Questions Quadratiques

Ce devoir est à rendre pour le ***12 juin 2017***
Vous êtes autorisés à le faire à 2 *ou* 3 *; dans le premier cas celui-ci sera noté sur* 16*, dans le second sur* 12*. Toute autre configuration résultera en un DM non noté.*

Au cours de votre scolarité, vous avez eu affaire à des problèmes d'optimisation linéaires. On sait toujours ***résoudre*** de tels problèmes ; j'entends par là qu'on peut déterminer si des solutions existent et qu'on sait en exhiber dans ce cas. L'un des algorithmes les plus répandus pour trouver des solutions d'un programme linéaire est celui du simplexe. Il part du principe qu'une solution est nécessairement réalisée au bord du polyèdre admissible déterminé par les contraintes linéaires du programme. Il reste donc à se *balader* le long des arêtes du polyèdre tout en assurant la croissance de la valeur objectif à chaque étape de la balade.

Une autre famille de problèmes d'optimisation dont la résolution est garantie, que cela soit analytiquement (avec une expression exacte des solutions) ou par approximation numérique efficace, est celle des problèmes quadratiques. On sera amené bientôt à résoudre de tels problèmes. Pour l'instant on se contente d'étudier l'apparition du caractère quadratique dans les questions auxquelles on fera face. Dans l'ordre :

- on étudie la notion de forme quadratique : la définition à avoir en tête, comment on s'en donne une, les sous-classes de formes quadratiques intéressantes, et la structure des ensembles formés par ces sous-classes ;
- on identifie quelques problèmes d'optimisation comme des problèmes qui se ramènent à la minimisation d'une fonction quadratique ;
- on termine cette étude en abordant la différentielle seconde d'une application deux fois différentiable en un point : c'est une approximation quadratique d'une telle fonction au voisinage de ce point. Elle donne un critère simple pour tester la convexité.

Les questions de chacune des 3 parties précédentes sont indépendantes, il en reste qu'il est difficile de répondre aux questions des parties 2 et 3 quand on n'a pas pu comprendre la notion de forme quadratique. Vous êtes invité à vous documenter dans les ouvrages de référence quand une question vous semble difficile. Vous pouvez également revenir vers moi pour de telles références ou pour toute autre question.

Notation. Dans la suite, n et m désignent des entiers naturels non nuls.

1 Les formes quadratiques

Définition 1.1. Soit E un espace vectoriel sur $\mathbb{R}$. On dit que $Q : E \to \mathbb{R}$ est une forme quadratique sur E s'il existe une forme bilinéaire symétrique $\Phi : E \times E \to \mathbb{R}$ telle que pour tout $x \in E$, $Q(x) = \Phi(x, x)$.

Cette définition permet déjà de voir qu'étant donné un produit scalaire $\langle \cdot , \cdot \rangle$ sur E, l'application $x \mapsto \langle x, x\rangle$ est une forme quadratique ; c'est la norme au carré (la norme associée au produit scalaire).

Dans la pratique, et quand on travaille sur $\mathbb{R}^n$, une forme bilinéaire symétrique est donnée par une matrice symétrique P de taille (n, n). L'application bilinéaire Φ associée s'écrit

$$\forall x, y \in \mathbb{R}^n, \quad \Phi(x, y) = x^T P y.$$

Une forme quadratique Q sur $\mathbb{R}^n$ est donc la donnée d'une matrice symétrique P telle que

$$\forall x \in \mathbb{R}^n, \quad Q(x) = x^T P x.$$

Exemple 1.1. La matrice carrée $P = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}$ donne lieu à la forme quadratique Q l'expression pour $(x, y) \in \mathbb{R}^2$ est

$$Q\big((x, y)\big) = x^2 + 4xy.$$

On remarque que l'expression obtenue est un polynôme de degré total [1] 2. Ce fait est général : étant donné une forme quadratique non nulle Q sur $\mathbb{R}^n$, l'expression $Q(x)$ est un polynôme de degré total 2 en les coordonnées du vecteur $x \in \mathbb{R}^n$.

Définition 1.2. Une forme quadratique Q sur un espace vectoriel E est dite

- positive (resp. négative) si pour tout $x \in E$, $Q(x) \geq 0$ (resp. $Q(x) \leq 0$) ;
- définie si $Q(x) = 0 \Rightarrow x = 0$;
- définie positive [2] (resp. définie négative) si pour tout $x \in E$ ***non nul***, $Q(x) > 0$ (resp. $Q(x) < 0$).

Par abus, dans le cas de $\mathbb{R}^n$, ces adjectifs sont accolés à la matrice symétrique P telle que $Q(x) = x^T P x$. On note S_n l'ensemble des matrices symétriques de $M_n(\mathbb{R})$. L'ensemble des matrices symétriques positives (resp. définies positives) est noté S_n^+ (resp. S_n^{++}). Les notations dans le cas négatif sont S_n^- et S_n^{--}.

Question 1-1 Donner, si possible, un exemple de forme quadratique sur $\mathbb{R}^2$ qui soit [a] :

- positive, non définie ;
- définie positive ;
- définie non positive ni négative.

Dessiner un croquis illustrant le graphe de la fonction quadratique donnée dans chacun des cas [b].

a. Justifiez vos réponses !
b. Vous êtes autorisés (encouragés ?) à joindre une figure que vous aurez tracée par ordinateur.

On admet par la suite le résultat important suivant :

Théorème 1.1. *Toute matrice symétrique $P \in M_n(\mathbb{R})$ est diagonalisable sur $\mathbb{R}$ dans une base orthonormée.*

Ce résultat, important, est valable sous des conditions beaucoup plus larges sur le corps de base ; on le montre en partie à l'aide d'un algorithme dit de Gauss.

Question 1-2 À l'aide du déterminant d'une matrice carrée, donner une condition sur une forme quadratique Q sur $\mathbb{R}^n$ afin que celle-ci soit :

- définie ;
- non positive et non négative.

