Optimisation sans contrainte

Étant donné $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ suffisamment régulière (typiquement $\mathcal{C}^2$), nous allons étudier d'un point de vue analytique et numérique l'existence d'extrema de f (un extremum = un minimum puis un maximum). On parle d'optimisation **sans contrainte** (un problème d'optimisation avec contrainte étant posé sur un sous-ensemble de $\mathbb{R}^n$). Il s'agira pour nous de trouver un **minimum** d'une fonction f, sous perte de généralité car le maximum d'une fonction $\tilde{f}$ revient à chercher un minimum de $f = -\tilde{f}$.

Exemples :

- Méthode des moindres carrés : + IMAGE et terminer
- Résolution d'un système linéaire $Ax = b$, avec A symétrique définie positive. Exemple d'application : résolution de l'équation de Poisson par différences finies. Nous verrons que la solution du système minimise $f(x) = \frac{1}{2}\, {}^t x A x - {}^t b x$. Cette propriété permet d'introduire de nouvelles méthodes de résolution du système.
- Exemple de minimisation d'une fonction non quadratique :

  $$f(x) = \frac{1}{2} \sum_{1 \le i,j \le N, i \ne j} V(\|x_i - x_j\|)$$

  Cristal constitué de N atomes, de positions $x_i \in \mathbb{R}^3$, interagissent par paires via un potentiel V

  f représente l'énergie potentielle totale du cristal. La forme d'équilibre du cristal à $T = 0$ Kelvin est donnée par un minimum de l'énergie potentielle f.

  Sous certaines hypothèses sur v et en deux dimensions d'espace, il a été démontré très récemment (F. Theil, 2005) que ce minimum est atteint pour un arrangement périodique des atomes.

1 Quelques résultats de base en calcul différentiel et optimisation

1.1 Étude locale des fonctions à n variables

Définition 1 f est différentiable en $x \in \Omega$ s'il existe une application linéaire $T : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ telle que pour $h \approx 0$:

$$f(x+h) = f(x) + T\,h + o(\|h\|)$$

L'application T est alors unique et on note $T = Df(x)$.

T est appelée différentielle de f au point x.

Remarque 1 Si f est différentiable en x, alors elle est continue en x.

Lemme 1 Si f est différentiable en x, alors $\frac{\partial f}{\partial x_1}(x), \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(x)$ existent et $Df(x)h = \Big(\frac{\partial f}{\partial x_i}, \cdots \frac{\partial f}{\partial x_n}(x)\Big)h$

Remarque 2

1. Par abus de lanage, on confond souvent l'application linéaire $Df(x)$ et sa matrice $\Big(\frac{\partial f}{\partial x_1}(x), \cdots \frac{\partial f}{\partial x_n}(x)\Big)$ appelée matrice Jacobienne de f au point x.
2. Le fait que $\frac{\partial f}{\partial x_1}(x), \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(x)$ existent n'implique pas que f est différentiable en x.
3. On appelle $\nabla f(x) = {}^t\Big(\frac{\partial f}{\partial x_1}(x), \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(x)\Big)$. Alors $Df(x)h = \nabla f(x).h$ où . est le produit scalaire usuel sur $\mathbb{R}^n$.

Définition 2 f est différentiable sur un ouvert Ω si elle est différentiable en tout point de Ω.

Définition 3 $f : \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$ est $\mathcal{C}^1$ si f est différentiable sur Ω et si l'applictaion $x \mapsto \nabla f(x)$ est continue.

On peut montrer le résultat suivant :

Lemme 2 $f : \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$ est $\mathcal{C}^1$ si est seulement si ses dérivées partielles $\frac{\partial f}{\partial x_i}(i = 1..n)$ existent et sont continues sur Ω.

Définition 4 $f : \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$ est $\mathcal{C}^2$ si f est $\mathcal{C}^1$ sur Ω et ses dérivées partielles $\dfrac{\partial f}{\partial x_i}(i = 1, \ldots, n)$ sont $\mathcal{C}^1$ sur Ω.

