

## MODULE B<sub>3</sub>

### Méthodes numériques d'optimisation

Dans ce module,  $E$  désigne l'espace euclidien  $\mathbb{R}^n$  avec  $n \in \mathbb{N}$ , muni du produit scalaire usuel et de norme associée la norme euclidienne, notée  $\|\cdot\|_2$ . Pour plus de détails, le lecteur pourra se référer au module **A2 : Différentiabilité sur les espaces euclidiens**.

L'objectif de ce module est d'introduire deux méthodes numériques pour la minimisation d'une fonction différentiable, qui se basent sur la résolution de la règle de FERMAT, et d'en étudier les propriétés théoriques. Dans ce module, on s'intéresse donc à la minimisation d'une fonction  $f : E \rightarrow \mathbb{R}$  différentiable. **On suppose qu'elle admet au moins un minimiseur.**

## 1 Direction de descente

### 1.1 Définition

Les deux méthodes numériques que nous allons étudier dans les sections qui suivent se basent sur la notion de *direction de descente*.

#### Définition 1 (Direction de descente)

Soient  $\mathcal{U} \subset \mathcal{X}$  un ouvert,  $f : \mathcal{U} \rightarrow \mathbb{R}$  une fonction et  $x_0 \in \mathcal{U}$ . On dit que  $d \in \mathcal{X}$  est une *direction de descente* pour  $f$  au point  $x_0$  s'il existe  $\tau_0 > 0$  tel que

$$\forall \tau \in ]0; \tau_0], \quad f(x_0 + \tau d) < f(x_0)$$

Autrement dit, au voisinage de  $x_0$ , la fonction  $f$  décroît dans la direction de  $d$ . On en déduit en particulier que, si  $x_0$  est un minimiseur local de  $f$ , alors  $f$  n'admet pas de direction de descente en  $x_0$ .

Un premier lien avec la dérivée partielle est facile à établir :

#### Proposition 1

Soient  $\mathcal{U} \subset \mathcal{X}$  un ouvert,  $f : \mathcal{U} \rightarrow \mathbb{R}$  une fonction et  $x_0 \in \mathcal{U}$ . Soit  $d \in \mathcal{X}$  une direction de descente pour  $f$  en  $x_0$ . On suppose que  $f$  admet une dérivée directionnelle suivant la direction  $d$ . Alors

$$f'(x_0; d) \leq 0$$

DÉMONSTRATION : En effet, soit  $\tau_0 > 0$  tel que

$$\forall \tau \in ]0; \tau_0], \quad f(x_0 + \tau d) < f(x_0)$$

On a en particulier que

$$\forall \tau \in ]0; \tau_0], \quad \frac{f(x_0 + \tau d) - f(x_0)}{\tau} < 0$$

Puisque  $f$  admet une dérivée directionnelle suivant  $d$  en  $x_0$ , la limite du membre de gauche existe lorsque  $\tau$  tend vers 0. Il suffit alors de passer à la limite. ■

La réciproque est fautive (si  $x_0$  est un minimiseur local, alors  $f'(x_0; d) = 0$ ). En revanche, nous avons le résultat suivant :

### Proposition 2

Soient  $\mathcal{U} \subset \mathcal{X}$  un ouvert,  $f : \mathcal{U} \rightarrow \mathbb{R}$  une fonction et  $x_0 \in \mathcal{U}$ . Soit  $d \in \mathcal{X}$ . On suppose que  $f$  admet une dérivée directionnelle suivant la direction  $d$ . Si

$$f'(x_0; d) < 0$$

alors  $d$  est une direction de descente pour  $f$  en  $x_0$ .

**DÉMONSTRATION :** Puisque  $f$  admet une dérivée directionnelle suivant  $d$  en  $x_0$ , il existe une fonction  $\varepsilon$  définie au voisinage de 0 telle que  $\varepsilon(t) \rightarrow 0$  lorsque  $t \rightarrow 0$  et

$$f(x_0 + \tau d) = f(x_0) + \tau (f'(x_0; d) + \varepsilon(\tau))$$

Lorsque  $\tau$  tend vers 0, on a

$$f'(x_0; d) + \varepsilon(\tau) \xrightarrow{\tau \rightarrow 0} f'(x_0; d)$$

Puisque  $f'(x_0; d) < 0$  par hypothèse, on en déduit qu'il existe  $\tau_0 > 0$  tel que, pour tout  $0 < \tau \leq \tau_0$ ,

$$(f'(x_0; d) + \varepsilon(\tau)) < 0$$

Par conséquent, pour tout tel  $\tau$ , on a  $f(x_0 + \tau d) < f(x_0)$ . ■

## 1.2 Exemples

On va s'intéresser ici à deux exemples de direction de descente dans le cas différentiable sur un espace de HILBERT. On commence par le cas le plus simple, celui de la direction opposée au gradient.

### Proposition 3

Soit  $\mathcal{X}$  un espace de HILBERT. Soit  $\mathcal{U} \subset \mathcal{X}$  un ouvert et  $x_0 \in \mathcal{U}$ . Soit  $f : \mathcal{U} \rightarrow \mathbb{R}$  une fonction différentiable en  $x_0$ . On suppose que  $\nabla f(x_0) \neq 0$ . Alors

$$d = -\nabla f(x_0)$$

est une direction de descente pour la fonction  $f$  au point  $x_0$ .

**DÉMONSTRATION :** Il suffit de remarquer en vertu de la proposition 2 que

$$f'(x_0; -\nabla f(x_0)) = \langle \nabla f(x_0), -\nabla f(x_0) \rangle = -\|\nabla f(x_0)\|^2 < 0 \quad \blacksquare$$

Lorsque  $f$  est deux fois différentiable et strictement convexe sur  $E = \mathbb{R}^n$ , on peut également exhiber une autre direction de descente :

**Proposition 4**

Soit  $U \subset E$  un ouvert et  $x_0 \in U$ . Soit  $f : U \rightarrow \mathbb{R}$  une fonction deux fois différentiable en  $x_0$ . On suppose que  $\text{Hess } f(x_0)$  est définie positive et que  $\nabla f(x_0) \neq 0$ . Alors

$$d = -(\text{Hess } f(x_0))^{-1} \nabla f(x_0)$$

est une direction de descente pour la fonction  $f$  au point  $x_0$ .

**DÉMONSTRATION :** On va à nouveau appliquer la proposition 2. Commençons par écrire que

$$f'(x_0; -(\text{Hess } f(x_0))^{-1} \nabla f(x_0)) = -\langle \nabla f(x_0), (\text{Hess } f(x_0))^{-1} \nabla f(x_0) \rangle$$

Or, puisque  $\text{Hess } f(x_0)$  **symétrique définie positive**, elle est diagonalisable. On note  $\lambda_{\max}$  la plus grande valeur propre (positive) de  $\text{Hess } f(x_0)$ . On a alors

$$\langle \nabla f(x_0), (\text{Hess } f(x_0))^{-1} \nabla f(x_0) \rangle \leq \frac{\|\nabla f(x_0)\|_2^2}{\lambda_{\max}} > 0$$

ce qui achève la démonstration. ■

On voit notamment que, sauf cas particulier,  $f$  peut admettre plusieurs directions de descente en tout point non minimiseur local.

