

Université de Lorraine

Contacts :

marina.decker1@etu.univ-lorraine.fr

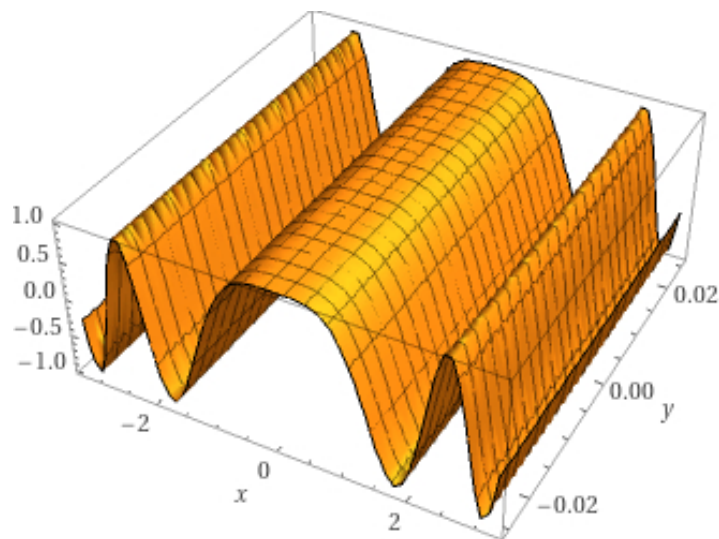
# Algorithmes à région de confiance pour l'optimisation non linéaire. Principe, implémentation et exemples applicatifs.

TER

DECKER Marina

**-UFR MIM-**

23 juin 2024



## Introduction

Pour augmenter les profits, limiter les coûts ou gérer la production, l'optimisation intervient pour modéliser des problèmes réels sous forme de fonctions mathématiques et trouver des solutions appropriées. L'objectif principal est de trouver les valeurs des variables qui rendent un système ou un processus aussi efficace que possible en répondant à des objectifs et des contraintes. Que ce soit pour minimiser les coûts de production d'une usine ou maximiser le rendement d'une production, l'optimisation est au cœur de nombreuses décisions critiques. Elle permet d'améliorer l'efficacité dans divers secteurs, allant de l'ingénierie et de l'économie à la gestion des ressources naturelles.

Les techniques traditionnelles d'optimisation, telles que la programmation linéaire, les méthodes utilisant le gradient d'une fonction ou encore la méthode de Newton, offrent des approches diversifiées pour résoudre des problèmes. Chaque méthode présente ses propres forces et limites, répondant à des besoins spécifiques selon la nature des problèmes. La programmation linéaire excelle dans la résolution de problèmes où les relations entre les variables sont linéaires, offrant des solutions efficaces et rapides grâce à des algorithmes comme le simplexe. Cependant, elle est limitée aux situations où les relations restent linéaires. D'autres méthodes peuvent devenir coûteuses pour des problèmes complexes ou peuvent ne pas converger sans condition particulière.

Pour surmonter ces limitations, une approche prometteuse consiste à décomposer un problème d'optimisation complexe en une série de sous-problèmes plus simples à résoudre. Cela constitue le fondement des méthodes utilisant la notion de région de confiance. L'objectif est de trouver un modèle qui soit une approximation satisfaisante de la fonction  $f$  à minimiser dans une région spécifique appelée région de confiance. Cette région est définie comme l'espace où l'on a confiance en la qualité de l'approximation de  $f$ .

L'idée centrale de la méthode repose sur l'ajustement dynamique de la taille de la région. Si les prédictions fournies par le modèle local sont fiables et conduisent à une amélioration significative de la solution, la région de confiance peut être élargie, dans le cas contraire celle-ci est rétrécie. Ce mécanisme adaptatif permet à la méthode de gérer efficacement les non-linéarités et les complexités du paysage de la fonction, garantissant ainsi une convergence plus robuste vers la solution optimale. La méthode fonctionne ainsi par itérations successives jusqu'à l'extrema recherché.

