

Département Sciences du Numérique

Calcul différentiel - Optimisation sans contraintes - Premiers algorithmes

O. Cots, J. Gergaud, S. Gratton, D. Ruiz et E. Simon

11 septembre 2020

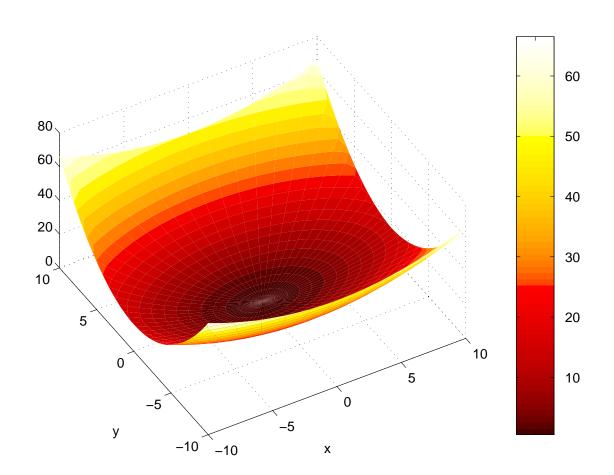


Table des matières

Chapit	tre 1. Exemples et définitions	3
1.1	Exemples	3
	1.1.1 Cas continu et de dimension finie	3
	1.1.2 Problèmes en nombres entiers	11
	1.1.3 Problème en dimension infinie	13
1.2	Problème d'optimisation	15
	1.2.1 Définitions	15
	1.2.2 Classification	19
1.3	Exercices	20
Chapit	tre 2. Formes bilinéaires et quadratiques	22
2.1	Forme bilinéaire – Matrice d'une forme bilinéaire	22
	2.1.1 Formes bilinéaires	22
	2.1.2 Représentation matricielle d'une forme bilinéaire	22
	2.1.3 Exemple dans \mathbb{R}^3	23
2.2	Formes quadratiques	23
	2.2.1 Propriétés	24
2.3	Formes quadratiques définies positives	25
	2.3.1 Produit scalaire	25
	2.3.2 Exemples	25
2.4	Diagonalisation des endomorphismes symétriques	26
	2.4.1 Introduction	26
	2.4.2 Généralisation	27
2.5	Diagonalisation d'une forme quadratique	27
2.6	Compléments	29
Chapit	tre 3. Différentiabilité – Convexité	33
3.1	Dérivées de fonctions à plusieurs variables	33
	3.1.1 Dérivée première	33
	3.1.2 Dérivée seconde	34
	3.1.3 Formule des accroissements finis - Formules de Taylor	35
	3.1.4 Dimension finie et dérivées partielles	36
3.2	Convexité des fonctionnelles	39
	3.2.1 Ensembles convexes - fonctionnelles convexes	39
	3.2.2 Convexité et dérivée première	40
	3.2.3 Convexité et dérivée seconde	41
Chapit	tre 4. Existence de solution, unicité de solution	43
4.1	Introduction	43
4.2	Existence de solution	43
	4.2.1 Problèmes avec contraintes	43
	4.2.2 Problème sans contraintes	44
4.3	Cas convexe	45

Chapit	re 5. Condition nécessaire, condition suffisante de solution	
Cas	sans contraintes et cas de contraintes convexes	47
5.1	Condition du premier ordre	47
	5.1.1 Cas sans contraintes	47
	5.1.2 Cas de contraintes convexes	47
	5.1.3 Problèmes convexes	48
5.2	Conditions du deuxième ordre	48
	5.2.1 Condition nécessaire	48
	5.2.2 Condition suffisante	49
5.3	Exercices	50
Chapit	re 6. Problèmes aux moindres carrés	51
6.1	Introduction	51
6.2	Les moindres carrés linéaires	51
	6.2.1 Rappels	51
	6.2.2 Application : approximation d'une fonction au sens des moindres carrés	52
6.3	La méthode de Newton	53
	6.3.1 Introduction	53
	6.3.2 Algorithme de Newton pour résoudre $f(x) = 0$	54
	6.3.3 Résolution d'équations : cas de la dimension n	55
	6.3.4 Convergence	56
	6.3.5 Application aux problèmes d'optimisation	57
6.4	Résolution des problèmes aux moindres carrés non linéaires	57
	6.4.1 Algorithme de Newton	57
	6.4.2 Algorithme de Gauß-Newton	58
	6.4.3 Exemples	58
Bibliog	graphie	61

Introduction

Position du problème

Optimiser, c'est rechercher parmi un ensemble C de choix possibles le meilleur (s'il existe!). Si f est une application d'un ensemble E dans F. On note le problème

$$(P) \left\{ \begin{array}{l} \min f(x) \\ x \in C \subset E. \end{array} \right.$$

Il faut donc pour cela pouvoir comparer 2 choix et donc avoir une structure d'ordre sur l'ensemble F. On prendra toujours $F = \mathbb{R}$. Suivant les domaines d'applications :

- E s'appelle l'ensemble des stratégies, des états, des paramètres, l'espace ;
- C est l'ensemble des contraintes;
- f est la fonction coût, économique ou le critère, l'objectif.

Une fois le problème bien défini, il se pose deux questions. La première est de savoir si (P) admet une solution. Si la réponse est positive, il nous faut trouver la ou les solutions. Suivant la nature de l'ensemble E les réponses sont plus ou moins faciles. Si E est fini, l'existence de solution est évidente, mais le calcul est difficile si le nombre d'éléments est grand. Par contre si $E = \mathbb{R}^n$ ou est de dimension infinie la question de l'existence de solution est moins triviale, mais si les fonctions sont dérivables il est "plus" facile de calculer la solution.

Exemples et définitions

1.1 Exemples

1.1.1 Cas continu et de dimension finie



FIGURE 1.1 – Pierre de Fermat, né vers 1601, à Beaumont-de-Lomagne, près de Montauban, et mort le 12 janvier 1665 à Castres.

Exemple 1.1.1 (Principe de Fermat). Pierre de Fermat est un juriste et mathématicien français, surnommé « le prince des amateurs ». On lui doit entre autre le principe de Fermat qui dit que la lumière se propage d'un point à un autre sur des trajectoires telles que la durée du parcours soit minimale. Il imagina aussi pour la solution des problèmes, une méthode, dite de maximis et minimis, qui le fait regarder comme le premier inventeur du calcul différentiel dont il est un précurseur : il est le premier à utiliser la formule (sinon le concept) du nombre dérivé!