Lemme 3 (de Schwarz) Soit $f : \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$ de classe $\mathcal{C}^2$. Alors pour tout $x \in \Omega, \forall i, j = 1..n$:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}\Big(\frac{\partial f}{\partial x_j}\Big)(x) = \frac{\partial}{\partial x_j}\Big(\frac{\partial f}{\partial x_i}\Big)(x)$$

Remarque 3 On notera ces dérivées $\dfrac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x)$.

Theoreme 1 (formule de Taylor à l'ordre 2) *Soit $f : \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$ de classe $\mathcal{C}^2$. Pour tout $x \in \Omega$ et $h \approx 0$:*

$$f(x+h) = f(x) + \nabla f(x).h + \frac{1}{2}\,{}^t h.Hf(x).h + o(\|h\|^2)$$

avec $Hf(x) \in M_n(\mathbb{R})$ définie par :

$$\Big(Hf(x)\Big)_{ij} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x)$$

$Hf(x)$ est appelée matrice hessienne de f en x (autre notation : $H_f(x)$)

Remarque 4 - $Hf(x)$ est symétrique d'après le lemme de Schwarz.

- On appelle $D^2 f(x)$ (différentielle seconde de f en x) la forme bilinéaire symétrique $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ définie par $D^2 f(x)(h, y) = {}^t h Hf(x) y$.

Définition 5 - $f : \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$ admet un minimum local en $x \in \Omega$ s'il existe un voisinage ouvert u de x tel que $f(x) \leq f(y), \forall y \in u$.

- f admet un maximum local en $x \in \Omega$ si $f(x) \geq f(y), \forall y \in u$

Remarque 5 • Supposons $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$. On parle de minimum ou maximum **global** lorsque $u = \mathbb{R}^n$.

• Lorsque les inégalités sont strictes (pour $y \neq x$- on parle de minimum ou de maximum **strict**.

Lemme 4 Soit $f : \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$ de classe $\mathcal{C}^1$ (Ω ouvert de $\mathbb{R}^n$).

Si f admet un extremum local en $x \in \Omega$, alors $\nabla f(x) = 0$.

Remarque 6 - Faux en général si Ω n'est pas un ouvert (un extremum peut être atteint sur le bord de Ω sans que ∇f s'y annule.

- $\nabla f(x) = 0$ peut être résolu par exemple par la méthode de Newton.
- On peut avoir $\nabla f(x) = 0$ sans que f admette un extremum en x. Exemple : $f(x, y) = x^2 - y^2$ en $(x, y) = (0, 0)$.

Lemme 5 Soit $f : \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$ de classe $\mathcal{C}^2$. On suppose qu'il existe $x \in \Omega$ te que $\nabla f(x) = 0$. Alors :

- Si les valeurs propres de $Hf(x)$ sont > 0, f admet un minimum local strict en x.
- Si les valeurs propres de $Hf(x)$ sont < 0, f admet un maximum local strict en x.
- Si les valeurs propres de $Hf(x)$ sont $\neq 0$ et pas toutes de même signe, f n'admet pas d'extremum au point x (x est appelé un "point selle").

Remarque 7 Si $Hf(x)$ n'est pas inversible, la nature du point x (extremum de f ou non) dépend des termes d'ordre supérieure donc le développement de Taylor de f en x. Exemple : $f(x, y) = x^2 \pm y^2$.

Lemme 6 Soit $f : \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$ de classe $\mathcal{C}^1$.

Soit $x_0 \in \Omega$ tel que $\nabla f(x_0) \neq 0$. L'équation $f(x) = f(x_0)$ définit localement (pour $x \approx x_0$) une hypersurface S (de dimension $n-1$), qui admet un plan tangent en tout point $x \approx x_0$.

