

Méthodes d'optimisations

Loic Huguel

25 octobre 2022

Table des matières

1	Formulation	2
1.1	Cas général :	2
2	Méthodes itératives	2
2.1	Descente de gradient	2
2.2	Méthode de Newton	3
2.3	Levenberg-Maquardt	3
3	Méthodes linéaires	4
3.1	Les équations normales	4
3.2	Décomposition en valeurs singulières SVD	5

1 Formulation

1.1 Cas général :

Soit le système $Y = f(U, X)$ avec f une fonction de $\mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$, X vecteur d'état et (U_i, Y_i) k couples d'entrées/sorties obtenus par l'expérience. On cherche alors quel est le vecteur X qui permet de décrire au mieux les couples de données (U_i, Y_i) , au sens d'un certain critère S , que on cherchera à minimiser.

Typiquement on choisi le critère des moindres carrés :

$$S(X) = \sum_{i=0}^k (Y_i - f(U_i, X))^2$$

Sous forme vectorielle on notera :

$$S(X) = |Y - F(U, X)|$$

Avec

$$U = (U_0, \dots, U_k) \quad \text{et} \quad Y = (Y_0, \dots, Y_k)^T$$

La solution est donc :

$$X = \operatorname{argmin}(S(X))$$

2 Méthodes itératives

2.1 Descente de gradient

On choisit un point de départ X_0 puis on cherche un état suivant X_{k+1} tel que $S(X_{k+1}) < S(X_k)$. Pour ce faire, on cherche dans quelle direction δ la pente est minimum lorsque on est en X_k .

$$f(U_i, X_k + \delta) = f(U_i, X_k) + \delta J(U_i, X_k)$$

Où J est le Jacobien de f en X_k .

$$S(X_k + \delta) = \sum_{i=0}^k (Y_i - f(U_i, X_k) - \delta J(U_i, X_k))^2$$

$$\frac{dS(X_k + \delta)}{d\delta} = \sum_{i=0}^k 2J(U_i, X_k)(Y_i - f(U_i, X_k) - \delta J(U_i, X_k))$$

Puis si on pose $\frac{dS(X_k + \delta)}{d\delta} = 0$ en vectoriel cela donne :

$$J^T(Y - F(U, X_k) - \delta J) = 0$$

$$\delta = -(J^T J)^{-1} J^T (Y - F(U, X_k))$$

$$X_{k+1} = X_k + \delta$$

2.2 Méthode de Newton

2.3 Levenberg-Maquardt

La technique de Levenberg-Maquardt reprend l'équation de la technique du gradient en amortissant par un paramètre λ .

$$\delta = -(J^T J - \lambda I)^{-1} J^T (Y - F(U, X_k))$$

Maquardt suggère alors de pondérer la matrice identité par la la diagonale de $J^T J$:

$$\delta = -(J^T J - \lambda \text{diag}(J^T J))^{-1} J^T (Y - F(U, X_k))$$

Le paramètre λ est alors ajusté en fonction de la rapidité de la convergence. Si on converge rapidement alors on diminue λ et réciproquement.

Cependant la notion de rapidité de convergence est très subjective, car elle dépend de l'échelle à laquelle on regarde le système.

3 Méthodes linéaires

3.1 Les équations normales

On cherche à résoudre le système :

$$\boxed{Ax = b}$$

Avec b et x des vecteurs et A une matrice. Bien sûr, si la matrice A inversible on a trivialement la solution :

$$x = A^{-1}b$$

Mais sinon, on cherche \hat{x} veut que $E = Ax - b$ soit minimale au sens des moindres carrés c'est à dire que on veut minimiser :

$$c(x) = \sum e_i^2 = E^T E \quad \text{et} \quad \hat{x} = \arg \min_x c(x)$$

Soit

$$\begin{aligned} E^T E &= (Ax - b)^T (Ax - b) \\ &= (x^T A^T - b^T)(Ax - b) \\ c(x) &= x^T A^T Ax - b^T Ax - x^T A^T b + b^T b \end{aligned}$$

Et $b^T Ax$ est un scalaire donc $b^T Ax = (b^T Ax)^T = x^T A^T b$, donc finalement :

$$\boxed{c(x) = x^T A^T Ax - 2x^T A^T b + b^T b}$$

On obtient une forme quadratique convexe car $A^T A$ est semi-définie positive (ses valeurs sont positives ou nulles). Maintenant si on calcule le gradient par rapport à x :

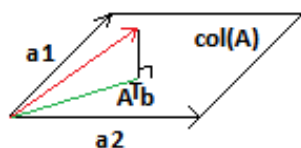
$$\frac{dc(x)}{dx} = \begin{pmatrix} \frac{\partial c(x)}{\partial x_1} \\ \frac{\partial c(x)}{\partial x_2} \\ \dots \\ \frac{\partial c(x)}{\partial x_n} \end{pmatrix} = 2A^T Ax - 2A^T b$$

La solution minimale s'obtient donc par : $\frac{dc(x)}{dx} = 0$ Ce qui donne :

$$A^T A \hat{x} - A^T b = 0 \quad \Rightarrow \quad \boxed{\hat{x} = (A^T A)^{-1} A^T b}$$