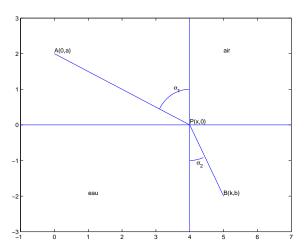


FIGURE 1.2 – Principe de Fermat.

On s'intéresse ici à la trajectoire d'un rayon lumineux d'un point A(0,a) vers un point B(k,b) situés dans deux milieux homogènes différents (cf. la figure 1.2). Nous allons grâce au principe de Fermat retrouver la loi de la réfraction. On suppose pour cela que la trajectoire d'un rayon lumineux dans un

^{1.} http://fr.wikipedia.org/wiki/Pierre_de_Fermat.

milieu homogène est un segment de droite (ce qui peut aussi se démontrer grâce au principe de Fermat via le calcul des variations, cf. l'exemple 1.1.12, qui est un problème d'optimisation en dimension infinie!).

On note P, de coordonnées (x,0), le point d'impact du rayon lumineux sur la surface du changement de milieu et c_1 et c_2 les vitesses de la lumière dans l'air et dans l'eau. Le temps de parcours entre les points A et B est donc

$$T(x) = \frac{1}{c_1}\sqrt{a^2 + x^2} + \frac{1}{c_2}\sqrt{b^2 + (k - x)^2}.$$

Le problème est alors ici de trouver le point P (c'est-à-dire $x^* \in \mathbb{R}$) tel que

$$T(x^*) \le T(x) \, \forall x \in \mathbb{R} \iff (P) \left\{ \begin{array}{l} \min \ T(x) \\ x \in \mathbb{R}. \end{array} \right.$$

On peut ici tracer cette fonction (cf. la figure 1.3).

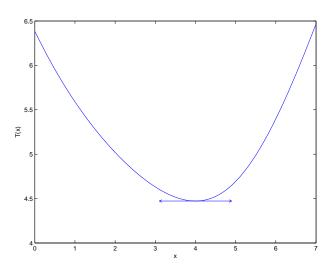


FIGURE 1.3 – Fonction T.

Une condition nécessaire de solution de (P) est T'(x) = 0 (cf. la figure 1.3). Ce qui donne ici

$$T'(x) = \frac{x}{c_1\sqrt{a^2 + x^2}} + \frac{-(k - x)}{c_2\sqrt{b^2 + (k - x)^2}} = 0$$

$$\iff \frac{x}{c_1\sqrt{a^2 + x^2}} = \frac{(k - x)}{c_2\sqrt{b^2 + (k - x)^2}}$$

$$\iff \frac{\sin \alpha_1}{c_1} = \frac{\sin \alpha_2}{c_2}$$

$$\iff n_1 \sin \alpha_1 = n_2 \sin \alpha_2.$$

Remarque 1.1.1. Nous retrouvons dans ce cas les lois de Descartes ² ou de Snell.

Remarque 1.1.2. La condition T'(x) = 0 n'est qu'une condition nécessaire, en effet si nous considérons la fonctionnelle réelle $f(x) = x^3$ nous avons f'(0) = 0 mais 0 n'est pas un minimum de f (cf. l'exemple Figure 1.4).

Exemple 1.1.2 (Datation par le carbone 14). Le carbone radioactif ^{14}C est produit dans l'atmosphère par l'effet des rayons cosmiques sur l'azote atmosphérique. Il est oxydé en $^{14}CO_2$ et absorbé sous cette

^{2.} Associer les noms de Fermat et Descartes est surprenant pour qui connaît les confrontations scientifiques virulentes qui les opposèrent. Les étudiants intéressés peuvent voir la vidéo ([4]) où se rendre au musée Pierre de Fermat de Beaumont de Lomagne, ville natale de P. de Fermat près de Toulouse.

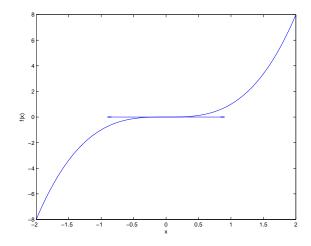


FIGURE 1.4 - f'(0) = 0 et 0 n'est pas un minimum.

forme par les organismes vivants qui, par suite, contiennent un certain pour centage de carbone radioactif relativement aux carbones ^{12}C et ^{13}C qui sont stables. On suppose que la production de carbone ^{14}C atmosphérique est demeurée constante durant les derniers millénaires. On suppose d'autre part que, lors qu'un organisme meurt, ses échanges avec l'atmosphère cessent et que la radioactivité due au carbone ^{14}C décroit suivant la loi exponentielle suivante :

$$A_{(A_0,\lambda)}(t) = A_0 e^{-\lambda t}$$

où λ est une constante positive, t représente le temps en année et A(t) est la radioactivité exprimée en nombre de désintégrations par minute et par gramme de carbone. On désire estimer les paramètres A_0 et λ par la méthode des moindres carrés. Pour cela on analyse les troncs (le bois est un tissu mort) de très vieux arbres Sequoia gigantea et Pinus aristaca. Par un prélèvement effectué sur le tronc, on peut obtenir (cf. table 1.1):

- \bullet son âge t en année, en comptant le nombre des anneaux de croissance,
- sa radioactivité A en mesurant le nombre de désintégration.

t_i	500	1000	2000	3000	4000	5000	6300
A_i	14.5	13.5	12.0	10.8	9.9	8.9	8.0

Table 1.1 – Données.

Notre but est ici de trouver les valeurs des paramètres A_0 et λ pour que la fonction $A_{(A_0,\lambda)}(t)$ "colle" au mieux aux données.

Ici les instants t_i et les valeurs A_i , pour $i=1,\ldots,7$ sont connus. Ce sont les valeurs des paramètres A_0 et λ que l'on cherche. Le statut de A_0 et des A_1,\ldots,A_7 , n'est donc pas le même.

Si on donne des valeurs aux paramètres, nous pouvons calculer les quantités appelées résidus (cf. . la Fig. 1.5 pour les valeur des parémètres $A_0=20$ et $\lambda=0.0002$)

$$r_i(A_0, \lambda) = A_i - A_{(A_0, \lambda)}(t_i) = A_i - A_0 e^{-\lambda t_i}.$$

Par suite nous pouvons calculer la quantité

$$f(A_0, \lambda) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} (A_i - A_0 e^{-\lambda t_i})^2.$$

Cette quantité est la somme des carrés des longueurs des résidus.

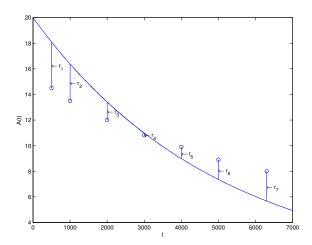


FIGURE $1.5 - Résidus \ r(20, 0.0002)$ pour le problème de datation par le carbone 14.