Pouvez-vous en dire plus dans le cas des formes quadratiques sur $\mathbb{R}^2$? Sait-on, dans ce cas, quand une forme quadratique est positive ? Comment différencier le cas positif du cas négatif ? Formaliser le cas des formes quadratiques sur $\mathbb{R}^2$.

Question 1-3 Suffit-il qu'une matrice symétrique ait des coefficients positifs pour que la forme quadratique associée le soit ?

Question 1-4 Donner des conditions suffisantes sur la positivité de la matrice associée à une forme quadratique pour que celle-ci soit

- convexe ou concave ;

1. C'est le degré du polynôme obtenu en remplaçant toutes les variables par une unique variable t.
2. Certains ouvrages, notamment anglo-saxons, utilisent le terme strictement positive ou strictement négative.

- ni l'un ni l'autre.

Ces conditions sont-elles nécessaires ?

Question 1-5 On s'intéresse à la structure de S_n.

1. Montrer que S_n est un sous-espace vectoriel de $M_n(\mathbb{R})$. Peut-on en dire plus ? Calculer la dimension de S_n.
2. Montrer que S_n^+ est une partie convexe de S_n. Peut-on en dire autant de S_n^{++} ?
3. Est-ce que le résultat précédent est valable dans le cas de S_n^- ?

2 Problèmes d'optimisation quadratiques

Un problème d'optimisation quadratique ($\boldsymbol{QP}$) est un problème qui prend la forme

$$\begin{array}{ll} \text{minimiser} & (1/2)x^T Px + q^T x + r \\ \text{sujet à} & \\ & \begin{array}{rcl} Gx & \leq & h \\ Mx & = & b \end{array} \end{array}$$

où P est une matrice symétrique positive de taille (n, n). Une telle définition fait des programmes linéaires un sous-cas de celui des problèmes quadratiques ; la situation où $P = 0$. Une légère généralisation des problèmes quadratiques est la suivante

$$\begin{array}{ll} \text{minimiser} & (1/2)x^T Px + q^T x + r \\ \text{sujet à} & \\ & \begin{array}{rcl} (1/2)x^T P_i x + q_i^T x + r_i & \leq & 0 \\ Mx & = & b \end{array} \end{array}$$

pour i qui varie dans un ensemble fixe d'indices $\{1, \ldots, p\}$. Ces programmes sont dits quadratiques sous contraintes quadratiques, leur acronyme en anglais est ($\boldsymbol{QCQP}$)[3]. Dans la suite, on se contente d'identifier deux problèmes d'optimisation quadratiques fréquents.

Question 2-6 Montrer que la fonction objectif d'un programme quadratique est convexe. Quelle condition garantit ce résultat ?

2.1 Moindres carrés

On commence par un petit travail de lecture. Le problème quadratique suivant est l'un de ceux que vous utilisez le plus, peut-être sans le savoir.

Question 2-7

1. Qu'est ce que le problème des *moindres carrés*[a] ?
2. En quoi est-ce un problème quadratique ?
3. Quel est le lien avec la régression linéaire ?

a. Oui, c'est une recherche bibliographique !

3. Pour *Quadratic Constrained Quadratic Program.*

2.2 Reconnaissance faciale

On représente deux images par le vecteur de leurs pixels. Une première approche pour chercher à savoir si ces deux images sont proches est d'étudier la matrice de corrélation de ces deux vecteurs [4]. C'est une matrice symétrique positive, donc diagonalisable avec des valeurs propres positives. Une approche standard pour quantifier la proximité entre les deux images et de tester si la plus grande valeur propre de notre matrice de corrélation est plus petite qu'un seuil d'acceptation. On va décortiquer dans la suite cette approche et vérifier qu'une telle question se ramène à un problème d'optimisation quadratique.

Voici comment on définit une norme d'une matrice $A \in M_n(\mathbb{R})$, quand on a déjà une norme sur $\mathbb{R}^n$ d'arrivée et de départ. On va supposer ici (pour simplifier) qu'on travaille avec la norme $\|\cdot\|_2$. Sans s'attarder sur les détails, l'image de la boule unité de $\mathbb{R}^n$ par une matrice A est un ellipsoïde (éventuellement dans une dimension plus petite que n, en particulier réduit au singleton $\{0\}$). Mesurer si une matrice A est « grosse » se fait donc à l'aide du plus grand rayon de cet ellipsoïde. Voici comment attraper ce rayon.

Définition 2.1. Soit A une matrice dans $M_n(\mathbb{R})$. La norme triple de A, notée $|||A|||_2$, est définie par

$$|||A|||_2 = \sup_{\|x\|_2 \leq 1} \|Ax\|_2 = \sup_{\|x\|_2 \neq 0} \frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2}.$$

On admet dans la suite le fait que la norme de A est réalisée sur le bord de la boule unité (fermée). C'est-à-dire

$$|||A|||_2 = \sup_{\|x\|_2 = 1} \|Ax\|_2. \tag{1}$$

On suppose désormais A *symétrique* à *valeurs propres positives.*

Question 2-8 En décomposant un vecteur x le long d'une base orthonormée de vecteurs propres de A, montrer que [a] [b]

$$|||A|||_2 = \lambda_{max}(A)$$

où λ_{max} est la plus grande valeur propre de A.

a. L'expression (1) peut aider.
b. Je vous invite à prouver l'égalité pour les carrés des membres de gauche et de droite.

Question 2-9 Par une démarche similaire à la question (2-8), montrer que [a]

$$\lambda_{max}(A) = \sup_{\|x\|_2 \leq 1} x^T A x$$

Peut-on réecrire notre problème de départ comme un $(\boldsymbol{QCQP})$? Est-ce que la recherche de la plus petite valeur propre de A, et non la plus grande, donnerait à l'arrivée un $(\boldsymbol{QCQP})$?

a. On admet qu'on peut remplacer l'inégalité $\|x\|_2 \leq 1$ par $\|x\|_2 = 1$ si nécessaire.