Le plan tangent à S en x_0 est orthogonal à $\nabla f(x_0)$.

Lemme 7 Sous les hypothèses précédentes, $\nabla f(x_0)$ est orienté dans le sens des valeurs de f croissantes. Plus précisément :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varepsilon} f(x_0 + \varepsilon\, \nabla f(x_0))_{|\varepsilon=0} = \|\nabla f(x_0)\|_2^2 > 0$$

1.2 Conditions suffisantes pour l'existence et l'unicité d'un minimum

Voyons d'abord une condition suffisante pour l'existence d'un minimum.

Theoreme 2 *Soit* $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ *continue et telle que* $\lim\limits_{\|x\| \to +\infty} f(x) = +\infty$

Alors il existe $x \in \mathbb{R}^n$ *tel que* $f(x) \leq f(y) \forall y \in \mathbb{R}^n$.

Remarque 8 On dit que f admet un minimum global en x.

Preuve 1 Si $\|y\| \geq R$ avec R assez grand, $f(x) \geq f(0)$. Donc $\operatorname*{Inf}\limits_{y \in \mathbb{R}^n} f(y) = \operatorname*{Inf}\limits_{\|y\| \leq R} f(y) = f(x)$ avec $\|x\| \leq \mathbb{R}$, puisque la boule $\|y\| \leq R$ est compacte.

Le minimum de f peut ne pas être unique. Nous allons donner maintenant une condition suffisante d'unicité.

Définition 6 $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ est convexe si $\forall x, y \in \mathbb{R}^n, \forall t \in [0, 1]$

$$f(tx + (1-t)y) \leq tf(x) + (1-t)f(y)$$

Remarque 9 Si $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ est convexe, alors elle est continue sur $\mathbb{R}^n$.

Interprétation en dimension 1 :

+ IMAGE

Définition 7 $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ est strictement convexe si $\forall x, y \in \mathbb{R}^n$ tels que $x \neq y, \forall t \in]0, 1[$,

$$f(tx + (1-t)y) < tf(x) + (1-t)f(y)$$

Theoreme 3 *Si* $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ *est strictement convexe, il existe au plus un* $x \in \mathbb{R}^n$ *tel que* $f(x) = \operatorname*{Min}\limits_{y \in \mathbb{R}^n} f(y)$.

Preuve 2 Supposons l'existene de deux minima en x_1 et x_2. Alors

$$f(tx_1 + (1-t)x_2) < tf(x_1) + (1-t)f(x_2) = f(x_1) = \operatorname*{Min}_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$$

On arrive alors à une contradiction.

Remarque 10 Ce théorème ne donne pas l'existence d'un minimum.

Exemple : + IMAGE

Theoreme 4 *Soit $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ strictement convexe et telle que $\lim\limits_{\|x\| \longrightarrow +\infty} f(x) = +\infty$. Alors il existe un unique $x \in \mathbb{R}^n$ tel que*

$$f(x) = \underset{y \in \mathbb{R}^n}{\mathrm{Min}}\, f(y)$$

Nous allons maintenant relier les notions de point critique ($\nabla f(x) = 0$) et minimum pour les fonctions convexes.

Le résultat suivant fournit une caractérisation utile de la convexité pour les fonctions $\mathcal{C}^1$.

Lemme 8 Soit $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ de classe $\mathcal{C}^1$.