Plus cette quantité sera faible, plus notre courbe sera proche de nos points expérimentaux. Estimer les paramètres A_0 et λ par les moindres carrés, c'est rechercher la valeur solution du problème d'optimisation suivant :

$$(P) \begin{cases} \min f(A_0, \lambda) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} (A_i - A_0 e^{-\lambda t_i})^2 \\ (A_0, \lambda) \in \mathbb{R}^2. \end{cases}$$

Remarque 1.1.3. • Dans l'exemple précédent on peut aussi écrire : $f(\beta) = \frac{1}{2} || r(\beta) ||^2$ où

$$r : \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}^7$$

$$\beta = (A_0, \lambda) \longmapsto \begin{pmatrix} r_1(\beta) \\ \vdots \\ r_7(\beta) \end{pmatrix}$$

avec

$$r_i(\beta) = A_i - A_0 e^{-\lambda t_i}$$

et où $||\cdot||$ est la norme euclidienne.

- Minimiser $f(\beta)$ est équivalent à minimiser $\alpha f(\beta)$ avec $\alpha > 0$. Le terme $\frac{1}{2}$ est mis ici afin de ne pas avoir le terme 2 lorsque l'on dérive la fonction $f(\beta)$.
- On peut aussi prendre comme critère :

$$- f(\beta) = ||r(\beta)||_1 = \sum_{i=1}^n |r_i(\beta)|;$$

$$- f(\beta) = ||r(\beta)||_{\infty} = \max_{i=1,\dots,n} |r_i(\beta)|.$$

Remarque 1.1.4. Cet exemple est un exemple important d'un problème d'estimations de paramètres dans un modèle par les moindres carrés. Nous en verrons beaucoup d'ordre dans ce cours.

Définition 1.1.1

n appelle problème aux moindres carrés tout problème qui s'écrit

$$(P) \begin{cases} \min f(\beta) = \frac{1}{2} ||r(\beta)||^2 \\ \beta \in \mathbb{R}^p. \end{cases}$$

où r est une fonction de \mathbb{R}^p à valeurs dans \mathbb{R}^n .

le problème au moindres carrés est dit linéaire si r est une fonction affine : $r(\beta) = y - X\beta$.

🔼 Exercice 1.1.3. Régression linéaire simple

Soit n points expérimentaux $M_i = (x_i, y_i)$ pour i = 1, ..., n. On considère le modèle suivant : $y(x, \beta) = \beta_0 + \beta_1 x$.

1. On veut estimer les paramètres par les moindres carrés. Écrire le problème sous la forme :

$$\left\{\begin{array}{l} Min \quad f(\beta) = \frac{1}{2} \|r(\beta)\|^2 = \frac{1}{2} \parallel y - X\beta \parallel^2 \\ \beta \in \mathbb{R}^p \end{array}\right.$$

On donnera les valeurs de X et de y et à quoi correspond β .

2. On souhaite maintenant trouver la meilleure droite au sens des moindres carrés qui passe par l'origine. Écrire le problème d'optimisation.

Exercice 1.1.4 (Courbe étalon). La première étape d'un dosage radioimmunologique consiste à établir une courbe étalon. Un dosage repose sur l'hypothèse qu'une hormone et son isotope marqué se comportent de façon équivalente vis-à-vis de leur anticorps spécifique : lorsque l'on met en présence une quantité déterminée d'anticorps, une quantité déterminée d'hormone radioactive et une quantité variable d'hormone froide, la dose de complexe anticorps-hormone marquée en fin de réaction est d'autant plus faible que la quantité d'hormone froide est importante. Néanmoins, la relation qui existe entre la dose d'hormone froide mise en réaction et la radioactivité de complexe extrait n'est pas stable et doit être appréciée dans chaque situation expérimentale. C'est l'objet de l'établissement de la courne étalon, à partir d'une gamme de dilutions connues d'une quantité déterminée de l'hormone à doser. La table 1.2 donne les données recueillies pour une telle courbe dans le cas d'un dosage du cortisol : on a mesuré la radioactivité du complexe (en coups par minutes ou cpm). On considère le modèle suivant :

$$y(x,\beta) = \beta_2 + \frac{\beta_1 - \beta_2}{(1 + \exp(\beta_3 + \beta_4 x))^{\beta_5}}.$$
(1.1)

Dose en ng/.1 ml	Réponse en c.p.m.				
0	2868	2785	2849	2805	
0	2779	2588	2701	2752	
0.02	2615	2651	2506	2498	
0.04	2474	2573	2378	2494	
0.06	2152	2307	2101	2216	
0.08	2114	2052	2016	2030	
0.1	1862	1935	1800	1871	
0.2	1364	1412	1377	1304	
0.4	910	919	855	875	
0.6	702	701	689	696	
0.8	586	596	561	562	
1	501	495	478	493	
1.5	392	358	399	394	
2	330	351	343	333	
4	250	261	244	242	
100	131	135	134	133	

Table 1.2 – Données pour un dosage de Cortisol

On désire estimer les paramètres par les moindres carrés (attention, il y a pour chaque dose 4 observations de y). On notera $(x_i)_{i=1,\dots,16}$ (respectivement $(y_{i,j})_{i=1,\dots,16;j=1\dots,4}$) les éléments de la première colonne (respectivement des 4 dernières colonnes) de la table 1.2 et $r_{i,j}(\beta)$ le résidu liés au point $(x_i, y_{i,j})$.

- 1. Écrire le résidu lié au point (0.04,2378).
- 2. (i) Quelle est la dimension du vecteur des paramètres β .
- (ii) Quel est le nombre de points n?
- 3. Écrire le problème d'optimisation des paramètres par les moindres carrés.

Exemple 1.1.5 (Modèle de Kaplan). On désire étudier la diffusion d'une drogue dans un organe d'un corps donné. La drogue est injectée par intraveineuse dans le sang à l'instant $t_0 = 0$. On modélise le système par un modèle à compartiments (cf. la figure 1.6).

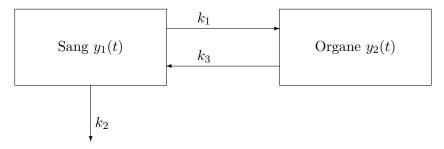


Figure 1.6 – Modèle par compartiments.