### 1.3 Principe des méthodes de descente

La notion de direction de descente est centrale dans la conception des méthodes itératives d'optimisation dites de *descente*. En effet, dans le cas des espaces de HILBERT, la règle de FERMAT assure qu'il suffit de résoudre l'équation

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

pour obtenir un point critique de  $f$ , parmi lesquels figurent les (potentiels) minimiseurs de  $f$ . Or, cette équation est en général difficile à résoudre. Le principe des méthodes itératives consiste donc à partir d'un point  $x_0$  de l'espace  $\mathcal{X}$  et à générer une suite  $(x_k)_{k \in \mathbb{N}}$  de  $\mathcal{X}^{\mathbb{N}}$  qui, si possible, tend vers un minimiseur de  $f$ . Dans les méthodes que nous allons présenter plus bas, la règle de génération de cette suite se base sur une information *locale*, c'est-à-dire que le point suivant  $x_{k+1}$  est choisi en fonction des connaissances (valeur de la fonction, du gradient etc.) au (voisinage du) point  $x_k$  courant. Or, la manière la plus intuitive d'espérer générer un point  $x_{k+1}$  qui soit plus proche d'un minimiseur que le point précédent  $x_k$  est de s'assurer que

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

En effet, si vous randonnez en montagne enneigée et que, perdu, vous souhaitez redescendre, la méthode la plus simple est de choisir à chaque pas que vous faites la direction qui vous fait aller plus bas que votre position initiale<sup>1</sup>.

Pour ce faire, il suffit, si  $f$  admet une direction de descente  $d$  en  $x_k$ , de définir

$$x_{k+1} = x_k + \tau_k d$$

1. Évidemment, cela ne vous prémunit pas de tomber dans une cuvette, c'est-à-dire, mathématiquement, un minimiseur local. En revanche, on verra que, si vous êtes sur les flancs d'une vallée convexe régulière et que vous faites des pas suffisamment petits, ce procédé vous conduit nécessairement au fond de la vallée.

avec  $\tau_k > 0$  suffisamment petit (c'est-à-dire, si on reprend les notations de la définition 1, pour  $\tau_k \leq \tau_0$ ). La conception de telles méthodes repose donc sur le choix de deux éléments :

- **choix de la direction de descente  $d$**  : il faut fixer une règle permettant de définir en chaque point  $x_k$  une direction de descente (il suffit par exemple d'utiliser les résultats précédents) ;
- **choix du pas  $\tau_k$**  : celui-ci doit obéir à deux impératifs. Le premier est qu'il doit être suffisamment petit pour assurer la décroissance de la suite des  $f(x_k)$ , ce qui implique d'être capable d'estimer la valeur  $\tau_0$  apparaissant dans la définition 1. Le second, plus difficile encore, est que ce choix doit assurer la convergence de la suite de  $x_k$  vers un minimiseur. On verra par la suite que ces deux critères ne conduisent pas aux mêmes conditions sur le choix de  $\tau_k$ .

Avant de poursuivre, on peut commencer par faire une remarque générale sur les méthodes de descente, lorsque la fonction  $f$  admet un minimiseur. Dans ce cas, on a vu que  $f$  est minorée. Or, la suite des  $f(x_k)$  est décroissante (par construction), et minorée (par hypothèse). Elle est donc nécessairement convergente. Cependant, rien ne garantit en général qu'elle converge vers le minimum de  $f$ . Par ailleurs, même si elle converge vers le minimum de  $f$  (auquel cas la suite des  $x_k$  est une suite minimisante), rien n'assure non plus que la suite des itérés  $x_k$  soit convergente.

## 2 Méthode de NEWTON pour l'optimisation

### 2.1 Rappel : méthode de NEWTON

Ainsi que motivé dans la section précédente, on va s'intéresser au problème général suivant

$$\text{Trouver } x \in E \text{ tel que } G(x) = 0 \quad (\star)$$

avec  $G : E \rightarrow \mathbb{R}^m$  une application. *Supposons-la de classe  $\mathcal{C}^1$* . Pour résoudre ce problème, on peut utiliser la *méthode de NEWTON*, qui construit une suite de points  $x_k$  convergeant vers une solution (si elle existe) du problème  $(\star)$ .

On va commencer par en donner un aperçu en dimension 1 ( $n = m = 1$ ). Considérons la fonction dérivable  $G : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  dont la courbe représentative est donnée en figure 1. L'idée est de, partant d'un point initial  $x_0 \in \mathbb{R}$ , construire un second point  $x_1$  en approchant *localement* la fonction  $G$  par une fonction affine. La meilleure façon de procéder est de remplacer  $G$  par la tangente  $\tilde{G}$  à la courbe représentative de  $G$  en  $x_0$ , car, au premier ordre, celle-ci constitue la meilleure approximation de la fonction au voisinage du point  $x_0$ . Cette tangente est la droite d'équation

$$\tilde{G} : x \mapsto G'(x_0)(x - x_0) + G(x_0)$$

(on pourra vérifier que la pente de cette droite vaut  $G'(x_0)$  et qu'elle passe bien par le point  $(x_0, G(x_0))$ ). Si  $G'(x_0) \neq 0$ , alors le problème

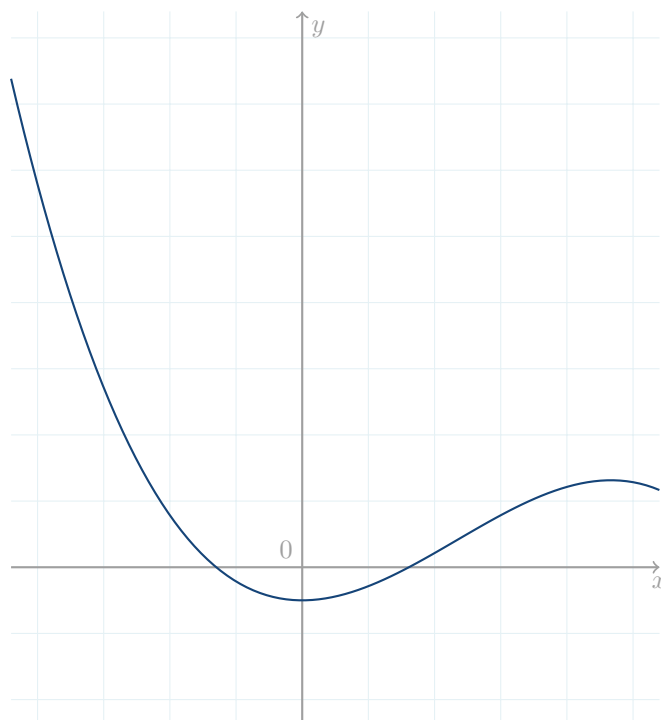
$$\text{Trouver } x \in E \text{ tel que } \tilde{G}(x) = 0$$

admet une unique solution : il s'agit de l'intersection entre les deux droites sécantes

$$y = G'(x_0)(x - x_0) + G(x_0) \quad \text{et} \quad y = 0$$

c'est-à-dire l'unique point  $x_1$  vérifiant

$$0 = G'(x_0)(x_1 - x_0) + G(x_0) \quad \Longleftrightarrow \quad x_1 = x_0 - \frac{G(x_0)}{G'(x_0)}$$