- f est convexe si et seulement si

$$\forall x, y \in \mathbb{R}^n, \qquad f(y) \geq f(x) + Df(x)(y - x)$$

- f est strictement convexe si et seulement si

$$\forall x, y \in \mathbb{R}^n \text{ avec } x \neq y, \qquad f(y) > f(x) + Df(x)(y - x)$$

(résultat admis)

Interprétation en dimension 1 :

+ IMAGE

Theoreme 5 *Soit $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ de classe $\mathcal{C}^1$ et convexe. Alors :*

$$f(x) = \underset{y \in \mathbb{R}^n}{\mathrm{Min}}\, f(y) \iff \nabla f(x) = 0$$

Preuve 3

- " $\Longrightarrow$ " voir §**1.1**
- "$\Longleftarrow$" $f(y) \geq f(x) + Df(x)\underbrace{(y - x)}_{=0}, \forall y \in \mathbb{R}^n$

Remarque 11 On peut donc calculer numériquement les minima de fonctions convexes en recherchant les zéros de $x \mapsto \nabla f(x)$ (par exemple par la méthode de Newton).

On admettra la caractérisation suivante de la convexité pour des fonctions $\mathcal{C}^2$:

Lemme 9 Soit $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ de classe $\mathcal{C}^2$. Alors :

- f est convexe $\iff$ ${}^t y \, Hf(x) \, y \geq 0 \qquad \forall x \in \mathbb{R}^n, \forall y \in \mathbb{R}^n$
- Si $Hf(x)$ est symétrique définie positive $\forall x \in \mathbb{R}^n$ alors f est strictement convexe [1].

Remarque 12 Pour $f(x) = \frac{x^4}{12}$ (strictement convexe), $H_f(x) = x^2$.
$\implies H_f(0) = 0$ n'est pas symétrique définie positive.

Application

Soit $A \in M_n(\mathbb{R})$ avec A symétrique définie positive et $f(x) = \frac{1}{2}\, {}^t x \, A \, x - {}^t b \, x$

$$f(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \left(\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j x_i \right) - \sum_{i=1}^{n} b_i x_i$$

$$\Big(Hf\Big)_{(i,j)} = \frac{1}{2}(a_{ij} + a_{ji}) \implies Hf = \frac{1}{2}(A + {}^t A) = A \text{ (symétrique définie positive)}$$

$$\implies f \text{ est strictement convexe.}$$

De plus, $f(x) \longrightarrow +\infty$ quand $\|x\| \longrightarrow +\infty$ car (λ désigne la plus petite valeur propre de A, qui est positive) :

$$f(x) \geq \frac{\lambda}{2} \|x\|_2^2 - \|b\|_2 \|x\|_2 \longrightarrow +\infty \text{ quand } \|x\|_2 \longrightarrow +\infty$$

Donc il existe un unique $x \in \mathbb{R}^n$ / $\underset{\mathbb{R}^n}{\mathrm{Min}}\, f = f(x)$. Cette propriété est équivalente à $\nabla f(x) = 0$.

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n} (a_{ij} + a_{ji}) x_j - b_i \implies \nabla f(x) = \frac{1}{2}(A + {}^t A)x - b$$

Puisque A est symétrique, $\nabla f(x) = Ax - b$. Donc :

$$Ax = b \iff f(x) = \underset{\mathbb{R}^n}{\mathrm{Min}}\, f, \text{ avec } f(x) = \frac{1}{2}\, {}^t x \; A \; x - {}^t b x$$

Cela permet de reformuler la résolution du système $Ax = b$ comme un problème de minimisation.

1. À vérifier, ce n'est pas lisible sur le kiosk

2 Quelques méthodes numériques pour l'optimisation sous contraintes :

Nous abordons maintenant le calcul numérique d'un minimum de $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$de classe $\mathcal{C}^1$. On suppose que $\lim\limits_{\|x\| \longrightarrow +\infty} f(x) = +\infty$, de sorte que ce minimum existe.

Nous allons d'abord voir des **méthodes de gradient**, qui sont des algorithmes itératifs utilisant uniquement f et ∇f.

L'exemple le plus simple d'une telle méthode est l'algorithme du **gradient à pas constant** :

$$\begin{cases} x_{k+1} = x_k - \rho \nabla f(x_k) & \rho > 0 \text{ fixé} \\ x_0 \in \mathbb{R}^n \text{ donné} & \end{cases}$$

Cette méthode est motivée par la propriété que $-\nabla f$ est orienté dans le sens des valeurs de f décroissantes.