Les concentrations dans le sang, mesurées à différents instants, sont données à la table 1.3.

t_i	y_{i1}	t_i	y_{i1}
0.25	215.6	3.00	101.2
0.50	189.2	4.00	88.0
0.75	176.0	6.00	61.6
1.00	162.8	12.00	22.0
1.50	138.6	24.00	4.4
2.00	121.0	48.00	0.0

Table 1.3 – Données pour l'exemple de Kaplan.

Le système d'équations différentielles décrivant le modèle est alors

$$(EDO) \begin{cases} \frac{dy_1}{dt} = \dot{y}_1(t) = -(k_1 + k_2)y_1(t) + k_3y_2(t) \\ \frac{dy_2}{dt} = \dot{y}_2(t) = k_1y_1(t) - k_3y_2(t) \\ y_1(0) = c_0 \\ y_2(0) = 0. \end{cases}$$

On désire estimer les paramètres c_0, k_1, k_2 et k_3 par les moindres carrés. Posons $\beta = (c_0, k_1, k_2, k_3)$, alors pour toute valeur de β , on peut intégrer le système d'équations différentielles ordinaires à condition initiale (EDO). Notons $(y_1(t\beta), y_2(t\beta))$ cette solution. Par suite on peut calculer les n résidus

$$r_i(\beta) = y_{i1} - y_1(t_i\beta).$$

Ces résidus sont visualisés sur la figure 1.7. Nous estimerons alors le paramètre β en résolvant le problème d'optimisation aux moindres carrés

$$(P) \begin{cases} \min f(\beta) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} r_i^2(\beta) = \frac{1}{2} ||r(\beta)||^2 \\ \beta \in \mathbb{R}^4. \end{cases}$$

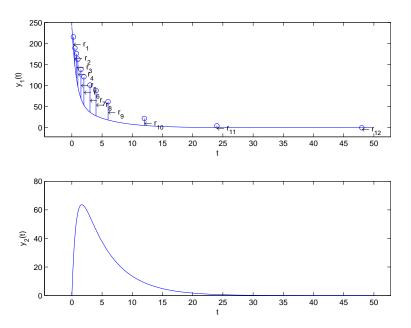


FIGURE 1.7 – Critère des moindres carrés pour le modèle de Kaplan.

Exemple 1.1.6. On veut mesurer la liaison entre 2 gènes dominants, l'un contrôlant la couleur d'une fleur, rouge (R) est dominant sur blanc (b), et l'autre la taille, grand (G) est dominant sur petit (p). Dans la descendance F_2 , issu de deux populations homozygotes de phénotype [RG] et [bp], on a étudié n = 3839 plantes. On a obtenu les résultats de la table 1.4.

Phénotypes	[RG]	[Rp]	[bG]	[bp]
Effectifs observés	1997	906	904	32

Table 1.4 – Données de Sir R.A. Fisher.

Le problème est d'estimer, à partir de ces données le taux de recombinaison r. Ici la population F_1 est hétérozygote de génotype Rb, Gp. Nous avons donc les probabilités de la table 1.5 pour les différents gamètes possibles et les différents croisements possibles.

♀:♂	RG	bp	Rp	bG
	$\frac{1}{2}(1-r)$	$\frac{1}{2}(1-r)$	$\frac{1}{2}r$	$rac{1}{2}r$
RG	[RG]	[RG]	[RG]	[RG]
$\frac{1}{2}(1-r)$	$\frac{1}{4}(1-r)^2$	$\frac{1}{4}(1-r)^2$	$\frac{1}{4}r(1-r)$	$\frac{1}{4}r(1-r)$
bp	[RG]	[bp]	[Rp]	[bG]
$\frac{1}{2}(1-r)$	$\frac{1}{4}(1-r)^2$	$\frac{1}{4}(1-r)^2$	$\frac{1}{4}r(1-r)$	$\left \frac{1}{4}r(1-r) \right $
Rp	[RG]	[Rp]	[Rp]	[RG]
$\frac{1}{2}r$	$\frac{1}{4}r(1-r)$	$\frac{1}{4}r(1-r)$	$\frac{1}{4}r^2$	$\frac{1}{4}r^2$
bG	[RG]	[bG]	[RG]	[bG]
$\frac{1}{2}r$	$\frac{1}{4}r(1-r)$	$\frac{1}{4}r(1-r)$	$\frac{1}{4}r^2$	$\frac{1}{4}r^2$

Table 1.5 – Probabilités pour la descendance F_2 .

Par suite nous avons dans la population F_2 la loi suivante pour la variable aléatoire phénotype X

$$X: F_2 \longrightarrow \{[RG], [Rp], [bG], [bp]\}$$

1 plante \longmapsto son phénotype,

$$P(X = [RG]) = \frac{1}{4}(3 - 2r + r^2) = \frac{2 + \theta}{4}$$

$$P(X = [Rp]) = \frac{1}{4}(2r - r^2) = \frac{1 - \theta}{4}$$

$$P(X = [bG]) = \frac{1}{4}(2r - r^2) = \frac{1 - \theta}{4}$$

$$P(X = [bp]) = \frac{1}{4}(1 - r)^2 = \frac{\theta}{4}$$

où
$$\theta = (1 - r)^2 \in [\frac{1}{4}; 1].$$

Définissons maintenant le vecteur aléatoire de dimension 4

$$(A,B,C,D):F_2^n \longrightarrow \mathbb{R}^4$$
 (nb de plantes de phénotypes $[RG]$, nb de plantes de phénotypes $[Rp]$, nb de plantes de phénotypes $[bG]$, nb de plantes de phénotypes $[bp]$).

On suppose la population F_2 de taille infinie, donc la loi de ce vecteur aléatoire est une loi multinomiale

$$\begin{split} L(a,b,c,d;\theta) &= P((A,B,C,D) = (a,b,c,d)) \\ &= \frac{n!}{a!b!c!d!} P(X = [RG])^a P(X = [Rp])^b P(X)[bG])^c P(X = [bp])^d \\ &= \frac{n!}{a!b!c!d!} \left(\frac{2+\theta}{4}\right)^a \left(\frac{1-\theta}{4}\right)^{b+c} \left(\frac{\theta}{4}\right)^d. \end{split}$$

L s'appelle la vraisemblance ³. L'estimation de θ par le maximum de vraisemblance consiste alors à rechercher la valeur de θ solution du problème de maximisation suivant

$$(P) \left\{ \begin{array}{l} \max \ L(1997, 906, 904, 32; \theta) \\ \theta \in [\frac{1}{4}; 1]. \end{array} \right.$$

Exemple 1.1.7. Un fermier désire déterminer les quantités de lisier de porc et d'engrais composé à étendre sur 20 ha de prairie de façon à optimiser le coût total de la fertilisation. Le coût et la composition du lisier et de l'engrais sont donnés à la table 1.6.

	coût (par tonne)	composition chimique (kgt^{-1})		
		azote	phosphate	potasse
lisier	25 francs	6	1.5	4
engrais	1300 francs	250	100	100

Table 1.6 – Coûts et compositions des engrais.