FIGURE 1 – Exemple de fonction  $G$  en dimension 1.

La construction de ce point est illustrée en figure 2. Si  $G'(x_1) \neq 0$ , alors on peut réitérer ce processus et construire un nouveau point  $x_2$ , et recommencer si  $G'(x_2) \neq 0$ . Comme illustré en figure 2, il semble qu'un tel algorithme génère des points  $x_k \in \mathbb{R}$  convergeant vers un des deux zéros de  $G$ . Ces points sont récursivement définis par la relation

$$\forall k \in \mathbb{N}, \quad x_{k+1} = x_k - \frac{G(x_k)}{G'(x_k)}$$

tant que  $G'(x_k) \neq 0$ .

En dimension quelconque, l'algorithme de NEWTON s'écrit à l'aide de l'inverse de la jacobienne de  $G$  : partant d'un point  $x_0 \in E$ , on génère une suite de points  $x_k$  définis de manière récursive par

$$\forall k \in \mathbb{N}, \quad x_{k+1} = x_k - (JG(x_k))^{-1}(G(x_k))$$

qui sont bien définis tant que la matrice jacobienne  $JG(x_k)$  est inversible.

*Supposons que la suite des  $x_k$  soit bien définie.* Intéressons-nous à l'éventuelle limite de cette suite. Tout d'abord, notons que la suite est définie à l'aide d'une fonction continue  $H$

$$x_{k+1} = H(x_k)$$

avec ici  $H(x) = x - (JG(x))^{-1}(G(x))$ . Un tel algorithme est alors qualifié d'algorithme du point fixe. En effet, si la suite des  $x_k$  converge vers une limite  $x^*$ , alors celle-ci vérifie (par unicité de la limite et la continuité de  $H$ )

$$x^* = H(x^*)$$

Autrement dit, toute limite de la suite  $(x_k)_{k \in \mathbb{N}}$  est un point fixe de la fonction  $H$ . On dispose alors du résultat suivant :

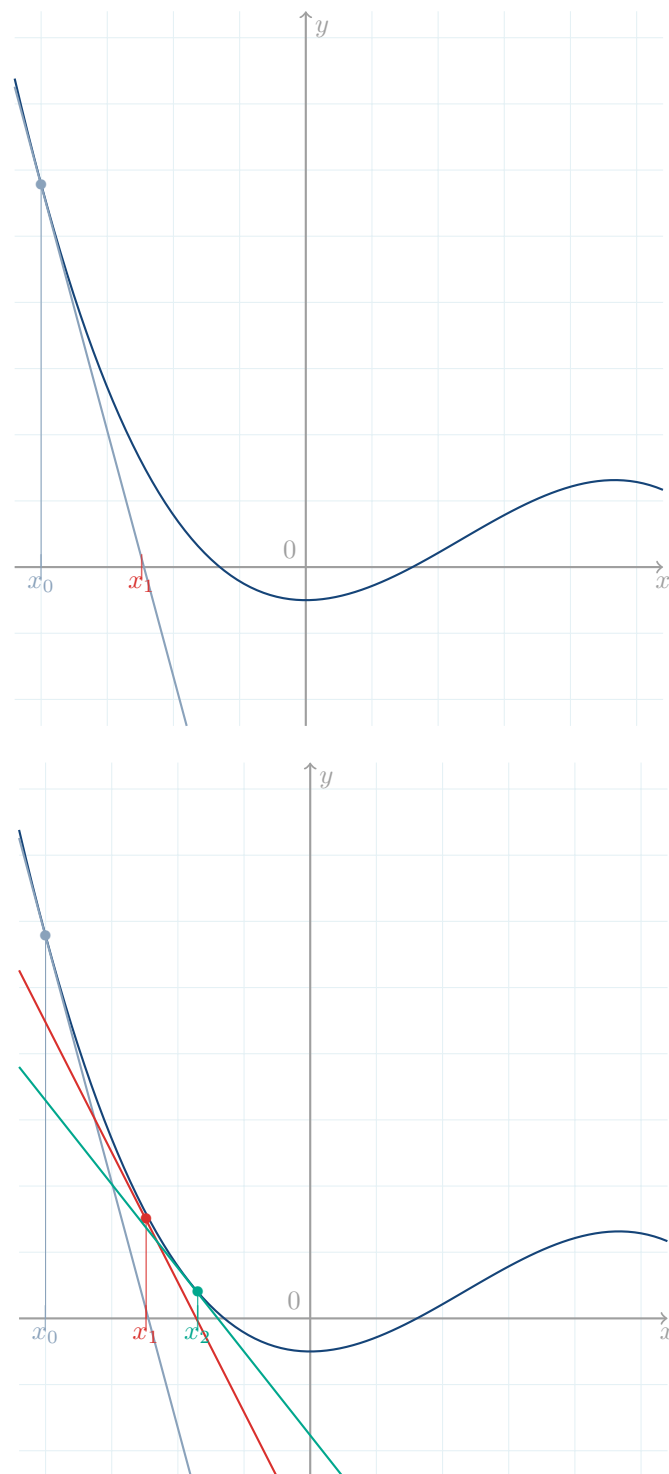


FIGURE 2 – Construction des points dans la méthode de NEWTON. Les points  $(x_k, f(x_k))$  sont représentés dans la même couleur que les tangentes associées.

**Théorème 1** (Théorème de point fixe de PICARD)

Soit  $H : E \rightarrow E$  une application continue. Si  $H$  est lipschitzienne, de constante de LIPSCHITZ  $L < 1$ , alors  $H$  admet un unique point fixe et l'algorithme du point fixe générant une suite  $(x_k)_{k \in \mathbb{N}}$  à partir du point  $x_0 \in E$  grâce à la relation de récurrence

$$x_{k+1} = H(x_k)$$

converge, dans le sens où la suite  $(x_k)_{k \in \mathbb{N}}$  converge vers le point fixe de  $H$ .