Face aux défis complexes rencontrés dans divers domaines, il est primordial d'y répondre de la manière la plus efficace possible. Dans cette optique, ce mémoire débutera par une présentation générale des principes sous-jacents des méthodes à région de confiance. Il se poursuivra ensuite par une analyse centrée sur la recherche du minimum, mettant en lumière les différentes approches. Enfin, ce mémoire illustrera l'application concrète de ces techniques à travers des exemples pratiques, offrant ainsi une perspective complète sur leur utilisation et leur efficacité.

# Table des matières

|   |           |
|---|-----------|
| <b>Introduction</b>   | <b>1</b>  |
| <b>I. Principe de la méthode par région de confiance</b>                                      | <b>3</b>  |
| 1. Optimisation par région de confiance : Approche théorique . . . . .                        | 3         |
| a. Méthodes standards . . . . .   | 3         |
| b. Limites des méthodes traditionnelles . . . . .   | 4         |
| 2. Procédé de la méthode avec une approche de la fonction par un modèle quadratique . . . . . | 6         |
| a. Approche générale . . . . .  | 6         |
| b. Approche concrète . . . . .  | 8         |
| 3. Le pas de Cauchy et convergence globale du principe . . . . .                              | 10        |
| <b>II. Mise en lumière des méthodes de recherche du minimum</b>                               | <b>15</b> |
| 1. La méthode "Dogleg" . . . . .  | 15        |
| 2. La méthode de minimisation dans un sous-espace à deux dimensions . . . . .                 | 19        |
| a. Choix des directions . . . . .   | 19        |
| b. Déroulé de l'algorithme : minimisation dans un sous-espace de dimension 2 . . . . .        | 21        |
| 3. Méthode de Steihaug . . . . .  | 21        |
| a. Le gradient conjugué ; cas linéaire . . . . .  | 22        |
| b. Révision de l'algorithme du Gradient conjugué pour la Méthode de Steihaug . . . . .        | 23        |
| <b>III. Applications de la méthode Dogleg</b>   | <b>27</b> |
| 1. Implémentation des Algorithmes et Applications Pratiques . . . . .                         | 27        |
| a. Exemple 1 . . . . .  | 28        |
| b. Exemple 2 . . . . .  | 30        |
| c. Exemple 3 : . . . . .  | 31        |
| 2. Application à un cas concret . . . . .   | 32        |
| 3. Limites de la méthode . . . . .  | 34        |
| <b>Conclusion</b>   | <b>36</b> |
| <b>Bibliographie</b>  | <b>37</b> |

# I. Principe de la méthode par région de confiance

## 1. Optimisation par région de confiance : Approche théorique

Les méthodes d'optimisation traditionnelles sont des techniques largement utilisées pour trouver le minimum d'une fonction. Parmi ces méthodes, on trouve principalement la descente de gradient, la méthode de Newton et leurs variantes.

Ces méthodes sont populaires car elles sont relativement simples à implémenter et peuvent être efficaces pour une large gamme de problèmes. Cependant, ces méthodes standards présentent plusieurs limitations. La dépendance au choix du pas de descente peut entraîner une convergence lente ou une divergence et les techniques utilisées peuvent être coûteuse en termes de calculs.

Les méthodes par région de confiance sont une approche alternative permettant de dépasser certains des problèmes rencontrés par les méthodes traditionnelles. Elles sont moins sensibles aux mauvaises conditions initiales et aux directions de descente imprécises, ce qui les rend plus robustes dans de nombreux contextes. En limitant la recherche d'un pas optimal à une région de confiance, ces méthodes peuvent mieux gérer les approximations de la fonction objective.

### a. Méthodes standards

La descente de gradient est une méthode itérative qui utilise le gradient de la fonction pour se diriger vers le minimum local. Elle nécessite le choix d'un pas de descente approprié. La méthode de Newton, quant à elle, utilise à la fois le gradient et la matrice hessienne pour trouver des points de stationnarité. D'autres variantes existent comme la méthode de quasi-Newton, mais elles ne seront pas développées ici.