Le fermier veut appliquer au moins 75 $kgha^{-1}$ d'azote, 25 $kgha^{-1}$ de phosphate et 35 $kgha^{-1}$ de potasse. Il ne peut appliquer le lisier qu'à un taux maximum de 8 t/heure et l'engrais qu'à un taux maximum de 0.4 t/heure. Il ne peut de plus consacrer pour ce travail qu'un maximum de 25 heures.

Appelons x_1 (respectivement x_2) la quantité en tonnes de lisier (respectivement d'engrais) étendu. Le problème est alors d'obtenir un coût minimum, c'est-à-dire que l'on cherche à minimiser $25x_1 + 1300x_2$. Mais nous avons aussi les contraintes suivantes :

$x_1 \ge 0$	non négativité de x_1
$x_2 \ge 0$	non négativité de x_2
$6x_1 + 250x_2 \ge 75 \times 20 = 1500$	contrainte sur l'azote
$1.5x_1 + 100x_2 \ge 500$	contrainte sur le phosphate
$4x_1 + 100x_2 \ge 700$	contrainte sur la potasse
$(1/8)x_1 + (1/0.4)x_2 \le 25$	contrainte de temps.

^{3.} likelihood en anglais.

En résumé nous avons le problème suivant à résoudre :

$$(P) \begin{cases} \min f(x) = 25x_1 + 1300x_2 \\ x_1 \ge 0 \\ x_2 \ge 0 \\ 6x_1 + 250x_2 \ge 75 \times 20 = 1500 \\ 1.5x_1 + 100x_2 \ge 500 \\ 4x_1 + 100x_2 \ge 700 \\ (1/8)x_1 + (1/0.4)x_2 \le 25. \end{cases}$$

Exemple 1.1.8 (Gestion de portefeuille [2]). La théorie de la sélection optimale de portefeuille a été développée par Harry Markowitz, prix Nobel d'économie en 1990, dans les année 1950. On considère un investisseur qui a une quantité fixé d'argent à sa disposition pour investir dans n actifs différentes (actions, stocks, ...) dont le retour est aléatoire. Pour chaque actif, on suppose connu son espérance mathématique μ_i , sa variance σ_i^2 . On suppose aussi connu pour deux actifs i et j leur coefficient de corrélation linéaire ρ_{ij} . On note x_i la proportion investie dans l'actif i. On peut donc calculer les espérance mathématique et variance résultant d'un portefeuille $x = (x_1, \ldots, x_n)$

$$E(x) = \mu^T x$$
$$Var(x) = x^T Q x,$$

où Q est la matrice des covariances, $q_{ij} = \rho_{ij}\sigma_i\sigma_j$. Le portefeuille sera dit efficace si, pour une variance fixée, il a la plus grande espérance mathématique. C'est à dire s'il est solution du problème d'optimisation

$$(P) \begin{cases} \max E(x) \\ Var(x) = V \\ \sum_{i=1}^{n} x_i = 1 \\ x > 0. \end{cases}$$

On peut aussi s'intéresser au problème $(MV0)^4$ de Markowitz.

$$(MVO) \begin{cases} \min Var(x) \\ E(x) \ge R \\ \sum_{i=1}^{n} x_i = 1 \\ x \ge 0. \end{cases}$$

Ces deux formulations sont en fait équivalentes.

1.1.2 Problèmes en nombres entiers

Exemple 1.1.9 (Problème du sac à dos de Knapsack). Un alpiniste veut mettre dans son sac à dos un maximum de 16 kg de ravitaillement. Il peut choisir un certain nombre d'unités de trois produits différents. Le poids unitaire en kilogrammes et la valeur énergétique unitaire des ces produits sont connus et donnés dans la table (1.7).

Le problème pour l'alpiniste est de savoir ce qu'il doit emporter pour avoir une valeur totale en calories maximale sans dépasser les 16 kg.

Si nous notons x_1, x_2 et x_3 les nombres d'unités à emporter des articles I,II et III, le problème s'écrit

$$(P) \begin{cases} \max & 4x_1 + 10x_2 + 15x_3 \\ 2x_1 + 5x_2 + 7x_3 \le 16 \\ (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{N}^3. \end{cases}$$

4. mean-variance optimization.

Produits	I	II	III
Poids	2	5	7
Valeurs	4	10	15

Table 1.7 – Poids unitaires et valeurs énergétiques unitaires.

Exemple 1.1.10 (cf. [1]). Dans un service hospitalier, les malades i attendent d'être opérés. Le malade i a besoin d'une durée d'opération D_i . D'autre part, compte tenu des disponibilités des chirurgiens, la somme des durées des opérations possibles chaque jours j de la période étudiée est connue et égale à T_j . On veut minimiser la somme des pénalités d'attente pour les différents malades. On note :

- $x_{ij} = 1$ si le malade i est opéré le jour j;
- $x_{ij} = 0$ si le malade i n'est pas opéré le jour j;
- c_{ij} la pénalité du malade i s'il est opéré le jour j. c_{ij} est une fonction croissante de j.

Le problème s'écrit alors :

$$(P) \begin{cases} \min \ f(x) = \sum_{i} \sum_{j} c_{ij} x_{ij} \\ \sum_{i} D_{i} x_{ij} \leq T_{j} \ \forall j \ \text{limitation des possibilités opératoire du jour } j \\ \sum_{i} x_{ij} = 1 \ \forall i \ \text{Le malade } i \text{ est opéré une fois et une seule} \\ x_{ij} = 0 \ \text{ou} \ 1 \ \text{l'opération est effectuée en une fois.} \end{cases}$$

Exemple 1.1.11 (Alignement de séquences). Soit 2 séquences CTGTATC et CTATAATCCC. On désire trouver le "meilleur" alignement possible. À chaque alignement, est associé un score (simple ici) suivant : pour chaque position on associe 0 si les 2 bases sont identiques, +1 si les deux bases sont différentes et +3 s'il y a un "trou". On effectue ensuite la somme. La figure (1.8) donne un exemple de la fonction score S.

FIGURE 1.8 – Exemple de calcul d'un score.