On saura bientôt résoudre ce problème, que cela soit par de l'algèbre linéaire ou par des méthodes d'approximation successives.

3 La différentielle seconde

Quand elle existe, la différentielle seconde d'une application $f : U \to \mathbb{R}^m$ définie sur un ouvert $U \subset \mathbb{R}^n$, en un point $a \in U$, donne une approximation de second ordre de f au voisinage de a. La

4. Le problème de reconnaître si deux visages sont proches dans une images va bien au-delà de ça. Il faudrait déjà extraire les visages, les recentrer, mettre à l'échelle ... etc

différentielle seconde est la partie quadratique de cette approximation, elle permet une étude plus fine des points critiques de la fonction f ainsi qu'une caractérisation pratique des conditions de convexité de celle-ci.

3.1 Différentielle seconde et hessienne

Définition 3.1. On dit qu'une fonction $f : U \to \mathbb{R}^m$ sur un ouvert $U \subset \mathbb{R}^n$ est 2 fois différentiable en $a \in U$ si

- f est différentiable au voisinage de a ;
- la fonction $x \mapsto \mathrm{D}f(x)$,définie sur un voisinage ouvert V de a, est une fonction différentiable de V dans $\mathcal{L}(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^m)$ [5].

Quand elle existe, la différentielle seconde de f en a, c'est-à-dire la différentielle de $\mathrm{D}f$ en a, est notée $\mathrm{D}^2 f(a)$.

Il est important de comprendre quel type d'objet est la différentielle seconde. Avec les notations précédentes et en supposant f 2 fois différentiable en a, la différentielle seconde de f en a est un élément de $\mathcal{L}\big(\mathbb{R}^n, \mathcal{L}(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^m)\big)$. Essayons de comprendre les objets de cet ensemble. Soit $\phi \in \mathcal{L}\big(\mathbb{R}^n, \mathcal{L}(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^m)\big)$. On est donc face à une application

$$\begin{array}{rrcl} \phi : & \mathbb{R}^n & \longrightarrow & \mathcal{L}(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^m) \\ & h_1 & \longmapsto & \phi(h_1) : h_2 \mapsto \phi(h_1)(h_2) \end{array}$$

Par définition l'application ϕ est linéaire « à la fois en h_1 et en h_2 ». Faison l'identification consistant à écrire, par abus, $\phi(h_1, h_2)$ au lieu de $\phi(h_1)(h_2)$. Sous cette identification, ϕ devient donc une application bilinéaire de $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ dans $\mathbb{R}^m$. Donc $\mathrm{D}^2 f(a)$ est une application bilinéaire de $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ dans $\mathbb{R}^m$. En réalité on a plus, mais la preuve de ce résultat dépasse nos objectifs pour ce cours.

Théorème 3.1. *Soit $f : U \to \mathbb{R}^m$ une fonction 2 fois différentiable en un point a de l'ouvert $U \subset \mathbb{R}^n$. Alors $\mathrm{D}^2 f(a)$ est une application bilinéaire symétrique sur $\mathbb{R}^n$.*

Dans la pratique on s'intéresse essentiellement aux valeurs de la différentielle seconde le long de la diagonale, c'est-à-dire pour les couples de la forme (h, h) avec $h \in \mathbb{R}^n$. La raison en est la suivante :

Proposition 3.2. *Soit $f : U \to \mathbb{R}^m$ une application 2 fois différentiable en un point a de l'ouvert U. La différentielle seconde de f en a est l'unique application bilinéaire pour laquelle*

$$f(a+h) = f(a) + \mathrm{D}f(a)h + \frac{1}{2}\,\mathrm{D}^2 f(a)(h,h) + o(\|h\|^2) \tag{2}$$

pour h dans un voisinage de 0.

L'expression (2) est le développement limité à l'ordre 2 de f au voisinage de a. Elle permet déjà de calculer un certain nombre de différentielles secondes rapidement.

Dans le cas $m = 1$, c'est-à-dire dans le cas où f prend ses valeurs dans $\mathbb{R}$, on note $\nabla^2 f$ la différentielle seconde, par cohérence avec la notation du gradient de f. On remarque que dans ce cas $\nabla^2 f(a)$ est une forme quadratique au sens qu'on a introduit en partie 1.

Question 3-10 Calculer le DL à l'ordre 2 d'une forme quadratique $Q : x \mapsto x^T P x$ en un point $a \in \mathbb{R}^n$. Quelle est la différentielle seconde de Q ?

Question 3-11 Soient $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ une fonction 2-fois dérivable et $P \in S_n$. Quelle est la différentielle seconde, en tout point, de l'application f_P définie sur $\mathbb{R}^n$ par $x \mapsto f(x^T P x)$?

5. Qu'on identifie à $\mathbb{R}^{n\times m}$.

Quand une fonction $f : U \to \mathbb{R}$ pour $U \subset \mathbb{R}^n$ est donnée par une expression explicite, on calcule souvent de manière explicite une écriture « en coordonnées » de la différentielle seconde : la hessienne. Pour en inférer la définition on procède comme dans le cas de la jacobienne.

Soit $f : U \to \mathbb{R}$ une fonction 2 fois différentiable en un point a de l'ouvert $U \subset \mathbb{R}^n$. On note $h = \sum_{i=1}^n h_i e_i$ un vecteur dans $\mathbb{R}^n$. On a

$$\mathrm{D}^2 f(a)(h,h) = \sum_{i,j=1}^n h_i h_j \, \mathrm{D}^2 f(a)(e_i, e_j)$$

par définition $\mathrm{D}^2 f(a)(e_i, e_j) = \partial_{e_j}\big(t \mapsto \mathrm{D}f(t)(e_i)\big)(a)$, d'où

$$\begin{aligned}\sum_{i,j=1}^n h_i h_j \, \mathrm{D}^2 f(a)(e_i, e_j) &= \sum_{i,j=1}^n h_i h_j \partial_{e_j}\big(t \mapsto \mathrm{D}f(t)(e_i)\big)(a) \\ &= \sum_{i,j=1}^n h_i h_j \partial_{e_j}\left(t \mapsto \frac{\partial f}{\partial x_i}(t)\right)(a)\end{aligned}$$

en notant $\partial_{e_j}\left(t \mapsto \frac{\partial f}{\partial x_i}(t)\right)(a)$ par $\frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}(a)$, on obtient l'expression

$$\mathrm{D}^2 f(a)(h,h) = \sum_{i,j=1}^n h_i h_j \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}(a).$$

