en limite l'intérêt.
Pour résoudre le problème de convergence locale de la méthode de Newton, on peut penser à lui ajouter une phase de recherche linéaire, dans la direction

$$d_k = -\nabla^2 f(x_k)^{-1} \nabla f(x_k).$$

Cela est possible uniquement si d_k est une direction de descente en x_k, soit

$$\nabla f(x_k)^T d_k = -\nabla f(x_k)^T \nabla^2 f(x_k)^{-1} \nabla f(x_k) < 0,$$

ce qui sera le cas si $\nabla^2 f(x_k)$ est une matrice définie positive, ce qui n'est pas garanti (on sait tout au plus que $\nabla^2 f(\hat{x}) > 0$).