Le problème est alors de résoudre le problème d'optimisation suivant

$$(P) \left\{ \begin{array}{ll} \min & S(alignement) \\ \text{pour tous les alignements possibles}. \end{array} \right.$$

Remarque 1.1.5. la difficulté est ici de construire l'ensemble de tous les alignements possibles. Ceci se fait de la façon suivante. Suppossons que l'on soit à la position i, alors pour aller à la position i+1, nous avons trois possibilités :

- avancer d'un nucléotide pour les 2 séquences;
- avancer d'un nucléotide pour la séquence S_1 et mettre un "trou" pour la séquence S_2 ;
- avancer d'un nucléotide pour la séquence S_2 et mettre un "trou" pour la séquence S_1 .

Nous pouvons ainsi construire un arbre permettant d'avoir tous les alignements possibles.

1.1.3 Problème en dimension infinie

Exemple 1.1.12 (Problème de la brachistochrone). Le problème de la brachistochrone ⁵ fut posé par Jean Bernoulli ⁶ (cf. la figure 1.9) en 1696 et est considéré comme le problème fondateur du calcul des variations.



Figure 1.9 – Jean Bernoulli 27 juillet 1667 – 1er janvier 1748.

Ce problème consiste en la recherche dans un plan vertical du chemin reliant 2 points P_0 et P_f de ce plan, suivant lequel un corps M entrainé par son propre poids effectuera le trajet de P_0 à P_f en un temps minimum. On suppose qu'il n'y a pas de frottement. Introduisons dans le plan un système de coordonnées (x,y) pour lequel P_0 ait comme coordonnées (0,0) et P_f $(x_f,y_f), x_f > 0$ et $y_f < 0$. Supposons que y(.) est la fonction qui donne l'équation de la courbe joignant les points P_0 et P_f . Les lois de la mécanique nous disent que le module de la vitesse v en (x,y(x)) ne dépend pas de la forme de la courbe y(.) sur [0,x], mais seulement de l'ordonnée y(x), et que cette vitesse est égale à $\sqrt{2g(-y(x))}$, où g est l'accélération gravitationnelle. Si on note s l'abscisse curviligne, le temps pour parcourir l'élément $ds = \sqrt{dx^2 + dy^2}$ est alors $ds/\sqrt{2g(-y(x))}$. Posons

$$T: C^1([0, x_f], \mathbb{R}) \longrightarrow \mathbb{R}$$

$$y(.) \longmapsto \int_0^{x_f} \frac{\sqrt{1 + y'(x)^2}}{\sqrt{2g(-y(x))}} dx.$$

Le problème s'écrit alors

$$(P) \begin{cases} \min T(y(.)) \\ y(0) = 0 \\ y(x_f) = y_f. \end{cases}$$

La solution de se problème est visualisée à la figure 1.10.

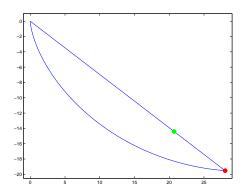


FIGURE 1.10 – Brachistochrone.

⁵. Le mot brachistochrone vient du grec brakhisto qui signifie le plus court et de chronos qui signifie temps.

^{6.} http://fr.wikipedia.org/wiki/Jean_Bernoulli

Exemple 1.1.13 (Transfert orbital). On désire transférer un satellite S d'une orbite initiale (celle où la fusée Ariane l'a "posé") vers l'orbite géostationnaire (cf. la figure 1.11), le moteur du satellite étant un moteur à poussée faible.

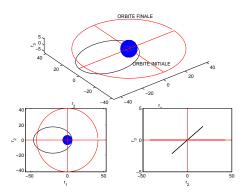


FIGURE 1.11 – Transfert orbital.

Le satellite est considéré comme un point matériel et on note $r(t) \in \mathbb{R}^3$ la position, $v(t) \in \mathbb{R}^3$ la vitesse, m(t) la masse du satellite et $T(t) \in \mathbb{R}^3$ la poussée du moteur. L'équation du mouvement, provenant des équations de Newton est alors

$$\dot{r}(t) = v(t)$$

$$\dot{v}(t) = -\frac{\mu r(t)}{||r(t)||^3} + \frac{T(t)}{m(t)}$$

$$\dot{m}(t) = -\beta ||T(t)||,$$

où μ est la constante gravitationnelle de la Terre et $\beta=1/g_0 Isp$ est une constante positive (g_0 est l'accélération gravitationnelle terrestre à la surface de la Terre et Isp est une constante caractéristique du moteur appelé impulsion spécifique). À l'instant initial les position, vitesse et masse du satellite sont connues et à l'instant terminal t_f le satellite doit être sur l'orbite géostationnaire à une position et vitesse $(r(t_f), v(t_f)) = (r_f, v_f)$ fixés. Bien évidemment la poussée du moteur est bornée

$$||T(t)|| \leq T_{max}$$
.

L'objectif est alors de trouver une loi de commande du moteur qui réalise le transfert et qui minimise le temps de transfert. On peut aussi s'intéresser à la maximisation de la masse finale (dans ce cas le temps de transfert doit-être fixé). Si on normalise le contrôle $u(t) = T(t)/T_{max}$ alors le problème s'écrit pour la maximisation de la masse finale (ou la minimisation de la consommation)

$$(P) \begin{cases} \min & J(u) = \int_0^{t_f} ||u(t)|| dt \\ \dot{r}(t) = v(t) & \text{p.p. dans } [0, t_f], \quad t_f \quad \text{fixé} \\ \dot{v}(t) = -\mu r(t) / ||r(t)||^3 + \frac{T_{max}}{m(t)} u(t) \\ \dot{m}(t) = -\beta T_{max} ||u(t)|| \\ (r(t), v(t), m(t)) \in A \\ ||u(t)|| \le 1 \\ r(0), \ v(0), \ m(0) \quad \text{fixé} \\ r(t_f), \ v(t_f) \quad \text{fixé}, \end{cases}$$

ce problème est un problème de contrôle optimal et l'inconnue est la commande, donc une fonction u, ici de $[0, t_f]$ à valeurs dans \mathbb{R}^3 .

Remarque 1.1.6. Ces problèmes d'optimisation en dimension infinie seront traités dans le cours de contrôle optimal en deuxième année majeure mathématiques appliquées.

1.2 Problème d'optimisation

1.2.1 Définitions

Définition 1.2.1 – Ensemble convexe

Un sous ensemble C d'un espace vectoriel est dit convexe si pour tout $(x,y) \in C^2$ le segment $[x,y] = \{\alpha x + (1-\alpha)y, \alpha \in [0,1]\}$ est inclus dans C.

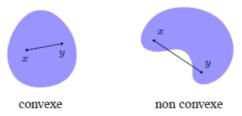


Figure 1.12 – Ensemble convexe et non convexe.