On dit dans ce cas que l'application  $H$  est *contractante*.

**DÉMONSTRATION :** Laissé au lecteur. L'idée est de montrer que la suite de  $x_k$  est une suite de CAUCHY, donc convergente dans les espaces de BANACH. Ensuite, on utilise la continuité de  $H$  pour montrer que la limite est nécessairement un point fixe de  $H$ . L'unicité du point fixe découle de la remarque suivante : si  $\bar{x}_1$  et  $\bar{x}_2$  sont deux points fixes de  $H$ , alors

$$\|\bar{x}_1 - \bar{x}_2\|_2 = \|H(\bar{x}_1) - H(\bar{x}_2)\|_2 \leq L \|\bar{x}_1 - \bar{x}_2\|_2 < \|\bar{x}_1 - \bar{x}_2\|_2$$

La difficulté dans ce cas est de déterminer si la fonction  $H$  est lipschitzienne, et, le cas échéant, d'en déterminer la constante de LIPSCHITZ. Ce n'est en général pas le cas : considérons par exemple la fonction  $G(x) = 1 - 1/x$  définie sur  $]0; +\infty[$ . Alors on a pour tout  $x > 0$

$$H(x) = x - \frac{G(x)}{G'(x)} = x - \frac{1 - 1/x}{1/x^2} = x - x^2 + x = 2x - x^2$$

qui n'est pas lipschitzienne. En effet, on a pour tout  $x > 0$

$$|H(x) - H(2x)| = |2x - x^2 - 4x + 4x^2| = |-2x + 3x^2| = x|3x - 2|$$

Or,  $|x - 2x| = x$ , de sorte que pour tout  $L > 0$ ,

$$|H(x) - H(2x)| > L|x - 2x|$$

pour tout  $x > (L + 2)/3$ . Ainsi,  $H$  n'est pas contractante non plus. Néanmoins, si  $H$  est de classe  $\mathcal{C}^2$  (on considère toujours le cas réel pour l'instant), c'est-à-dire si  $G$  est de classe  $\mathcal{C}^2$  et que  $G'$  ne s'annule pas, alors

$$H'(x) = 1 - \frac{(G'(x))^2 - G(x)G''(x)}{(G'(x))^2} = \frac{G(x)G''(x)}{(G'(x))^2}$$

Si  $G$  s'annule en  $x^*$ , alors  $H'(x^*) = 0$ . Il existe donc un intervalle  $]x^* - \varepsilon; x^* + \varepsilon[$  autour de  $x^*$  sur lequel  $H'$  (qui est continue) est compris entre  $-L$  et  $L$  avec  $0 < L < 1$ . Dans ce cas, le théorème des accroissements finis assure que, pour tout  $x, x' \in ]x^* - \varepsilon; x^* + \varepsilon[$ , il existe un point  $x'' \in ]x; x'[$  tel que

$$H(x) - H(x') = H'(x'')(x - x')$$

soit

$$|H(x) - H(x')| = |H'(x'')| |x - x'| \leq L |x - x'|$$

On en déduit que  $H$  est contractante sur l'intervalle  $]x^* - \varepsilon; x^* + \varepsilon[$  (qui contient  $x^*$ ). Ainsi, tant que les points  $x_k$  restent dans cet intervalle, une généralisation immédiate<sup>2</sup>

2. Il suffit de définir une fonction  $\tilde{H}$  égale à  $H$  sur l'intervalle  $[x^* - \varepsilon; x^* + \varepsilon]$  et constante égale à  $H(x^* + \varepsilon)$  sur  $]x^* + \varepsilon; +\infty[$  et constante égale à  $H(x^* - \varepsilon)$  sur  $]-\infty; x^* - \varepsilon[$ .

du théorème 1 permet de montrer que l'algorithme du point fixe converge vers  $x^*$ . Pour cela, remarquons que, puisque  $x^*$  est un point fixe de  $H$ , on a l'égalité

$$H(x) - x^* = H(x) - H(x^*)$$

En particulier, si  $x_k \in ]x^* - \varepsilon; x^* + \varepsilon[$ , alors on a

$$|x_{k+1} - x^*| = |H(x_k) - x^*| = |H(x_k) - H(x^*)| \leq \delta |x_k - x^*| < \delta \varepsilon < \varepsilon$$

d'où l'on déduit que  $x_{k+1} \in ]x^* - \varepsilon; x^* + \varepsilon[$ . Dans ce cas, il suffit donc que  $x_0$  ait été choisi dans  $]x^* - \varepsilon; x^* + \varepsilon[$  pour que l'algorithme du point fixe converge. Ce résultat se généralise en dimension supérieure, et donne le théorème suivant :

### Théorème 2

Soit  $G : E \rightarrow \mathbb{R}^m$  une fonction de classe  $\mathcal{C}^2$ . Soit  $x^*$  un point de  $E$  tel que  $G(x^*) = 0$ . Alors il existe un réel  $\varepsilon > 0$  tel que si  $\|x_0 - x^*\|_2 \leq \varepsilon$ , alors l'algorithme de NEWTON générant une suite  $(x_k)_{k \in \mathbb{N}}$  à partir du point  $x_0 \in E$  grâce à la relation de récurrence

$$x_{k+1} = x_k - (JG(x_k))^{-1}(G(x_k))$$

converge vers  $x^*$ .

Autrement dit, l'algorithme de NEWTON génère une suite de point convergeant vers un zéro de la fonction  $G$  (s'il en existe) pourvu que le premier point  $x_0$  ait été choisi *suffisamment* proche de ce zéro. Or, toute la difficulté réside dans cette condition. Tout d'abord, la proximité requise dépend de la fonction  $G$ , et est implicite (il n'existe pas de formule générale permettant de prescrire une distance à respecter). De plus, il est théoriquement difficile de savoir si le point initial vérifie cette condition de proximité, car  $x^*$  n'est pas connu (on cherche justement à l'estimer). On voit donc qu'il est en pratique difficile de vérifier si les hypothèses du théorème 2 sont bien satisfaites.

S'ajoute à cela deux difficultés majeurs dans la mise en place de la méthode de NEWTON : rien *a priori* ne permet d'empêcher l'algorithme de générer un point  $x_k$  pour lequel la matrice jacobienne  $JG(x_k)$  ne soit pas inversible (condition requise pour que la suite des points  $x_k$  soit bien définie) ; par ailleurs, il peut être numériquement coûteux d'évaluer la matrice  $JG(x_k)$ .

Pourquoi s'intéresse-t-on dans ce cas à cet algorithme, qui potentiellement peut générer

- une suite de points mal définis ;
- une suite de points qui ne converge pas (et donc, en particulier, qui ne converge pas vers le point recherché) ;
- et qui peut être numériquement coûteux en calculs ?