Ce qu'on peut encore représenter matriciellement comme

$$\mathrm{D}^2 f(a)(h,h) = h^T \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(a) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n}(a) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1}(a) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial {x_n}^2}(a) \end{pmatrix} h$$

où $\partial^2 f / \partial x_i^2$ est une écriture simplifiée pour $(\partial^2 f / \partial x_i \partial x_i)$. La matrice dans le membre de droite de l'égalité est la ***hessienne*** de f au point a.

Question 3-12 Calculer les hessiennes en tout point des fonctions à valeurs réelles suivantes :

1. $f(x,y) = x^2 + xy + y^2 + \dfrac{x^3}{4}$;
2. $f(x,y) = x^3 + y^3$;
3. $f(x,y) = x^2 y - \dfrac{x^2}{2} - y^2$;
4. $f(x,y,z) = x^2 + 3y^2 - z^2 + 2xy - 5yz$;
5. $f(x,y,z) = \ln\big(e^x + e^y + e^z\big)$.

3.2 Convexité

Soit $f : U \to \mathbb{R}$ une fonction définie et différentiable sur un ouvert convexe $U \subset \mathbb{R}^n$. Alors f est convexe si et seulement si

$$\forall x, y \in U, \quad f(x) - f(y) \geq \nabla f(x)(x - y). \tag{3}$$

On rappelle que ce critère (3) a une interprétation géométrique simple : l'hyperplan tangent au graphe de f en un point $(x, f(x))$ est un hyperplan d'appui. En effet, cette dernière condition se traduit en un point $x \in U$ par

$$(\nabla f(x), -1) \begin{pmatrix} y - x \\ f(y) - f(x) \end{pmatrix} \leq 0$$

qui donne, une fois la multiplication matricielle explicitée, la relation (3). On rappelle que le vecteur $(\nabla f(x), -1)$ est un vecteur normal définissant l'hyperplan tangent au graphe de f au point $(x, f(x))$. Notez au passage le fait que $\nabla f(x)$, x et y sont des vecteurs dans $\mathbb{R}^n$; l'écriture ci-dessus est donc une écriture par blocs.

Ce critère d'ordre 1 est pratique mais pas toujours facile à manier. Quand f est une fonction 2 fois différentiable, tout comme dans le cas d'une fonction de $\mathbb{R}$ dans $\mathbb{R}$, la positivité de la différentielle seconde nous apporte une information sur la convexité de f. Plus précisément :

Proposition 3.3. *Soit $f : U \to \mathbb{R}$ une fonction 2 fois différentiable définie sur un ouvert convexe $U \subset \mathbb{R}^n$. Alors f est convexe si et seulement si*

$$\forall x \in U, \quad \nabla^2 f(x) \geq 0. \tag{4}$$

Pour une preuve de cette proposition élémentaire, on peut se référer à [Rou09, Exercice 108].

Question 3-13 Retrouver le résultat de la question (2-6).

Question 3-14 Les fonction de la question (3-12) sont-elles convexes ? Justifier.

Solutions du devoir maison

Vous trouverez dans la suite l'ensemble des solutions aux questions de ce devoir maison. Faites en bonne usage.

Solution 1-1 Voici quelques exemples de formes quadratiques répondant à la question précédente :

- On cherche une forme quadratique positive, non définie, par exemple la forme quadratique Q sur $\mathbb{R}^2$ donnée par $Q\big((x,y)\big) = x^2$. Elle est évidemment positive, pour voir qu'elle est non définie il suffit de remarquer que $Q\big((0,1)\big) = 0$. Il existe donc un vecteur non nul dont l'image par Q est nulle, l'implication $Q(X) = 0 \Rightarrow X = \underline{0}$ n'est pas satisfaite.
- Pour une forme quadratique positive définie tout simplement la forme quadratique associée au produit scalaire usuel.
- Cette question est piège, il n'existe pas de forme quadratique définie non positive et non négative. En effet, si une telle forme quadratique Q existe sur $\mathbb{R}^n$ alors il existe deux vecteurs de $\mathbb{R}^n$, X_0 et Y_0 tels que $Q(X_0) < 0$ (définie non positive) et $Q(Y_0) > 0$ (définie non négative). Voici deux arguments qui montre l'impossibilité d'une telle situation [a] :
  — Q est une application continue car polynomiale en les coordonnées usuelles de $\mathbb{R}^n$. Le segment de la droite affine $[X_0, Y_0]$ ne passe pas par l'origine [b] son image est un connexe par arcs de $\mathbb{R}$ car il en est de même de $[X_0, Y_0]$. C'est donc un intervalle I de $\mathbb{R}$. Cet intervalle contient une valeur strictement négative et une autre strictement positive, il contient donc 0 et il existe donc un vecteur ***non nul*** envoyé par Q sur 0.
  — On note Φ la forme bilinéaire symétrique associée à Q. Soit λ, μ deux scalaires dans R. On considère l'expression en λ, μ
  $$Q(\lambda X_0 + \mu Y_0) = \lambda^2 Q(X_0) + 2\lambda\mu\Phi(X_0, Y_0) + \mu^2 2Q(Y_0).$$
  Pour chaque $\mu \in \mathbb{R}$ c'est une expression quadratique en λ, le coefficient de λ^2 n'étant pas nul par hypothèse. L'équation
  $$Q(\lambda X_0 + \mu Y_0) = 0 \tag{5}$$
  est donné par
  $$\Delta = 4\mu^2\Phi(X_0, Y_0)^2 - 4\mu^2 Q(X_0)Q(Y_0) \geq 0$$
  car le premier terme est positif et le second négatif. Pour $\nu \neq 0$ on a donc nécessairement une solution non nulle car le terme constant de l'équation (5) en λ ne l'est pas.

a. Vous pouvez en trouver d'autres, certainement.
b. Y réfléchir deux secondes ; l'image d'une droite vectorielle par une forme quadratique ne change pas de signe.