Définition 1.2.2 – Fonction convexe

Une fonction f de $C \subset E$ à valeurs dans \mathbb{R} , E espace vectoriel, est convexe si et seulement si elle vérifie :

(i) C est convexe;

(ii)

$$\forall (x,y) \in C^2, \ \forall \alpha \in [0,1], \ f(\alpha x + (1-\alpha)y) \le \alpha f(x) + (1-\alpha)f(y).$$

Dans la cas n = 1, ceci signifie que le graphe de la fonction f est toujours sous la corde, cf. la figure (1.13).

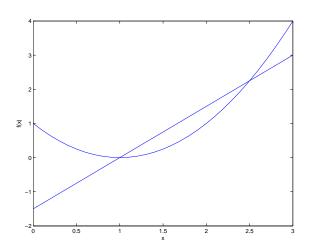


Figure 1.13 – Fonction convexe.

Définition 1.2.3 – Problème d'optimisation sans contraintes

On appelle problème d'optimisation sans contraintes en dimension finie tout problème (P) consistant en la recherche d'un minimum d'une fonctionnelle f définie sur \mathbb{R}^n . On notera ce problème

sous la forme suivante :

$$(P) \left\{ \begin{array}{l} \min f(x) \\ x \in \mathbb{R}^n \end{array} \right.$$

où $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ sera donnée.

Remarque 1.2.1. Résoudre le problème (P) revient à rechercher le point x^* de \mathbb{R}^n tel que $f(x^*) \le f(x) \ \forall x \in \mathbb{R}^n$.

Remarque 1.2.2. Un problème de maximisation se ramène très facilement à un problème de minimisation :

$$\max f(x) \Longleftrightarrow \min(-f(x))$$

Définition 1.2.4 – Problème d'optimisation avec contraintes

On appelle problème d'optimisation avec contraintes tout problème (P) consistant en la recherche d'un minimum sur un ensemble C inclus dans \mathbb{R}^n d'une fonctionnelle f définie sur \mathbb{R}^n . On notera ce problème sous la forme suivante :

$$(P) \left\{ \begin{array}{l} \min f(x) \\ x \in C \subset \mathbb{R}^n \end{array} \right.$$

où $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ sera donnée.

Remarque 1.2.3. Dans la pratique C sera défini de la façon suivante :

$$C = \{x \in \mathbb{R}^n / q_i(x) \le 0 \ i = 1, \dots, m \ et \ h_l(x) = 0 \ l = 1, \dots, p\}$$
(1.2)

et nous écrirons (P) sous la forme

$$(P) \begin{cases} \min f(x) \\ g_i(x) \le 0 \ i = 1, \dots, m \\ h_l(x) = 0 \ l = 1, \dots, p \end{cases}$$

Définition 1.2.5 – Optimisation non différentiable

On appelle problème d'optimisation non différentiable un problème d'optimisation où les fonctions qui interviennent ne sont pas dérivables.

Remarque 1.2.4. On ne traitera dans ce cours que des problèmes d'optimisation différentiables.

Définition 1.2.6 – Problème d'optimisation convexe

Un problème d'optimisation est dit convexe si et seulement si la fonction f est convexe et l'ensemble des contrainte C est convexe.

Remarque 1.2.5. Si C est définie par (1.2) et si les fonctions g_i sont convexes et les fonctions h_l sont affines, alors C est convexe. Attention, la réciproque est fausse.

Définition 1.2.7 – Problème aux moindres carrés

On appelle problème aux moindres carrés un problème d'optimisation sans contraintes où la fonc-

tionnelle f est de la forme suivante :

$$f(\beta) = \frac{1}{2} ||r(\beta)||^2 = \frac{1}{2} (r(\beta)|r(\beta)) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} r_i^2(\beta)$$

Le problème est dit aux moindres carrés linéaires si la fonction r est affine :

$$r: \mathbb{R}^p \longrightarrow \mathbb{R}^n$$
$$\beta \longmapsto y - X\beta$$

où X matrice de type (n, p) et y un élément de \mathbb{R}^n .

Remarque 1.2.6. L'exemple (1.1.2) est un problème aux moindres carrés non linéaire.

Définition 1.2.8 – Problème linéaire

Un problème d'optimisation est dit linéaire si et seulement si les fonctions f, g_i , et h_l sont affines.

Remarque 1.2.7. L'exemple (1.1.7) est un problème linéaire.

Définition 1.2.9 – Optimum global, optimum local

Soit (P) un problème d'optimisation sans contraintes.

- (i) x^* est un minimum global $\iff x^*$ est la solution de (P)
- (ii) x^* est un minimum local faible \iff il existe $\varepsilon > 0$ tel que x^* est la solution de (P') où

$$(P') \left\{ \begin{array}{l} \min & f(x) \\ \|x - x^*\| < \varepsilon \end{array} \right.$$

(iii) x^* est un minimum local fort si

$$\forall \mathbf{x} \in B(\mathbf{x}^*, \varepsilon) = \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n / \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\| < \varepsilon \right\}, \mathbf{x} \neq \mathbf{x}^*, \ f(\mathbf{x}^*) < f(\mathbf{x}).$$

Dans le cas où n = 1, $||x - x^*||$ devient $|x - x^*|$ et par suite nous avons

$$||x - x^*|| < \varepsilon \iff |x - x^*| < \varepsilon \iff x^* - \varepsilon < x < x^* + \varepsilon,$$

(cf. la figure 1.14).

- **Remarque 1.2.8**. On dit que x^* est un minimum alors que c'est $f(x^*)$ qui est un minimum. Il s'agit d'un abus de langage que nous emploierons systématiquement.
- Remarque 1.2.9. On appelle optimisation globale la recherche d'un optimum global. Un algorithme globalement convergent est lui un algorithme qui converge vers un minimum local quel que soit le point de départ.