La raison en est simple : lorsque cette méthode converge, elle est extrêmement rapide, dans le sens où un très petit nombre d'itérations permet d'obtenir une estimation très précise du point recherché. Plus précisément, sa vitesse est dite *quadratique* : il existe une constante  $C > 0$  telle que, pour tout  $k \in \mathbb{N}$ ,

$$\|x_{k+1} - x^*\|_2 \leq C \|x_k - x^*\|_2^2$$

si bien que, dès que la quantité  $C \|x_k - x^*\|_2$  est strictement inférieure à 1, alors la suite  $(C \|x_k - x^*\|_2)$  converge de manière géométrique vers 0 :

$$C \|x_{k+2} - x^*\|_2 \leq C^2 \|x_{k+1} - x^*\|_2^2 \leq C^4 \|x_k - x^*\|_2^4$$



Il s'agit d'une vitesse de convergence très intéressante : supposons que  $C$  vaut 1 et que  $x_k$  approche  $x^*$  au dixième près (dans le cas réel), c'est-à-dire que  $|x_k - x^*| \leq 0.1$ . Alors l'itération suivante donne une approximation au centième près, c'est-à-dire que  $|x_{k+1} - x^*| \leq 0.01$ , puis la suivante donne une approximation au dix-millième près, c'est-à-dire que  $|x_{k+1} - x^*| \leq 0.0001$ .

## 2.2 Algorithme

Revenons au problème d'optimisation  $(\mathcal{P})$ . Si on applique la méthode de NEWTON pour chercher un zéro du gradient de  $f$ , on est amené à calculer les itérations suivantes

$$\forall k \in \mathbb{N}, \quad x_{k+1} = x_k - (\text{Hess}f(x_k))^{-1}(\nabla f(x_k))$$

ce qui implique *de facto* que  $f$  doit être au moins deux fois différentiable. D'après l'étude menée plus haut, si  $f$  est de classe  $\mathcal{C}^3$ , que les matrices hessiennes  $\text{Hess}f(x_k)$  sont inversibles, et que  $x_0$  est choisi suffisamment près d'une solution optimale de  $(\mathcal{P})$  (c'est-à-dire d'un minimiseur global de  $f$ ), alors la méthode de NEWTON génère une suite de points  $x_k$  qui converge quadratiquement vers un minimiseur de  $f$ .

### Proposition 5

Soit  $f : E \rightarrow \mathbb{R}$  une fonction convexe de classe  $\mathcal{C}^3$ . On suppose que  $\text{Hess}f(x)$  est définie positive en tout point  $x \in E$ . Soit  $x^*$  un minimiseur de  $f$ . Alors il existe un réel  $\varepsilon > 0$  tel que si  $\|x_0 - x^*\|_2 \leq \varepsilon$ , alors l'algorithme de NEWTON générant une suite  $(x_k)_{k \in \mathbb{N}}$  à partir du point  $x_0 \in E$  grâce à la relation de récurrence

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

converge vers  $x^*$ . Par ailleurs, la suite  $(f(x_k))_{k \in \mathbb{N}}$  converge vers le minimum  $f(x^*)$  de  $f$  et la suite  $(\nabla f(x_k))_{k \in \mathbb{N}}$  converge vers 0.

**DÉMONSTRATION :** Les deux derniers points de cette proposition sont des conséquences de la continuité de  $f$  et de  $\nabla f$  en  $x^*$ . ■

Outre les inconvénients de la méthode de NEWTON listées dans le paragraphe précédent, on voit que, pour assurer une convergence (même de manière très théorique), il faut supposer que la fonction  $f$  est de classe  $\mathcal{C}^3$ . Par ailleurs, pour pouvoir appliquer la méthode de NEWTON (c'est-à-dire, être en mesure d'en calculer les itérations), il faut que  $f$  soit de classe  $\mathcal{C}^2$  (on parle de méthode du second ordre). il s'agit d'une condition qui peut être contraignante ; on verra dans la section 3 une classe de méthode qui permet de s'en affranchir.

## 2.3 Méthodes de quasi-NEWTON

La méthode de NEWTON, dans sa forme la plus générale, c'est-à-dire utilisée pour estimer le zéro d'une fonction  $G$ , nécessite d'évaluer à chaque itération la matrice jacobienne de la fonction  $G$  (en dimension 1, la dérivée) et de l'inverser. Ces deux calculs peuvent s'avérer coûteux ou difficiles (s'il n'existe pas de formule explicite pour la matrice jacobienne). Pour éviter cet écueil, on peut remplacer dans les itérations de la méthode de NEWTON la matrice hessienne de  $f$  en  $x_k$  par une approximation inversible  $B_k$  :

$$\forall k \in \mathbb{N}, \quad x_{k+1} = x_k - B_k^{-1} \nabla f(x_k)$$

ou encore de remplacer l'inverse de la matrice hessienne par une approximation  $C_k$  :

$$\forall k \in \mathbb{N}, \quad x_{k+1} = x_k - C_k x_k$$

On parle alors de méthode de quasi-NEWTON. Si la suite de  $B_k$  (resp.  $C_k$ ) est correctement choisie, alors on conserve la convergence de la suite de  $x_k$  vers un zéro de la fonction  $G$ ; dans ce cas, la vitesse de convergence est moins intéressante que pour la méthode de NEWTON (il faudra plus d'itérations pour atteindre la même précision), mais cet écart peut être compensé par le fait que chaque itération sera plus facile à faire (moins de temps de calculs, par exemple).

Dans ce cours, nous n'aborderons pas plus en détails les méthodes de quasi-NEWTON. On se contente d'en donner un aperçu en dimension 1, avec la méthode dite de la sécante.

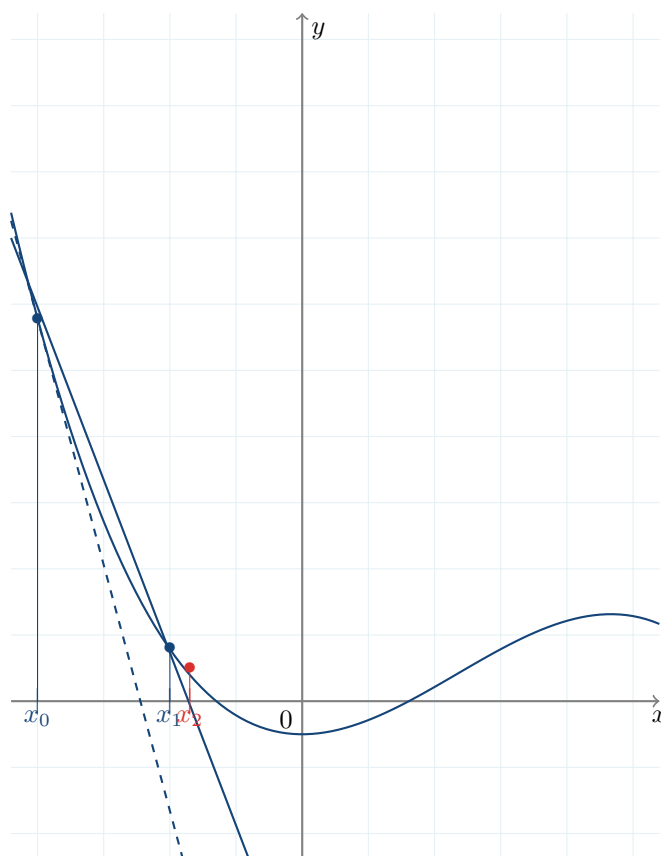


FIGURE 3 – Construction du point  $x_2$  dans la méthode de la sécante. En pointillé, la tangente à la courbe au point  $(x_0, f(x_0))$ , en trait plein, l'approximation obtenue à l'aide du taux de variation.