Cela revient à projeter orthogonalement b dans l'espace des colonnes de A (noté $\text{col}(A)$). c'est à dire $\bar{b} = A^T b$, et de chercher à résoudre pour ce vecteur on retrouve la même solution avec cette considération géométrique :

$$A^T A \hat{x} = A^T b \quad \Rightarrow \quad \boxed{\hat{x} = (A^T A)^{-1} A^T b}$$



$$A = \left(a_1 \mid a_2 \mid \dots \right) \quad Ax = \sum_i a_i x_i \in \text{col}(A)$$

Si le rang de A est égal à son nombre de colonnes (c'est à dire que $A^T A$ est inversible) alors A^+ est appelée la pseudo-inverse de A :

$$\boxed{A^+ = (A^T A)^{-1} A^T} \quad \text{et} \quad \boxed{\hat{x} = A^+ b}$$

3.2 Décomposition en valeurs singulières SVD

La décomposition en valeur singulière consiste à décomposer une matrice de la manière suivante :

$$A = U \Sigma V^*$$

Avec U et V , des **matrices unitaires** c'est à dire que $UU^* = U^*U = I$. Si A est une matrice réelle alors les matrices U et V sont des matrices à coefficients réels $U^* = U^T$ et $V^* = V^T$ et **sont orthogonales**. Σ est une matrice diagonale. $\Sigma_{(i,i)} = \sigma_i$ sont les **valeurs singulières** de A . Les valeurs singulières sont généralement rangées tel que $\sigma_1 > \sigma_2 > \sigma_3 \dots$. Cette décomposition permet de calculer une pseudo inverse dite de Moore-Penrose, notée généralement A^+ , de la matrice A .

$$A^+ = V \Sigma^+ U^* \quad \text{avec} \quad \Sigma_{(i,i)}^+ = \frac{1}{\sigma_i} \text{ si } \sigma_i \neq 0 \text{ sinon } 0$$

Comprenons bien que Σ est une matrice carrée si et seulement si A est une matrice carrée. Ce qui n'est généralement pas le cas. Par exemple si A est une matrice (5×3) on a :

$$A_{(5 \times 3)} = U_{(5 \times 5)} \Sigma_{(5 \times 3)} V_{(3 \times 3)}^*$$

$$U = \left(\begin{array}{c|c|c|c|c} u_1 & u_2 & u_3 & u_4 & u_5 \end{array} \right) \quad \Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad V = \begin{pmatrix} v_1^* \\ v_2^* \\ v_3^* \end{pmatrix}$$

Cette décomposition est **complète**. Mais en fait, on comprend que on peut réduire Σ à une matrice $(n \times n)$, dans cet exemple $n = 3$ est le nombre de valeurs singulières.

$$A_{(5 \times 3)} = U_{(5 \times 3)} \Sigma_{(3 \times 3)} V_{(3 \times 3)}^*$$

$$U = \left(\begin{array}{c|c|c} u_1 & u_2 & u_3 \end{array} \right) \quad \Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} \quad V = \begin{pmatrix} v_1^* \\ v_2^* \\ v_3^* \end{pmatrix}$$

Cette décomposition est dite **fine**. Mais on peut encore réduire la représentation de Σ à une matrice $(r \times r)$ ou r est le rang de la matrice A . Dans notre exemple si σ_3 est nulle on aurait :

$$A_{(5 \times 3)} = U_{(5 \times 2)} \Sigma_{(2 \times 2)} V_{(2 \times 3)}^*$$

$$U = \left(\begin{array}{c|c} u_1 & u_2 \end{array} \right) \quad \Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & \sigma_2 \end{pmatrix} \quad V = \begin{pmatrix} v_1^* \\ v_2^* \end{pmatrix}$$

Cette décomposition est dite **compacte**. Notons u_i la i ème colonne de U et v_i^* la i ème ligne de V alors la SVD correspond à décomposer A en une somme de matrices de rang 1, en effet :

$$A = \sum_{i=0}^r \sigma_i u_i v_i^* \quad \text{et} \quad A^+ = \sum_{i=0}^r \frac{1}{\sigma_i} v_i u_i^*$$

Avec r le rang de la matrice A . Notons également que $A_r = \sigma_r u_r v_r^*$ est la **meilleure** approximation de rang r de la matrice A .

Et avec l'orthogonalité des colonnes de U et V : $u_j^* u_i = v_j^* v_i = \delta_{ij}$ donc finalement on a :

$$AA^+ = \sum_{j=0}^r \sum_{i=0}^r \sigma_j u_j v_j^* \frac{1}{\sigma_i} v_i u_i^* = \sum_{j=0}^r \sum_{i=0}^r \frac{\sigma_j}{\sigma_i} u_j v_j^* v_i u_i^* = I$$

Maintenant si $\sigma_2 = 0$ on aura

$$AA^+ = \sum_{j=0}^r \sum_{\sigma_i \neq 0} \sigma_j u_j v_j^* \frac{1}{\sigma_i} v_i u_i^* = \sum_{j=0}^r \sum_{\sigma_i \neq 0} \frac{\sigma_j}{\sigma_i} u_j v_j^* v_i u_i^* = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

Pour calculer les pseudo-inverse, cette méthode fonctionne même si le rang de A n'est pas égal à son nombre de colonnes.