On dit alors que $-\nabla f(x_k)$ est une **direction de descente** en x_k.

La méthode du gradient à pas constant est assez peu utilisée en pratique car elle conduit facilement à des instabilités numériques. Par exemple, pour $f(x) = x^4$ (fonction strictement convexe) on obtient $x_{k+1} = x_k(1 - 4\rho x_k^2)$. Si $x_0^2 \geq \frac{1}{\rho}$, on montre par récurrence que $|x_{k+1}| \geq 3|x_k|$ (car $1 - 4\rho x_k^2 \leq -3$) et donc $|x_k| \longrightarrow_{k \to +\infty} +\infty$.

Pour éviter ce type de phénomène, on peut considérer la **méthode de la plus grande pente** (ou steepest descent method) dans laquelle ρ est adapté à chaque itération de manière **optimale** :

$$\begin{cases} x_0 \in \mathbb{R}^n \text{ donné} \\ x_{k+1} = x_k - \rho_k \nabla f(x_k) \end{cases} \qquad f\left(x_k - \rho_k \nabla f(x_k)\right) = \operatorname*{Min}_{\rho \geq 0} f\left(x_k - \rho \nabla f(x_k)\right)$$

À chaque étape de l'itération, il faut donc résoudre un problème de minimisation en une dimension ; plus précisément minimser la fonction $\phi : \mathbb{R}^+ \longrightarrow \mathbb{R}$:

$$\rho \mapsto f(x_k - \rho \nabla f(x_k)) := \phi(\rho)$$

un minimum étant atteint en $\rho = \rho_k$ (le minimum existe sans être nécessairement unique) puisque $\lim\limits_{\|x\| \to +\infty} f(x) = +\infty$.

Calcul de ρ_k :

Il y a plusieurs possibilités.

- Méthode de Newton ou méthode de la sécante pour résoudre $\phi'(\rho) = 0$. Noter que c'est une condition nécessaire mais en général non suffisante pour obtenir un minimum.

  Cependant, si f est convexe alors ϕ est aussi convexe (c'est la restriction de f à une droite passant par x_k).

  Dans ce cas $\phi'(\rho) = 0 \iff \phi(\rho) = \operatorname*{Min}_{y \in]0, +\infty[} \phi(y)$

- Posons $a = 0$.

  On suppose $\phi : [a, b] \longrightarrow \mathbb{R}$ unimodale, c.à.d.

  $$\exists \rho^{\in}]a, b[\text{ tel que } \phi' < 0 \text{ sur }]a, \rho^*[\text{ et } \phi' > 0 \text{ sur }]\rho^*, b[.$$

  On pose $\delta = \dfrac{b-a}{4}, x_i = a + i\delta$.

  Selon la position relative des $f(x_i)$ $(i = 1, 2, 3)$ on peut choisir $a' < b'$ tels que f est unimodale sur $[a', b'] \subset [a, b]$ et $b' - a' = \frac{1}{2}(b - a)$. On recommence l'opération sur $[a', b']$ jusqu'à atteindre la précision souhaitée.

- **Cas particulier d'une fonction quadratique :**

  $$f(x) = \frac{1}{2}\, {}^t x\, A\, x - {}^t b\, x$$

  $A \in M_n(\mathbb{R})$ symétrique définie positive, $b \in \mathbb{R}^n$.

  Notons $r_k = \nabla f(x_k) = A x_k - b \neq 0$ (sinon le min est déjà atteint !)

  $\phi'(\rho_k) = 0 \iff r_{k+1}.r_k = 0 \iff \underbrace{A x_k - \rho_k\, A\, r_k}_{A x_{k+1}} - b).r_k = 0$

  On obtient donc explicitement :

  $$\rho_k = \frac{\|r_k\|_2^2}{{}^t r_k\, A\, r_k}$$

  avec ${}^t r_k\, A\, r_k \neq 0$ puisque A est symétrique définie positive.