Soit  $G : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  une fonction dérivable dont on cherche un zéro, c'est-à-dire un point  $x^* \in \mathbb{R}$  tel que  $G(x^*) = 0$ . L'idée dans la méthode de la sécante est de remplacer dans les itérations de la méthode de NEWTON

$$x_{k+1} = x_k - \frac{G(x_k)}{G'(x_k)}$$

le nombre dérivé  $G'(x_k)$  par le taux de variation

$$\frac{G(x_k) - G(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}$$

dont on sait qu'il approche le nombre dérivé  $G'(x_k)$  si  $x_{k-1}$  est proche de  $x_k$ . Les itérations deviennent donc

$$x_{k+1} = x_k - \frac{G(x_k)(x_k - x_{k-1})}{G(x_k) - G(x_{k-1})} = \frac{G(x_k)x_{k-1} - G(x_{k-1})x_k}{G(x_k) - G(x_{k-1})}$$

La construction du point  $x_{k+1}$  se fait de la manière suivante à partir des deux points précédents  $x_k$  et  $x_{k-1}$  : on trace la droite reliant les points  $(x_{k-1}, G(x_{k-1}))$  et  $(x_k, G(x_k))$ , d'équation

$$y = \frac{G(x_k) - G(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}} (x - x_k) + G(x_k)$$

(on voit qu'il est nécessaire d'avoir  $x_k \neq x_{k-1}$  pour que cette droite soit définie de manière unique), puis on calcule l'abscisse du point d'intersection de cette droite avec l'axe des abscisses, c'est-à-dire que l'on résout l'équation

$$0 = \frac{G(x_k) - G(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}} (x_{k+1} - x_k) + G(x_k)$$

On peut vérifier que le point  $x_{k+1}$  vérifiant cette égalité est le point défini plus haut dans les itérations de la méthode de la sécante. L'illustration de la construction de ce point est donnée dans la figure 3.

On voit que la méthode de la sécante nécessite le choix de deux points initiaux  $x_0$  et  $x_1$  ; tout comme dans la méthode de NEWTON, ils doivent être choisis suffisamment près d'un zéro pour assurer la convergence de l'algorithme. La mise en place de cette méthode nécessite cependant moins d'hypothèses que la méthode de NEWTON ; en particulier, elle est applicable sans nécessiter de supposer la fonction  $G$  dérivable (mais cette hypothèse peut être nécessaire pour démontrer des résultats de convergence). Ainsi, si on revient au problème d'optimisation, la fonction objectif doit être au moins dérivable, puisque les itérations de la méthode de la sécante s'écrivent alors

$$x_{k+1} = \frac{f'(x_k)x_{k-1} - f'(x_{k-1})x_k}{f'(x_k) - f'(x_{k-1})}$$

### 3 Méthode du gradient

La méthode de NEWTON, appliquée à la résolution d'un problème d'optimisation convexe lisse non contraint, nécessite de supposer au moins que la fonction objectif est deux fois différentiable. Une telle hypothèse est parfois trop forte ; aussi s'intéresse-t-on dans cette section à une famille de méthodes dite du premier ordre, qui ne font pas cette hypothèse.

#### 3.1 Fonctions régulières

##### Définition 2 (Fonctions régulières)

Soit  $\mathcal{X}$  un espace de HILBERT. Soit  $J : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$  une fonction différentiable. Soit  $L \geq 0$ . On dit que  $J$  est  $L$ -régulière si son gradient  $\nabla J : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{X}$  est lipschitzien de constante de LIPSCHITZ  $L$ , c'est-à-dire si

$$\forall (x, z) \in \mathcal{X}^2, \quad \|\nabla J(x) - \nabla J(z)\| \leq L \|x - z\|$$

Lorsque la fonction est deux fois différentiable, on a la proposition suivante :

**Proposition 6**

Soit  $J : E \rightarrow \mathbb{R}$  une fonction deux fois différentiable. On suppose qu'il existe  $M \geq 0$  tel que

$$\forall x \in E, \quad \|\text{Hess}J(x)\|_F \leq M$$

Alors  $J$  est  $M$ -régulière.

**DÉMONSTRATION :** Il s'agit d'une conséquence de l'inégalité des accroissements finis dans le cas vectoriel. ■

REMARQUE :

- si  $J$  est  $L$ -régulière, alors  $J$  est  $L'$ -régulière pour  $L' \geq L$  ;
- si  $J$  est  $L$ -régulière, alors  $J$  est de classe  $C^2$ . La réciproque est évidemment fausse.

On considère dans l'exemple suivant le cas d'une fonction deux fois différentiable.

**EXEMPLE**

**Régularisation de la valeur absolue.** Soit  $\alpha > 0$ . On considère la fonction suivante :

$$J : \begin{cases} \mathbb{R} & \rightarrow \mathbb{R} \\ x & \mapsto |x| - \alpha \ln \left( 1 + \frac{|x|}{\alpha} \right) \end{cases}$$

En distinguant les deux intervalles  $] -\infty ; 0 [$  et  $] 0 ; +\infty [$ , on peut vérifier que  $J$  est dérivable et que  $J'$  est donnée par

$$\forall x \in \mathbb{R}, \quad J'(x) = \frac{x}{\alpha + |x|}$$

De même, on peut démontrer que  $J$  est deux fois différentiable, et que

$$\forall x \in \mathbb{R}, \quad |J''(x)| = \left| \frac{\alpha}{(\alpha + |x|)^2} \right| \leq \frac{1}{\alpha}$$

de sorte que  $J$  est  $(1/\alpha)$ -régulière.

Commençons par démontrer que l'ensemble des fonctions régulières est stable par combinaison linéaire.