#### Descente de gradient :

L'objectif de la méthode est de résoudre le problème :  $\inf_{u \in \mathbb{R}^n} K(u)$  avec  $K : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ . La méthode se base sur un algorithme itératif avec une formule de récurrence :  $u_{k+1} = u_k + \mu_k p_k$ , où  $u_k, u_{k+1}, p_k \in \mathbb{R}^n$  et  $\mu_k \in \mathbb{R}$ . Le but est de trouver un pas  $\mu_k$  et une direction  $p_k$  qui réduisent  $K$  entre chaque itération, autrement dit,  $K(u_{k+1}) < K(u_k)$ . En prenant pour condition,  $\nabla f(u_k)^T(-p_k) < 0$ ,  $\mu_k > 0$  et  $\mu_k$  assez petit, on obtient :

$$K(u_{k+1}) - K(u_k) = \mu_k \nabla K(u_k)^T(-p_k) + o(\mu_k p_k) < 0 \quad (1)$$

Plusieurs algorithmes de ce type existent, comme la méthode de gradient à pas fixe, pas optimal ou encore conjugué (cf. a), leurs différences résidant dans le choix du pas  $\mu_k$ . La méthode de descente de gradient à pas fixe est basé sur le fait que le pas pour chaque itération est le même :

$$u_{k+1} = u_k + \alpha p_k \quad (2)$$

( $\alpha$  le pas fixe). En prenant  $p_k = \nabla K$ , la propriété (1) est respectée et on appelle cette direction : la direction de descente de plus forte descente.

**Méthode de Newton** Soit  $F$  une fonction et  $u$  un zéro régulier de  $F$ . L'approche de la méthode de New-

ton consiste à annuler l'approximation affine d'une fonction au lieu de trouver le zéro. Autrement dit, au lieu de chercher :  $F(v) = 0$ , la méthode résout :

$$F(u_k) + \nabla F(u_k)(v - u_k) = 0$$

L'intérêt est qu'en trouvant le zéro d'une fonction comme :  $\nabla F$ , cela revient à trouver le minimum de  $F$ . Ainsi, l'itéré de Newton s'écrit :

$$u_{k+1} = u_k - [\nabla F(u_k)^T]^{-1} \nabla F(u_k) \quad (3)$$

## b. Limites des méthodes traditionnelles

**Descente de gradient** : Soit l'exemple suivant pour la méthode du gradient à pas fixe :

$$f(x, y) = 100x^2 + y^2$$

L'algorithme du gradient à pas fixe est dans ce cas :

$$\begin{cases} x_{k+1} = x_k - \alpha \frac{\partial f}{\partial x}(x_k, y_k) = x_k - \alpha 200x_k \\ y_{k+1} = y_k - \alpha \frac{\partial f}{\partial y}(x_k, y_k) = y_k - \alpha 2y_k \end{cases}$$

En prenant par exemple,  $\alpha = 0.01$ , le système devient :

$$\begin{cases} x_{k+1} = -x_k \\ y_{k+1} = 0.98y_k \end{cases}$$

Soit  $(1, 1)$  l'initialisation de la méthode pour la fonction  $f$ , alors la simulation de plusieurs itération donne :

| Itération $k$ | $x_k$  | $y_k$  |
|---------------|--------|--------|
| 0             | 1.000  | 1.000  |
| 1             | -1.000 | 0.980  |
| 2             | 1.000  | 0.9604 |
| 3             | -1.000 | 0.9412 |
| 4             | 1.000  | 0.9224 |
| ...           | ...    | ...    |
| 100           | -1.000 | 0.1326 |

TABLE 1 – Simulation de la descente de gradient avec  $\alpha = 0.01$

Ainsi, cet exemple ne tend pas vers le minimum  $(0, 0)$  de  $f$  puisque le membre  $y_k$  tend très lentement vers 0 et le terme  $x_k$  oscille seulement entre -1 et 1. Dès lors, dans cette méthode le choix du pas est primordial en ce qui concerne la convergence vers le minimum.