Solution 1-2 D'après le théorème (1.1) toute forme quadratique dans une base orthonormée bien choisie de vecteurs propres $(v_1, \ldots, v_n)$ prend la forme

$$Q\Big(\sum_{i=1}^{n} x_i v_i\Big) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i x_i^2$$

où λ_i désigne la valeur propre associée à v_i. La matrice de la forme bilinéaire associée à Q dans cette base prend la forme

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \lambda_n. \end{pmatrix}$$

Il est clair désormais, qu'il faut et il suffit que la matrice associée à Q ait toutes ses valeurs propres de même signe et non nulles pour que Q soit définie [a]. Pour que Q ne soit ni positive, ni négative il faut et il suffit que cette même matrice ait au moins deux valeurs propres de signes opposés.

Dans le cas des formes quadratiques sur $\mathbb{R}^2$ on n'a que deux valeurs propres. Pour s'assurer de la définition il suffit d'avoir un déterminant strictement positif. Dans ce cas les deux valeurs propres ne sont pas nulles et, de plus, de même signe. Pour vérifier la positivité sous une telle condition il suffit de regarder le signe de la trace de la matrice associée.
Si le déterminant est strictement négatif les deux valeurs propres sont de signes distincts et on tombe dans le cas d'une forme quadratique ni positive, ni négative.

a. Si tel n'était pas le cas on se retrouverait dans le cas de l'exercice précédent.

Solution 1-3 Non. On considère la forme quadratique Q donnée par

$$Q\big((x,y)\big) = x^2 + xy + y^2.$$

En complétant le carré [a] ne x on obtient

$$Q\big((x,y)\big) = \Big(x + \frac{y}{2}\Big)^2 - \frac{y^2}{4}$$

En prenant $x = 1$ et $y = -2$ on obtient

$$Q\big((1,-2)\big) = -1.$$

a. Cette démarche est la première étape de l'algorithme de Gauss.

Solution 1-4 La convexité de la fonction Q donnée par $Q(x) = x^T P x$ correspond à la négativité, pour tout $\theta \in [0,1]$ et tout $x, y \in \mathbb{R}^n$, de l'expression

$$E(x,y,\theta) = Q\big((1-\theta)x + \theta y\big) - \big((1-\theta)Q(x) + \theta Q(y)\big).$$

On va faire en sorte de tirer de cette expression une condition utilisable.

$$E(x,y,\theta) = \big((1-\theta)x + \theta y\big)^T P\big((1-\theta)x + \theta y\big) - \big((1-\theta)x^T P x + \theta y^T P y\big) \tag{6}$$

en développant le premier terme à gauche

$$\begin{aligned} E(x,y,\theta) = {} & \big((1-\theta)x\big)^T P\big((1-\theta)x + \theta y\big) + \big(\theta y\big)^T P\big((1-\theta)x + \theta y\big) \\ & - \big((1-\theta)x^T P x + \theta y^T P y\big) \end{aligned} \tag{7}$$

en regroupant intelligemment les termes [a] [b]

$$\begin{aligned} E(x,y,\theta) = {} & \big((1-\theta)x\big)^T P\big((1-\theta)x + \theta y\big) - (1-\theta)x^T P x \\ & + \big(\theta y\big)^T P\big((1-\theta)x + \theta y\big) - \theta y^T P y \end{aligned} \tag{8}$$

la suite est automatique

$$\begin{aligned}
E(x,y,\theta) &= \big((1-\theta)x\big)^T P\big((-\theta)x+\theta y\big) + \big(\theta y\big)^T P\big((1-\theta)x+(\theta-1)y\big) && (9)\\
&= (1-\theta)\theta\left[x^T P(y-x) - y^T P(y-x)\right] && (10)\\
&= -(1-\theta)\theta(y-x)^T P(y-x) && (11)\\
&= -(1-\theta)\theta Q(y-x). && (12)
\end{aligned}$$

Ainsi $E(x,y,\theta)$ est négative si et seulement si $Q(y-x)$ est positive. Donc Q est convexe si et seulement si pour tout x, y, $Q(y-x) \geq 0$. Il n'est pas difficile de voir que cette condition correspond au fait que Q soit positive.

J'ai voulu ici vous montrer qu'il est possible d'aller au bout de calculs qui peuvent vous sembler un peu horrible. La dernière condition qu'on obtient peut être obtenue autrement à l'aide de la condition d'ordre 1 sur la convexité. Le calcul dans ce cas là est plus rapide.

a. Yes, you can !
b. Bug !
a. Yes, you can !
b. Bug !