Remarque 13 En pratique le calcul de p_k n'a pas besoin d'être réalisé avec une très grande précision.

> On peut montrer que la méthode de la plus grande pente converge pour toute condition initiale x_0 si x est strictement convexe. La convergence est linéaire et peut donc être assez lente.

> Pour avoir ue convergence plus rapide, on peut utiliser la méthode de Newton pour résoudre $\nabla f(x) = 0$. En particulier, si f est convexe on obtient ainsi forcément un minimum de f. Il existe par ailleurs des variantes moins coûteuses que Newton et efficaces, comme la méthode de Broyden.

Une autre méthode beaucoup utilisée est la **méthode du gradient conjugué**.

Soit $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ de classe $\mathcal{C}^2$, avec $f(x) \xrightarrow{\|x\| \to +\infty} +\infty$ et $H_f(x)$ symétrique définie positive $\forall x \in \mathbb{R}^n$.

f possède alors un minimum global strict $\overline{x} \in \mathbb{R}^n$. La méthode du gradient conjugué utilise une direction de descente plus efficace que $\nabla f(x_k)$, qui fait également appel à $\nabla f(x_{k-1})$. Nous allons étudier cette méthode lorsque f est une fonction quadratique mais elle s'applique dans un cadre plus général.

3 Méthode du gradient conjugé pour une fonction quadratique

On considère $f(x) = \frac{1}{2}\, {}^t x\, A\, x - {}^t b\, x$ avec $A \in M_n(\mathbb{R})$ symétrique définie positive et $b \in \mathbb{R}^n$. Nous avons vu que $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ admet un minimum global strict en $x = \overline{x}$ avec $A\overline{x} = b$.

La méthode du gradient conjugué définit une suite $(x_k)_{k\geq 0}$ qui converge vers $\overline{x}$. Nous allons voir que la convergence se fait en **un nombre fini d'itérations** $\leq n$; de ce point de vue, la méthode du gradient conjugué est donc à classer parmi les méthodes directes. Cependant, à cause des erreurs d'arrondis, cette propriété n'est pas vérifiée en pratique (plus particulièrement pour de grands systèmes) et la méthode est plutôt considérée comme itérative. On contrôlera donc cet algorithme par un nombre maximal d'itérations et par un test d'arrêt.

3.1 Description de la méthode :

On notera par la suite $r_k = \nabla f(x_k) = Ax_k - b$. Si $r_k = 0$ alors l'algorithme s'arrête ($x_k =$? illisible).

i) **Initialisation :** On fixe $x_0 \in \mathbb{R}^n$.

- Si $x_0 = 0$ alors l'algorithme s'arrête car $x_0 = \overline{x}$.
- Si $x_0 \neq 0$, on calcule x_1 par la méthode de plus grande pente.
  On pose $\omega_0 = \nabla f(x_0)$.
  $-\omega_0 =$ direction de pente pour calculer x_1.
  $x_1 = x_0 - \rho_0\omega_0, \qquad f(x_0 - \rho_0\omega_0) = \underset{\rho\geq 0}{\mathrm{Min}}\, f(x_0 - \rho\omega_0)$

  Remarque 14 Minimum explicite car minimse un polynôme de degré 2 en ρ.

ii) **Itération :** On suppose connus x_k et ω_{k-1} ($-\omega_{k-1}$ est la direction de la pente utilisée pour calculer x_k).