Le prochain théorème donne une indication sur le pas pour qu'il y ait convergence.

**Théorème 1.** Soit  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  une fonction convexe différentiable sûr  $D \in \mathbb{R}^n$ . Supposons que  $f$  soit lip-schitzienne, c'est-à-dire

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \leq L\|x - y\|$$

avec  $\nabla f(x)$  le gradient de  $f$  en  $x$  et  $L > 0$ . Alors la méthode de plus forte descente :

$$x_{k+1} = x_k + \alpha p_k$$

avec  $\alpha = -\nabla f(x_k)$  le pas de plus fort descente et  $p_k$  la direction de descente. Alors :

$$f(x_{k+1}) - f(x_k) \leq \frac{-1}{2L} \|\nabla f(x_k)\|^2$$

*Démonstration.*

$$\begin{aligned} f(x_{k+1}) - f(x_k) &= f(x_k + \alpha p_k) - f(x_k) \\ &\leq f(x_k) + \alpha f(p_k) - f(x_k) \quad \text{car } f \text{ est convexe} \\ &= \alpha f(\nabla f(x_k)) \\ &= \alpha \|\nabla f(x_k)\|^2 \end{aligned}$$

car  $\frac{\partial}{\partial t}(\nabla f) = \nabla(\frac{\partial f}{\partial t})$ .

Le résultat est obtenu en prenant  $\alpha = \frac{-1}{2L}$ . □

### Méthode de Newton :

Soit l'exemple suivant pour la méthode de Newton :

$$f(x) = \|x\|$$

Alors :

$$F(x) = f'(x) = \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{x}} & x > 0 \\ -\frac{1}{2\sqrt{-x}} & x < 0 \end{cases}$$

et

$$f''(x) = \begin{cases} -\frac{1}{4x^{3/2}} & x > 0 \\ -\frac{1}{4x^{3/2}} & x < 0 \end{cases}$$

L'algorithme de Newton est :

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)} = \begin{cases} 3x & x > 0 \\ -x & x < 0 \end{cases}$$

Soit  $x_0 = 5$  l'initialisation de la méthode pour la fonction  $f$ , alors la simulation de plusieurs itérations donne :

| $k$ | $x_k$  | $f(x_k)$ |
|-----|--------|----------|
| 0   | 5.0000 | 2.24     |
| 1   | 15     | 3.88     |
| 2   | 45     | 6.7      |
| 3   | 135    | 11.6     |
| 4   | 405    | 20.1     |

TABLE 2 – Itérations de la méthode de Newton pour la fonction  $f(x) = \|x\|$  avec  $x_0 = 5$ .

Pour cette fonction, la méthode ne converge pas alors qu'il existe bien un minimum global en 0. En raison du fait que la fonction ne soit pas différentiable en ce point.

**Théorème 2.** [4] Soient  $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  de classe  $C^2$ ,  $u$  un zéro régulier ( $F(u) = 0$ ) et  $\nabla F(u)^T$  inversible. Il existe  $\varepsilon > 0$  tel que si  $u_0$  vérifie  $\|u_0 - u\| < \varepsilon$ , alors la suite de Newton :  $u_{k+1} = u_k - (\nabla F(u_k)^T)^{-1} F(u_k)$ , converge vers  $u$ .

*Démonstration.* Admis. □

Les méthodes traditionnelles d'optimisation numérique telles que la méthode de Newton et les méthodes de gradient, bien que largement utilisées, présentent d'importantes limites. Elles supposent souvent une forme quadratique locale pour la fonction "objectif" et peuvent diverger si cette approximation locale est incorrecte, notamment si ces fonctions sont non-différentiables ou sujettes à des discontinuités.