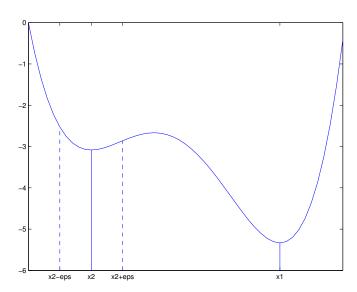


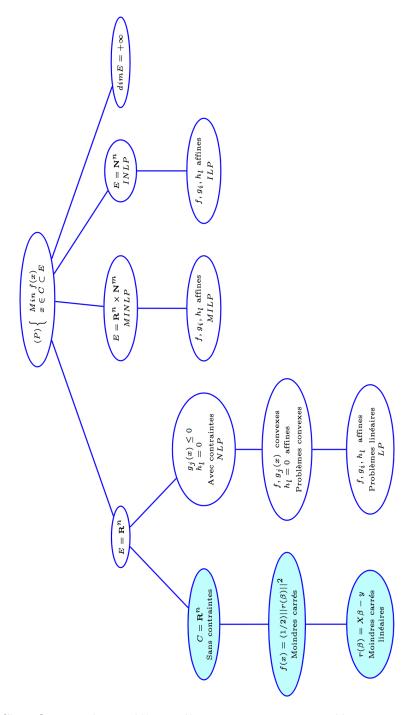
FIGURE 1.14 – x^2 est un minimum local fort, x^1 est un minimum global

1.2.2 Classification

Considérons le problème d'optimisation suivant :

$$(P) \left\{ \begin{array}{l} \min \ f(x) \\ x \in C \subset E \end{array} \right.$$

Suivant la nature des ensembles C et E et de la fonction f nous avons différents types de problème d'optimisation. La figure 1.15 donne une classification des problèmes d'optimisation (nous n'étudierons dans ce cours que les parties en bleu).



 ${\tt Figure}~1.15-{\it Classification~des~problèmes~d'optimisation,~on~a~en~bleu~ce~qui~sera~vu~en~cours.}$

1.3 Exercices

- Exercice 1.3.1 (Géoréférence d'une image satellite). On dispose d'une image satellite que l'on désire recaler par rapport à une carte géographique que l'on a à notre disposition. Pour cela on définit n points, appelés points d'amer, que l'on peut parfaitement faire correspondre sur la carte et sur l'image satellite. On prend par exemple un croisement de route, un point particulier sur une rivière... Concrètement on a donc à notre disposition n coordonnées (x_i, y_i) des n points d'amer sur la carte et n coordonnées (x_i', y_i') de ces mêmes points sur l'image satellite. On choisit d'exprimer ces coordonnées :
 - en pixels pour les (x_i', y_i') (coordonnées (0,0) pour le coin inférieur gauche);
 - en mètres relativement à un référentielle géodésique particulier pour les (x_i, y_i) , via une carte IGN par exemple.

On a par exemple les données suivantes :

Numéros	x_i	y_i	x_i'	y_i'
1	252	2661	458805	1831634
2	235	2603	458157	1830577
:	:	÷	:	:
23	1021	2254	471301	1819574

En pratique l'image satellite est déformée par rapport à la réalité. Cette déformation a plusieurs origines : satellite non verticale par rapport à la prise de vue, présence de nuages dans l'atmosphère, ... En conséquence on suppose que l'on peut écrire :

$$\begin{cases} x = \gamma_0 + \gamma_1 x' + \gamma_2 y' + \gamma_3 x'^2 + \gamma_4 x' y' + \gamma_5 y'^2 \\ y = \delta_0 + \delta_1 x' + \delta_2 y' + \delta_3 x'^2 + \delta_4 x' y' + \delta_5 y'^2 \end{cases}$$

On désire estimer les paramètres par les moindres carrées

- 1. Pour l'estimation des paramètres $\gamma = (\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_5)$ quelles sont les données?
- 2. Écrire le problème d'estimation par les moindres carrés linéaires de γ .
- **3.** Mêmes questions pour δ .

Exercice 1.3.2 (Réseaux de neurones). On s'interesse ici à la modélisation via les réseaux de neurones. Un neurone formel est une fonction paramétrée par n+1 paramètres w_1, \ldots, w_n, θ

$$g: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$$

$$(x, w, \theta) \longmapsto g(x, w, \theta) \coloneqq \sigma(\sum_{i=1}^n w_i x_i + \theta)$$

où σ est une fonction donnée qui s'appelle une fonction d'activation. Chaque paramètre w_i s'appelle le poids synaptique associé au signal d'entrée x_i .

On prendra dans la suite, sauf mention contraire, comme fonction σ la fonction sigmoïde (cf. la figure 1.16)

$$\sigma: \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$$

$$x \longmapsto \frac{1}{1 + e^x}.$$

On a à notre disposition K points $x^k \in \mathbb{R}^n$ et $y^k \in \mathbb{R}$, on appelle apprentissage du neurone l'estimation par les moindres carrés des paramètres du neurone.

1. Écrire le problème au moindres carrés qui défini l'apprentissage. On donnera en particulier la fonction résidus r en précisant clairement l'espace de départ et l'espace d'arrivée.

1.3. Exercices 21

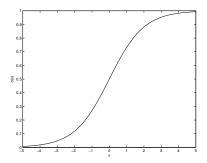


FIGURE 1.16 – Fonction sigmoide.

- $\mathbf{2}$. Ce problème est-il un problème aux moindres carrés linéaires? Si oui, on donnera la matrice X.
- 3. Si on prend comme fonction d'activation σ l'identité le problème au moindres carrés devient-il linéaire? Si oui, on donnera la matrice X.
- **4.** On considère maintenant le modèle d'une couche de m neurones, c'est-à-dire un ensemble de m neurones g_i ayant la même fonction d'activation σ . Une couche est donc une fonction de \mathbb{R}^n à valeurs dans \mathbb{R}^m dépendant de paramètres w_{ij}, θ_i pour $i = 1, \ldots, n$ et $j = 1, \ldots, m$.

dans \mathbb{R}^m dépendant de paramètres w_{ij}, θ_j pour $i = 1, \ldots, n$ et $j = 1, \ldots, m$. On a à notre disposition K points $x^k \in \mathbb{R}^n$ et $y^k \in \mathbb{R}^m$, on appelle apprentissage l'estimation par les moindres carrés des paramètres du réseau de neurones formé d'une couche de m neurones.

Écrire le problème au moindres carrés qui défini l'apprentissage. On donnera en particulier la fonction résidus r en précisant clairement l'espace de départ et l'espace d'arrivée.

Bibliographie

- [1] Carpentier. Cours de 3ième année enseeiht, filière informatique et mathématiques appliquées. INPT-ENSEEIHT, 1983. ← 12.
- [2] Gerard Cornuejols and Reha Tütüncü. Optimization Methods in Finance. Cambridge University Press, 2007. ← 11.
- [3] J.E. Dennis and Jr. Robert B. Schnabel. Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations. SIAM, 1996. \leftrightarrow 56.
- [4] J.M. Devos. Fermat "le premier homme du monde". France 3, IREM de Toulouse, CRDP Midi-Pyrénées, 1995. Casette vidéo. $\hookleftarrow 4$.
- [5] Jean-Baptiste Hiriart-Urruty. L'Optimisation. Que sais-je. Presses Universitaires de France, 1996. ISBN : 2 13 047981 2. \hookleftarrow 50.