- Si $r_k = 0$ alors l'algorithme s'arrête car $x_k = \overline{x}$.
- Si $r_k \neq 0$: on pose

$$\begin{aligned} \omega_k &= r_k + \theta_k\omega_{k-1} \\ \theta_k &= \frac{{}^t r_k(r_k - r_{k-1}}{\|r_{k-1}\|_2^2} \end{aligned} \tag{1}$$

($-\omega_k =$ direction de la descente pour calculer x_{k+1})

$x_{k+1} = x_k - \rho_k\omega_k, \qquad f(x_k - \rho_k\omega_k) = \underset{\rho\geq 0}{\mathrm{Min}}\, f(x_k - \rho\omega_k)$

Dans le cas présent où f est quadratique, la valeur de ρ_k est connue explicitement (voir le lemme qui suit).

Nous allons montrer les résultats suivants : (en patriculier, $r_k \neq 0$ implique $\omega_k \neq 0$ puisque $r_k \perp \omega_{k-1}$

Lemme 10 *i)* $f(x_{k+1}) = \underset{\theta\in\mathbb{R}}{\mathrm{Min}}\ \underset{\rho\geq 0}{\mathrm{Min}}\ f\Big[x_k - \rho(r_k + \theta\omega_{k-1}\Big]$

ii) ${}^t r_k w_{k-1} = 0, \;\; \rho_k = \dfrac{\|r_k\|_2^2}{{}^t\omega_k A\omega_k}$

iii) ${}^t\omega_k\, A\, \omega_{k-1} = 0 \qquad$ (w_k et ω_{k-1} sont dits "A-conjugés")

Lemme 11 ${}^t r_k \, r_{k-1} = 0$ et (1) se transforme en :

$$\theta_k = \frac{\|r_k\|_2^2}{\|r_{k-1}\|_2^2} \tag{2}$$

Remarque 15 Les formules (1) et (2) sont équivalentes pour une fonction f quadratique. Pour f plus générale, (1) correspond à la méthode de Polak-Ribière et (2) à celle de Fletcher-Reeves. La méthode du gradient conjugué dans le cas quadratique est dûe à Hestenes et Steifel (1952).

3.2 Preuve du lemme 10

Nous allons montrer successivement *ii*), *i*) et *iii*).

Tout d'abord, puisque $f(x_{k-1} - \rho_{k-1}\omega_{k-1}) = \underset{\rho \geq 0}{\text{Min}} \; f(x_{k-1} - \rho\omega_{k-1})$

On a $\nabla f(x_{k-1} - \rho_{k-1}\omega_{k-1}) - \omega_{k-1} = 0$, soit $r_k \omega_{k-1} = 0 \implies$ on a montré *ii*) $1^{\text{ère}}$ égalité.

Pour $\omega = r_k + \theta\omega_{k-1}$ on a (polnyôme du second degré en ρ.

$$\begin{aligned} f(x_k - \rho\omega &= f(x_k) - \rho \nabla f(x_k) \, \omega + \frac{1}{2}\rho^2 \, {}^t\omega \, H_f(x_k) \, \omega \\ &= f(x_k) - \rho \, r_k \, \omega + \frac{1}{2}\rho^2 \, {}^t\omega \, A \, \omega \end{aligned}$$

Puisque $r_k \, \omega_{k-1} = 0$, $r_k \, \omega$ est indépendant de θ et on obtient :

$$f(x_k - \rho\omega) = f(x_k) - \rho \, \|r_k\|^2 + \frac{1}{2}\rho^2 \, {}^t\omega \, A \, \omega \tag{3}$$

Le minimum de ce polynôme de degré 2 est atteint en :

$$\rho_\theta = \frac{\|r_k\|_2^2}{{}^t\omega \, A \, \omega} \qquad 2^{\text{ème}} \text{ égalité de } ii)$$

et vaut

$$f(x_k - \rho_\theta \omega) = f(x_k) - \frac{1}{2} \frac{\|r_k\|_2^4}{{}^t\omega \, A \, \omega}$$