Face à ces défis, les méthodes de régions de confiance émergent comme une alternative prometteuse. Elles ne nécessitent pas de supposer une forme spécifique de la fonction à minimiser, mais utilisent le concept de région de confiance.

## 2. Procédé de la méthode avec une approche de la fonction par un modèle quadratique

### a. Approche générale

Le procédé des méthodes à région de confiance consiste à déterminer le minimum d'une fonction complexe  $f$  en subdivisant ce problème en une série de sous-problèmes d'optimisation. Plutôt que d'examiner la fonction dans son intégralité, l'objectif est de trouver le minimum d'une fonction approchée de  $f$  dans une région spécifique dénommée "région de confiance". Cette région représente la zone dans laquelle on estime que la fonction approchée est fiable. Dans l'exemple, figure (1), la fonction approchée est étroitement similaire à la fonction  $f$  dans la région délimitée par le cercle en vert, montrant ainsi une forte concordance entre la fonction  $f$  et sa fonction approchée dans cette zone spécifique. En dehors de cette région, les écarts entre la fonction et son approximation quadratique peuvent cependant être plus significatifs. Le cercle vert représente ainsi une région de confiance.

Approximation d'une fonction complexe par une fonction quadratique

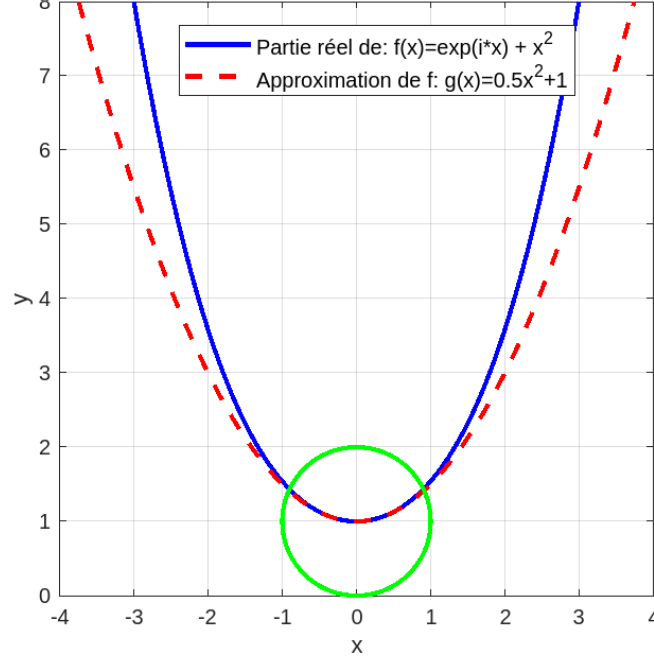


FIGURE 1 – Exemple d'une région de confiance

Mathématiquement, la région de confiance est définie comme une boule :

**Définition 1** (Boule). Soit un espace vectoriel normé  $(E, \|\cdot\|)$ . Soient  $x \in E$  et  $r > 0$ . La boule de centre  $x$  et de rayon  $r$  est définie comme :

$$B(x, r) = \{y \in E \mid \|y - x\| \leq r\}$$

Elle pourra par exemple être représentée par un cercle en dimension 2 avec la norme euclidienne comme dans la figure (1).

Cependant, la démarche ne se limite pas à cette approximation initiale. En poursuivant avec la méthode d'approximation de  $f$  par un modèle quadratique  $m$ , le procédé progresse vers la résolution du problème en utilisant une méthode de descente. Un modèle quadratique est un polynôme homogène de second degré. Autrement dit, chaque terme individuel du polynôme est de degré 2.