**Proposition 7**

Soit  $\mathcal{X}$  un espace de HILBERT. Soient  $J_1 : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$  une fonction  $L_1$ -régulière et  $J_2 : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$  une fonction  $L_2$ -régulière. Soit  $(\lambda, \mu) \in \mathbb{R}^2$ . Alors la fonction  $\lambda J_1 + \mu J_2$  est  $(|\lambda| L_1 + |\mu| L_2)$ -régulière.

**DÉMONSTRATION :** Il suffit d'appliquer la linéarité de la différentielle, puis l'inégalité triangulaire. ■

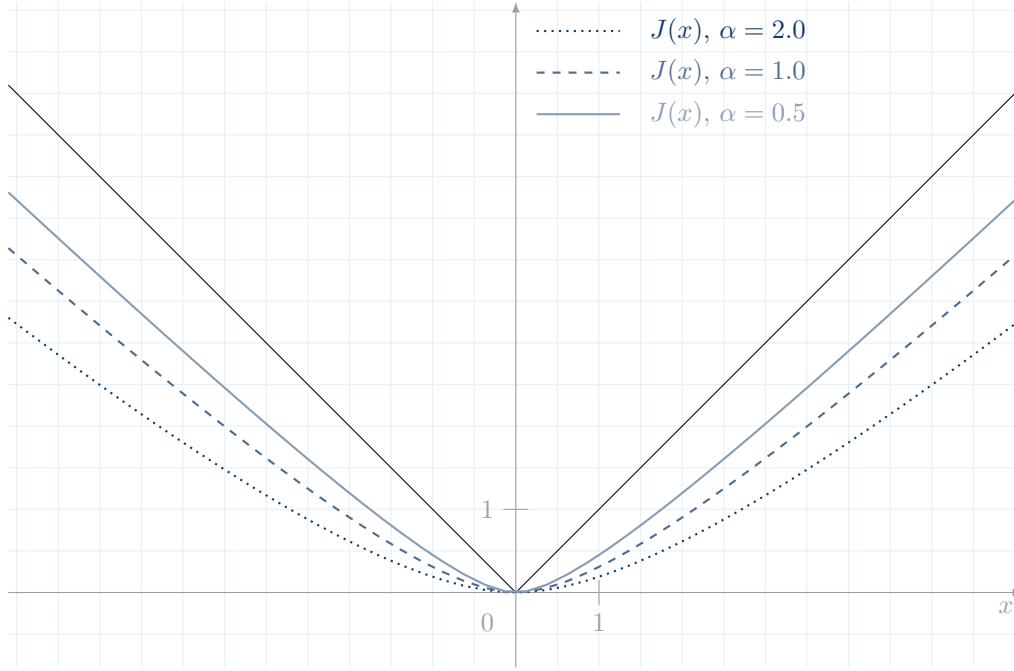


FIGURE 4 – Exemples de régularisation de la valeur absolue (la courbe représentative de cette dernière apparaît en noir).

### Proposition 8

Soit  $\mathcal{X}$  un espace de HILBERT. Soit  $J : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$  une fonction  $L$ -régulière. Soient  $A : \mathcal{Y} \rightarrow \mathcal{X}$  un opérateur linéaire borné et  $b \in \mathcal{X}$ . Alors la fonction  $x \mapsto J(A(x) + b)$  est  $(\|A\|^2 L)$ -régulière.

**DÉMONSTRATION :** La fonction considérée est différentiable de gradient

$$x \mapsto A^*(\nabla J(A(x) + b))$$

puis on utilise la régularité de  $J$  pour écrire que, pour tout  $(x, z) \in \mathcal{Y}^2$ ,

$$\|A^* \nabla J(A(x) + b) - A^* \nabla J(A(z) + b)\| \leq \|A^*\| \|L\| \|A(x) + b - (A(z) + b)\|$$

On obtient le résultat désiré après simplification. ■

## 3.2 Algorithme

L'idée dans la méthode que nous allons présenter dans ce paragraphe est de choisir une autre direction de descente. Plus précisément, la direction de descente choisie au point  $x_k$  est celle donnée par l'opposé du gradient  $-\nabla f(x_k)$ . On génère de cette manière la suite suivante :

$$x_{k+1} = x_k - \tau_k \nabla f(x_k)$$

Contrairement à la méthode de NEWTON, le pas  $\tau_k$  va dépendre de la fonction  $f$  (dans la méthode de NEWTON, il est choisi constant égal à 1).

On parle parfois simplement de *descente de gradient*. Il arrive également que l'on précise méthode du gradient *explicite*, car le gradient est évalué au point courant. Or, il existe une variante de cette méthode dans laquelle le gradient est évalué au point suivant, et qui prend le nom de *méthode du gradient implicite*.

### 3.3 Choix du pas de temps

Il existe de multiples manières de choisir le pas  $\tau_k$  dans la méthode du gradient. Ce choix doit répondre à plusieurs impératifs :

- le calcul du pas  $\tau_k$  doit être réalisable, et si possible le moins coûteux possible ; en effet, si ce calcul est trop coûteux, la méthode du gradient devient elle-même trop coûteuse à appliquer ;
- le choix du pas  $\tau_k$  doit assurer la convergence de l'algorithme, c'est-à-dire la convergence (éventuellement à une sous-suite près), d'au moins une des suites suivantes :  $(J(x_k))_{k \in \mathbb{N}}$  vers le minimum de  $J$ ,  $(\nabla J(x_k))_{k \in \mathbb{N}}$  vers 0 ou  $(x_k)_{k \in \mathbb{N}}$  vers un minimiseur de  $J$  ;
- enfin, la convergence obtenue doit être suffisamment rapide ; autrement dit, pour un degré de précision fixé, il faut que la limite d'une des suites introduites au point précédent soit atteinte en un nombre raisonnable d'itérations (ce nombre dépendant de l'application donnée).

Concernant les deux derniers points, il existe un principe heuristique à garder à l'esprit. L'idée intuitive dans la conception de ces méthodes de gradient est que, plus le pas  $\tau_k$  est grand, plus vite on se déplace dans l'espace  $E$ , et donc, si convergence il y a, plus vite on atteint la limite souhaitée. Cependant, si le pas  $\tau_k$  est trop grand, le déplacement n'est pas suffisamment précis pour s'approcher de la limite. Il y a donc un principe d'équilibre à respecter.