Solution 1-5

1. On montrer que S_n est un sous-espace vectoriel de $M_n(\mathbb{R})$. On rappelle que $M_n(\mathbb{R})$ vient avec une base canonique qu'on note $\{E_{ij} \mid 1 \leq i,j \leq n\}$ où E_{ij} est la matrice contenant que des coefficients nuls sauf en position (i,j) où on trouve 1. Une matrice $A = (a_{i,j})$ se décompose le long de la base précédente comme suit
$$A = \sum_{i,j} a_{ij} E_{ij}.$$
La matrice A est symétrique si $A = A^T$. En utilisant le fait $E_{ij}^T = E_{ji}$, on obtient de la décomposition précédente le fait que A est symétrique si et seulement si
$$A = \sum_{j\geq i} a_{ij}\left(E_{ij} + E_{ji}\right).$$
Ainsi $\{E_{ij} \mid 1 \leq i,j \leq n, j \geq i\}$ est une famille génératrice de S_n. Il n'est pas difficile de voir qu'elle est également libre, car toutes combinaisons linéaire nulle de cette famille est une combinaison linéaire nulle de la base de $M_n(\mathbb{R})$ donnée par les E_{ij}. On a donc exhibé une base de S_n, elle contient $n(n+1)/2$ éléments.
Vous pouvez, si le coeur vous en dit, montrer que $M_n(\mathbb{R})$ est la somme directe de S_n et du sous-espace vectoriel des matrices antisymétriques.
2. Soit $\theta \in [0,1]$ et $A, B \in S_n^+$. On veut montrer que $(1-\theta)A + \theta B \in S_n^+$, c'est-à-dire que pour tout $x \in \mathbb{R}^n$
$$x^T\big((1-\theta)A + \theta B\big)x \geq 0.$$
Or le terme de gauche est donné par
$$(1-\theta)\underbrace{x^T A x}_{\geq 0} + \theta\underbrace{x^T B x}_{\geq 0}$$
d'où le résultat. Le cas de S_n^{++} suit le même procédé.
3. Oui, il suffit d'adapter le raisonnement précédent.

Solution 2-6 On note $Q(x) = (1/2)x^T Px + q^T x + r$. C'est le signe de

$$Q\big((1-\theta)x + \theta y\big) - \big((1-\theta)Q(x) + \theta Q(y)\big)$$

qui gouverne la convexité de Q. En écrivant explicitement cette expression on tombe sur la condition de convexité de $(1/2)P$ et cela nous ramène à la question (1-4). La convexité de Q vient donc du fait qu'on suppose que P est positive.

Solution 2-7 Le problème des moindres carrés s'énonce dans sa forme la plus générale comme un problème d'optimisation qui prend la forme suivante

$$\text{minimser} \quad \|Ax - b\|_2^2$$

où x varie dans $\mathbb{R}^n$, A est une matrice dans $M_{p,n}(\mathbb{R})$ et $b \in \mathbb{R}^p$. Pour voir que ceci définit bien un problème quadratique il suffit de développer le produit scalaire implicite ci-dessus :

$$\begin{aligned} \|Ax - b\|_2^2 &= x^T A^T Ax - \big(x^T A^T b + b^T Ax\big) + b^T b && (13) \\ &= \frac{1}{2}(x^T Px) + q^T x + r && (14) \end{aligned}$$

avec $P = 2A^T A$, $r = b^T b$ et q le vecteur qui représente l'unique forme linéaire qui correspond à $-\big(x^T A^T b + b^T Ax\big)$.

Voici comment comprendre le lien avec la régression linéaire. On considère une variable explicative a à valeurs dans $\mathbb{R}^n$ et une variable réelle à expliquer b. On suppose qu'on a p couples d'observations (a_i, b_i) pour $i \in \{1, \dots, p\}$. Chaque a_i est un vecteur de $\mathbb{R}^n$ qu'on écrit

$$a_i = \begin{pmatrix} a_{1,i} \\ \vdots \\ a_{n,i} \end{pmatrix}.$$

On souhaite trouver une application affine f de $\mathbb{R}^n$ dans $\mathbb{R}$ telle que

$$f(a_i) \sim b_i.$$

Cette phrase manque bien sûr de précisions, on peut lui donner sens de différentes façon. De manière standard on chercher à trouver f qui minimise

$$\sum_{i=1}^{p} \|f(a_i) - b_i\|.$$

où $\|\cdot\|$ est une norme de $\mathbb{R}^n$. Dans le cas de la régression linéaire standard on prend la norme 2 qu'on élève au carré. En général, le choix d'une norme n'est pas anodin et dépend des problèmes secondaires qu'on est prêt à traîner. On revient désormais à notre régression. Une fonction affine $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ s'écrit sous la forme

$$f(x) = \begin{pmatrix} t_0 \\ t_1 \\ \vdots \\ t_n \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} 1 \\ x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}.$$

Expression qu'on peut encore écrire (car $f(x) \in \mathbb{R}$) sous la forme

$$f(x) = \begin{pmatrix} 1 \\ x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} t_0 \\ t_1 \\ \vdots \\ t_n \end{pmatrix}.$$

En notant t le vecteur des t_j pour $j \in \{0, n\}$, le problème de régression linéaire s'écrit donc comme le problème de minimisation

$$\text{minimiser} \sum_{i=1}^{n} \|(1, a_i^T)t - b_i\|_2^2$$

qui, en désignant par A la matrice dont la ligne i est $(1, a_i^T)$ et par b le vecteur des b_i, donne le problème de minimisation

$$\text{minimiser} \|At - b\|_2^2$$

sur $t \in \mathbb{R}^n$. On vient donc de décrire un problème de régression linéaire comme un problème d'optimisation convexe. Les algorithmes d'optimisation convexe apportent des solutions efficaces à de tels problèmes.

Solution 2-8

1. Soit $(v_1, \ldots, v_n)$ une base orthonormée de vecteurs propres de A. La valeur propre de v_i est notée λ_i. On désigne par max l'indice de la plus grande valeur propre de A. Soit $x \in \mathbb{R}^n$, on donc une décomposition

$$x = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i v_i.$$

Donc

$$Ax = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \lambda_i v_i.$$

D'où

$$\|Ax\|_2^2 = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i^2 \lambda_i^2 \tag{15}$$

On cherche à minimiser la quantité précédente sous la contrainte $\|x\|_2 = 1$. Autrement dit, sous la contrainte

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i^2 = 1.$$

En écrivant

$$\lambda_{\max}^2 = 1 - \sum_{i \neq \max} \alpha_i^2$$

et en remplaçant dans l'expression (15) on obtient

$$\|Ax\|_2^2 = \lambda_{\max}^2 + \sum_{i \neq \max} (\lambda_i^2 - \lambda_{\max}^2)\alpha_i^2.$$

Donc, pour tout $x \in \mathbb{R}^n$ tel que $\|x\|_2 = 1$ on a

$$\|Ax\|_2^2 \leq \lambda_{\max}^2.$$

Comme la valeur de droite est atteinte pour $v_{\max}$ on en déduit l'égalité

$$\sup_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2^2 = \lambda_{\max}^2$$

Les valeurs propres de A étant supposée positives on obtient le résultat recherché. La norme de A subordonnée à la norme 2 est donc la longueur du plus grand axe image de la sphère de $\mathbb{R}^n$ par A.