Pour minimiser $f(x_k - \rho_\theta\omega)$ suivant θ il faut minimiser ${}^t\omega \, A \, \omega$, c'est à dire $|\omega|$. Il faut choisir pour cela $\omega = \omega_k$ tel que ${}^t\omega_k \, A \, \omega_{k-1} = 0$, ce qu'on notera $\omega_k \perp \omega_{k-1}$:

$$< r_k + \theta\omega_{k-1}, r_k + \theta\omega_{k-1} = |r_k|^2 + 2\theta < r_k, \omega_{k-1} > + \theta^2 |\omega_{k-1}|^2$$

Minimum pour :

$$\theta = \theta_k = -\frac{< r_k, \omega_{k-1} >}{|\omega_{k-1}|^2} \tag{4}$$

Donc :

$$\omega_k = r_k - \omega_{k-1}\frac{< r_k, \omega_{k-1} >}{|w_{k-1}|^2} \tag{5}$$

D'où $\omega_k \perp \omega_{k-1}$. Afin de montrer le lemme 10, il reste à montrer que (4) correspond bien à (1). D'une part :

$$\begin{aligned} r_k - r_{k-1} = A\,(x_k - x_{k-1}) = -\rho_{k-1}\,A\,\omega_{k-1} \qquad \text{donc :} \\ {}^t r_k(r_k - r_{k-1}) = -\rho_{k-1} < r_k, \omega_{k-1} > \end{aligned} \tag{6}$$

D'autre part :

$$\begin{aligned} |\omega_{k-1}|^2 = (A\omega_{k-1}, \omega_{k-1}) &= -\frac{1}{\rho_{k-1}}(A(x_k - x_{k-1}), \omega_{k-1}) \\ &= -\frac{1}{\rho_{k-1}}(r_k - r_{k-1}, \omega_{k-1}) \\ &= \frac{1}{\rho_{k-1}}(r_{k-1}, \omega_{k-1}) \qquad\qquad (\text{car } (r_k, \omega_{k-1}) = 0) \\ &= \frac{1}{\rho_{k-1}}(r_{k-1}, r_{k-1} - \theta_{k-1}\omega_{k-2}) \\ &= \frac{1}{\rho_{k-1}}\;\|r_k\|^2 \qquad\qquad (\text{car } (r_{k-1}, \omega_{k-2}) = 0) \end{aligned}$$

Donc :

$$\|r_k\|^2 = \rho_{k-1}|\omega_{k-1}|^2 \tag{7}$$

Avec (4), (6) et (7) on obtient donc :

$$\frac{{}^t r_k(r_k - r_{k-1}}{\|r_{k-1}^2\|} - \frac{< r_k, \omega_{k-1} >}{|\omega_{k-1}|^2} = \theta_k$$

On obtient donc la formule (**??**) plus simple pour le calcul de θ_k.

3.3 Convergence de la méthode du gradient conjugué et preuve du 11

Supposons $r_k \neq 0$ pour $k = 0, \ldots, n-1$ (si r_k s'annule l'algorithme converge). Cela implique $\rho_k \neq 0$ pour $k = 0, \ldots, n-1$.

Lemme 12 Pour tout $k = 1, \ldots, n$ on a :

$$(P_k) \quad \begin{cases} r_k\,\omega_q = 0 & \text{pour } q = 0, \ldots, k-1 \\ {}^t\omega_k\,A\omega_q = 0 & \text{pour } q = 0, \ldots, k-1 \\ r_k\,r_q = 0 & \text{pour } q = 0, \ldots, k-1 \end{cases}$$

Preuve 4 Par récurrence. On considère les produits scalaires

$$\begin{cases} (x, y) & = & {}^t xy = x.y \\ & \text{et} & \\ < x, y > & = & {}^t x\,A\,y \end{cases}$$

- P_1 est vraie : $r_1\, r_0 = r_1\, \omega_0 = 0$ (condition d'optimalité de ρ_0)

$$< \omega_1, \omega_0 >= 0 \qquad \text{d'après le lemme 1}$$

- Supposons P_k vraie et montrons P_{k+1}