Puisque qu'en tout point non critique, l'opposé du gradient est une direction de descente, une première idée est de suivre cette direction le plus loin possible. Autrement dit, on s'intéresse à la fonction suivante :

$$\varphi : \begin{cases} ]0; +\infty[ & \rightarrow \mathbb{R} \\ \tau & \mapsto f(x_k - \tau \nabla f(x_k)) \end{cases}$$

On sait qu'il existe un  $\tau_0 > 0$  tel que

$$\forall \tau \in ]0; \tau_0], \quad \varphi(\tau) < \varphi(0)$$

Si la fonction  $f$  admet un minimiseur, alors elle est minorée, et c'est également le cas de  $\varphi$  sur  $]0; +\infty[$ . On verra dans un module prochain que, puisque  $\varphi$  est différentiable sur l'ouvert  $]0; +\infty[$ , alors il existe un  $\tau^* > 0$  tel que

$$\forall \tau > 0, \quad \varphi(\tau^*) \leq \varphi(\tau)$$

si

$$\lim_{\tau \rightarrow +\infty} \varphi(\tau) = +\infty$$

ce qui est le cas si  $f$  est infinie à l'infini. Dans ce cas, les points  $\tau^*$  vérifient

$$\varphi'(\tau^*) = 0 \quad \text{soit} \quad \langle \nabla f(x_k), \nabla f(x_k - \tau^* \nabla f(x_k)) \rangle = 0$$

Un tel  $\tau^*$  est appelé *pas optimal*, et la méthode de gradient qui utilise ce choix de pas à chaque itération est appelé *méthode de gradient à pas optimal*. Ce qu'il faut noter, c'est que calculer une valeur de  $\tau^*$  peut être difficile.

## EXEMPLE

**Fonction quadratique généralisée.** On considère la fonction

$$f : \begin{cases} \mathbb{R}^n & \rightarrow \mathbb{R} \\ x & \mapsto c + \langle b, x \rangle + \frac{1}{2} \|Ax\|_2^2 \end{cases}$$

où  $A \in \mathcal{M}_{n,n}(\mathbb{R})$ ,  $b \in \mathbb{R}^n$  et  $c \in \mathbb{R}$ . Alors pour tout  $x \in \mathbb{R}^n$ , on a

$$\nabla f(x) = b + A^\top A x$$

Ainsi, la condition  $\langle \nabla f(x_k), \nabla f(x_k - \tau^* \nabla f(x_k)) \rangle = 0$

s'écrit (après simplification)

$$\|b + A^\top A x_k\|_2^2 - \tau^* \langle b + A^\top A x_k, A^\top A (b + A^\top A x_k) \rangle = 0$$

et est vérifiée par 
$$\tau^* = \frac{\|b + A^\top A x_k\|_2^2}{\|A(b + A^\top A x_k)\|_2^2}$$

qui est bien défini et strictement positif si  $x_k$  n'est pas un minimiseur de  $f$ .

Pour résumer, la méthode du gradient à pas optimal consiste, à partir d'un point courant  $x_k$ , à trouver un point  $x_{k+1}$  tel que  $\tau_k > 0$  et

$$x_{k+1} = x_k - \tau_k \nabla f(x_k) \quad \text{et} \quad \forall \tau > 0, \quad f(x_{k+1}) \leq f(x_k - \tau \nabla f(x_k))$$

En pratique, trouver une valeur optimale  $\tau^*$  n'est pas aisé. Une manière de procéder, lorsque  $f$  est deux fois différentiable, c'est d'utiliser une formule de TAYLOR pour approcher  $f$  au voisinage de  $x_k$  par une fonction quadratique  $\tilde{f}_k$ , c'est-à-dire de la même forme que dans l'exemple précédent. Au lieu de calculer le pas optimal sur la fonction  $f$ , on le calcule sur la fonction quadratique  $\tilde{f}_k$  (pour laquelle le calcul se fait très bien, comme vu dans l'exemple précédent).

On notera que, d'après ce qui précède, on a l'égalité suivante

$$\langle \nabla f(x_k), \nabla f(x_{k+1}) \rangle = 0$$

Il s'ensuit que, puisqu'à l'étape suivante, on explorera la direction donnée par  $-\nabla f(x_{k+1})$ , itération après itération, on explore des directions **orthogonales**.

À partir de cette dernière remarque, et en utilisant des résultats sur les lignes de niveaux d'une fonction différentiable, on peut construire des exemples de fonctions pour lesquelles la méthode du gradient à pas optimal ne génère pas une suite minimisante. Il ne s'agit donc pas d'une méthode que l'on peut utiliser de manière systématique pour minimiser une fonction.

Le choix d'un pas optimal ne garantit pas la convergence de la méthode du gradient, et se révèle en général coûteux à mettre en place, puisqu'il s'agit de résoudre à chaque itération un problème d'optimisation (certes, de dimension 1). Il a donc été proposé d'autres manières de choisir le pas  $\tau_k$ . Le cas le plus simple et le mieux documenté reste celui du *pas constant*, qui, comme son nom l'indique, consiste à ne pas faire varier la valeur du pas  $\tau_k$  au cours des itérations. Il apparaît alors très vite qu'une telle stratégie ne permet pas d'adapter la taille des pas à la topologie locale, et qu'il faut donc faire une hypothèse globale sur celle-ci. La bonne solution est d'imposer la régularité de la fonction que l'on minimise.

### Proposition 9

Soit  $\mathcal{X}$  un espace de HILBERT. Soit  $f : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$  une fonction convexe de classe  $\mathcal{C}^1$ . On suppose que  $\nabla f$  est lipschitzien, de constante de LIPSCHITZ  $L$ . On suppose que  $f$  admet un minimiseur, noté  $x^*$ . Si  $0 < \tau < 2/L$ , alors la méthode du gradient explicite générant une suite  $(x_k)_{k \in \mathbb{N}}$  à partir du point  $x_0 \in \mathcal{X}$  grâce à la relation de récurrence

$$x_{k+1} = x_k - \tau \nabla f(x_k)$$

converge vers  $x^*$ . Par ailleurs, la suite  $(f(x_k))_{k \in \mathbb{N}}$  converge vers le minimum  $f(x^*)$  de  $f$  et la suite  $(\nabla f(x_k))_{k \in \mathbb{N}}$  converge vers 0.

DÉMONSTRATION : Ce résultat est admis. ■

On voit donc que la méthode du gradient explicite est applicable dès que la fonction objectif est différentiable (il suffit d'être capable d'évaluer le gradient de  $f$  en tout point), mais que, pour assurer la convergence de l'algorithme, il faut supposer que le gradient est lipschitzien, et choisir correctement le pas  $\tau$  en fonction de la constante de LIPSCHITZ de  $\nabla f$ .

Il faut noter que le calcul de cette constante peut être difficile. Néanmoins, les hypothèses restent plus faibles que celles demandées par la méthode NEWTON. En particulier, l'initialisation peut être réalisée en n'importe quel point (mais plus le point est éloigné d'un minimiseur, plus le nombre d'itérations nécessaire pour s'en approcher suffisamment sera grand). La vitesse de convergence de la méthode du gradient explicite est également moins intéressante que celle de la méthode de NEWTON (partant du même point  $x_0$ , il faut en général plus d'itérations à la méthode du gradient explicite pour approcher un minimiseur avec la même précision que la méthode de NEWTON).