Solution 2-9 On procède de la même manière qu'à la question précédente. Avec les mêmes notations

$$\begin{aligned} x^T Ax &= \left(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i v_i\right)^T A \left(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i v_i\right) & (16)\\ &= \sum_{1\leq i,j\leq n} \alpha_i \alpha_j v_i^T A v_j & (17)\\ &= \sum_{1\leq i,j\leq n} \alpha_i \alpha_j \lambda_j v_i^T v_j & (18) \end{aligned}$$

comme les v_i forment une base orthonormée

$$x^T Ax = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \alpha_i^2. \tag{19}$$

En utilisant le fait que $\sum_{i=1}^{n} \alpha_i^2 = 1$ et la positivité des valeurs propres on a

$$\begin{aligned} x^T Ax &= \lambda_{\max} + \sum_{i=1}^{n} (\lambda_i - \lambda_{\max})\alpha_i^2 & (20)\\ &\leq \lambda_{\max} & (21) \end{aligned}$$

Cette valeur étant atteinte pour $v_{\max}$ on obtient le résultat recherché.

Le problème précédent, sous cette forme, n'est pas un $(\boldsymbol{QCQP})$. Les contraintes sont bien quadratiques de même que la fonction objectif, mais c'est un problème de maximisation et non un problème de minimisation.

$$\begin{aligned} &\text{maximiser} \quad x^T Ax \\ &\text{sujet à} \\ &\qquad\qquad \|x\|_2 = 1 \end{aligned}$$

Dans le cas de $\lambda_{\min}$ on peut effectivement écrire la recherche comme un $(\boldsymbol{QCQP})$. La discussion sur la norme de A ne tient plus, mais la relation suivante

$$\lambda_{\min}(A) = \inf_{\|x\|_2^2=1} x^T Ax$$

est valable est se montre par une approche similaire à ce qu'on vient de faire. Fort de cette remarque, on peut, dans le cas où A est inversible (toutes les valeurs propres sont strictement positives) on peut travailler avec le problème d'optimisation équivalent

$$\begin{aligned} &\text{minimiser} \quad x^T A^{-1} x \\ &\text{sujet à} \\ &\qquad\qquad \|x\|_2 = 1 \end{aligned}$$

Ce problème est un (***QCQP***), il n'est pas difficile de montrer que A^{-1} est symétrique positive. La valeur optimale de ce problème est $\lambda_{\max}^{-1}$. [a]

a. Smart, isn't it ? Réfléchissez-y quand même à deux reprises avant de vous lancer dans une implémentation.

Solution 3-10 La fonction quadratique Q est différentiable, sa différentielle en un point x est l'application $\mathrm{D}Q : x \mapsto 2x^T P$ de $\mathbb{R}^n$ dans l'espace $\mathcal{L}(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$. L'application linéaire $\mathrm{D}Q(x)$ est donné pour tout $h \in \mathbb{R}^n$ par $2x^T Ph$, elle a donc été identifié au vecteur ligne $2x^T P$; son gradient en x. L'application $\mathrm{D}Q$ est à son tour différentiable, pour calculer sa différentielle en suivant la définition, on écrit

$$\mathrm{D}Q(x + h_2) = 2(x + h_2)^T P = 2x^T P + 2h_2^T P.$$

Cette égalité est une égalité fonctionnelle, en effet les deux membres de l'égalité sont des éléments dans $\mathcal{L}(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$ et l'égalité doit être lue comme : pour tout $h_1 \in \mathbb{R}^n$

$$\mathrm{D}Q(x + h_2)(h_1) = 2x^T Ph_1 + 2h_2^T Ph_1.$$

La partie linéaire en h_2 (variable significative dans le calcul de la différentielle en x de $\mathrm{D}Q$) est le second terme. Ainsi, en prenant en compte les identifications décrite en début de section, la différentielle seconde de Q en un point $x \in \mathbb{R}^n$ est donnée par

$$\mathrm{D}^2 f(x)(h_1, h_2) = 2h_2^T Ph_1,$$

pour tout h_1, $h_2 \in \mathbb{R}^n$. On identifie cette différentielle seconde en x à la matrice $2P$. Cela correspond à la héssienne de Q au point x.

Comme on sait que Q est deux fois différentiable en tout point, on peut retrouver la forme quadratique associée à sa différentielle seconde en $x \in \mathbb{R}^n$ dans son développement limité au point x. En écrivant

$$Q(x + h) = x^T Px + 2x^T Ph + \frac{1}{2}(2h^T Ph)$$

on constate que le dernier terme de ce développement est bien la forme quadratique associée à $\mathrm{D}Q(x)$.

Attention au fait que l'existence d'un DL à l'ordre 2 en un point ne suffit pas à montrer le fait que la fonction est 2 fois différentiable en ce point. Un exemple classique de ce phénomène est donné par la fonction f, donnée par

$$f(x) = \begin{cases} x^3 \sin\left(\frac{1}{x}\right) & \text{si } x \neq 0 \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

C'est une fonction qui admet un développement limité d'ordre 2 en 0, mais elle n'est pas 2-fois dérivable en 0.

Solution 3-11 On fixe un point $x \in \mathbb{R}^n$. Pour tout $h \in \mathbb{R}^n$ on a

$$f_p(x + h) = f(x^T Px + 2x^T Ph + h^T Ph)$$

On sait que f_p est 2-fois différentiable. On va chercher à déterminer le DL à l'ordre 2 de f_p en x. On a deux situations à prendre en compte :

- La première situation est quand $x^T P \neq 0$. Dans ce cas le développement limité de f en

x^TPx donne

$$\begin{aligned}
f_p(x+h) &= f(x^TPx) + f'(x^TPx)(2x^TPh + h^TPh)\\
&\quad + \frac{f''(x^TPx)}{2}(2x^TPh + h^TPh)^2 + o(\|h\|^2)\\
&= f_p(x) + f'(x^TPx)2x^TPh + f'(x^TPx)h^TPh\\
&\quad + 2f''(x^TPx)(x^TPh)^2 + o(\|h\|^2)\\
&= f_p(x) + f_p'(x)h + f'(x^TPx)h^TPh + 2f''(x^TPx)h^T(Px)(x^TP)h + o(\|h\|^2)
\end{aligned}$$

Ce qui nous permet de retrouver la différentielle seconde de f en x.

$$\mathrm{D}^2 f_p(x) = f'(x^TPx)P + 2f''(x^TPx)Pxx^TP$$

qu'on peut réécrire plus agréablement si on le souhaite.

- Dans le cas où $x^TP = 0$, en reprenant les calculs précédent on trouve

$$f_p(x+h) = f(0) + f'(0)(h^TPh) + \frac{f''(0)}{2}(h^TPh)^2 + o(\|h\|^2),$$

or cet avant dernier terme est déjà un $o(\|h\|^2)$. On vérifie dans ce cas

$$\mathrm{D}^2 f_p(x) = f'(0)P.$$

Avec les identification d'usage.

Solution 3-12 On se contente ici de donner les dérivée partielles secondes de chacune des fonctions en jeux, la hessienne est dès lors facile à donner. Toutes les fonctions en jeux ont des dérivées partielles secondes continues, elles satisfont toutes les relations de Schwarz.

1. $\dfrac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x,y) = 2 + \dfrac{3x}{2}$, $\dfrac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x,y) = 1$, $\dfrac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x,y) = 2$.
2. $\dfrac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x,y) = 6x$, $\dfrac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x,y) = 0$, $\dfrac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x,y) = 6y$.
3. $\dfrac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x,y) = 2y-1$, $\dfrac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x,y) = 2x$, $\dfrac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x,y) = -2$.
4. $\dfrac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x,y,z) = 2$, $\dfrac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x,y,z) = 6$, $\dfrac{\partial^2 f}{\partial z^2}(x,y,z) = -2$,
   $\dfrac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x,y,z) = 2$, $\dfrac{\partial^2 f}{\partial x \partial z}(x,y,z) = 0$, $\dfrac{\partial^2 f}{\partial y \partial z}(x,y,z) = -5$.
5. $\dfrac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x,y,z) = \dfrac{e^x(e^y+e^z)}{(e^x+e^y+e^z)^2}$,
   $\dfrac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x,y,z) = \dfrac{e^y(e^x+e^z)}{(e^x+e^y+e^z)^2}$,
   $\dfrac{\partial^2 f}{\partial z^2}(x,y,z) = \dfrac{e^z(e^x+e^y)}{(e^x+e^y+e^z)^2}$,
   $\dfrac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x,y,z) = -\dfrac{e^xe^y}{(e^x+e^y+e^z)^2}$,
   $\dfrac{\partial^2 f}{\partial x \partial z}(x,y,z) = -\dfrac{e^ye^z}{(e^x+e^y+e^z)^2}$,
   $\dfrac{\partial^2 f}{\partial y \partial z}(x,y,z) = -\dfrac{e^xe^z}{(e^x+e^y+e^z)^2}$.

Solution 3-13 Le gradient d'une fonction de la forme $x \mapsto (1/2)x^T Px + q^T x + r$ en tout point x est donné par P, ce qui nous ramène au résultat de (2-6).

Solution 3-14 En calculant les déterminants des hessiennes en tout point (x, y) des trois premiers cas, on remarque que celui-ci n'est pas toujours positif ni toujours négatif. D'après (1-2) cela suffit pour savoir que la hessienne ne sera pas positive en tout point du domaine de définition de chacune de ses fonctions, en l'occurence $\mathbb{R}^2$.

Dans le quatrième cas, un calcul du déterminant donne un nombre réel négatif. La hessienne a donc ou bien une valeur propre négative et 2 positives ou alors 3 valeurs propres négatives. Comme sa trace est positive, on est nécessairement dans le premier cas, donc la fonction n'est ni convexe, ni concave.

Le cinquième cas est de loin, le plus technique. On peut l'aborder de deux façons. Dans les deux cas l'étude de la positivité de la différentielle seconde $H(x, y, z)$ en (x, y, z) est équivalent à l'étude de

$$\overline{H}(x, y, z) = (e^x + e^y + e^z)^{-2} H(x, y, z)$$

(on factorise par le facteur commun $(e^x + e^y + e^z)^2$), les calculs ci-dessous sont fait en travaillant avec $\overline{H}$.

— En effectuant une décomposition de Gauss en regroupant les carrés au fur et à mesure. On obtient dans ce cas la décomposition suivante

$$\overline{H}(x, y, z)(X, Y, Z) = e^y(e^x+e^y+e^z)Y^2+e^z(e^x+e^y+e^z)Z^2+e^x\big((e^y+e^z)^{1/2}-(e^yY+e^zZ)\big)^2$$

qui montre que $H(x, y, z)$ est toujours positive. Donc f est convexe dans ce cas.

— La seconde approche consiste à remarquer que la somme des colonnes de la hessienne est nulle. Un vecteur propre de celle-ci pour la valeur propre 0 est $(1, 1, 1)$. Comme la hessienne est symétrique, on peut étudier l'application linéaire induite par la hessienne sur l'orthogonale de $(1, 1, 1)$. Les deux vecteurs $(1, 0, -1)$ et $(1, -1, 0)$ forment une base de cet orthogonal. L'étude de cette application induite (orthogonal stable par la hessienne) permet de retrouver le résultat précédent.

Références

[Rou09] F. Rouvière. *Petit guide de calcul différentiel : à l'usage de la licence et de l'agrégation.* Enseignement des mathématiques. Cassini, 2009.