**Définition 2** (Polynôme homogène de degré  $d$ ). Soit  $K$  un anneau commutatif et soit  $P$  un polynôme de  $K[X_1, X_2, \dots, X_n]$  où  $n$  est le nombre de variables. On dit que  $P$  est un polynôme de degré  $d$  homogène si :

$$P = \sum_{a \in \mathbb{N}^n} w_a X^{a_1} X^{a_2} \dots X^{a_n}$$

et

$$w \neq 0 \implies a_1 + a_2 + \dots + a_n = d$$

**Exemple 1.** Avec 2 variables :  $m(x, y) = 2x^2 - 3xy + 4y^2$ .

On a bien  $2x^2$  de degré 2,  $-3xy$  de degré 2 et  $4y^2$  de degré 2.

Avec 4 variables :  $m(x, y, z, w) = x^2 + w^2 + xy - wz + 2yz$ .

De même,  $x^2$ ,  $w^2$ ,  $xy$ ,  $-wz$  et  $2yz$  sont de degré 2.

Le modèle  $m$  est utile puisqu'il s'agit d'une fonction possédant des propriétés connues. Il est ainsi aisé de calculer aisément son minimum local ou global dans la région de confiance définie.



De manière concrète, un point  $x_k$  et un rayon  $\Delta_k$  sont sélectionnés afin de définir une première région de confiance. Ensuite, la fonction  $f$  est approchée par un modèle quadratique  $m_k$  dans la région ainsi défini. Puis, une direction de descente qui représente le chemin à suivre pour améliorer la solution est identifié à l'intérieur de cette zone avant de passer à l'itération suivante. La solution  $x_k$  est mise à jour si elle est amélioré en prenant un pas dans la direction de descente calculée, tout en respectant les limites de la région de confiance. Autrement dit,  $x_{k+1} = x_k + p$  où  $p$  est le pas. Sinon, la solution ne bouge pas mais la région est réduite afin de trouver une meilleur approximation de  $f$ . Ainsi, à chaque itération, on progresse graduellement vers le minimum recherché. La méthode est illustrée visuellement dans la figure (2).

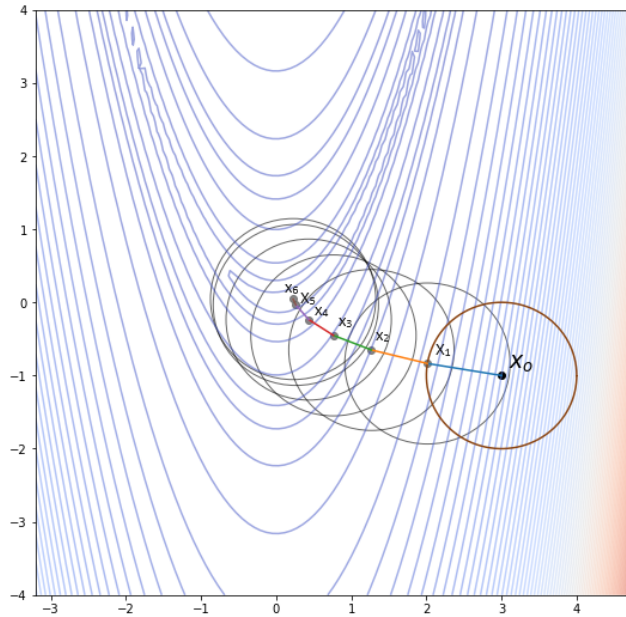


FIGURE 2 – Descente de type région de confiance  
[1]

## b. Approche concrète

Dans le cadre de l'optimisation et de l'analyse des fonctions, une question cruciale émerge : Comment est choisie la fonction quadratique à l'intérieur d'une région de confiance donnée ? Tout d'abord, opter pour une fonction quadratique présente l'avantage qu'elle soit facilement analysable. En effet, Les opérations fondamentales telles que la dérivation ou la recherche de minimum s'effectuent simplement. Le point crucial réside dans l'obtention d'une bonne approximation de  $f$  dans la région de confiance (voir figure 1). Dans cette optique, opter pour un modèle de type Taylor est judicieux, car autour d'un point le coefficient de reste  $R_n$  entre la fonction  $f$  et son modèle devient négligeable.

**Définition 3** (Série de Taylor). Soient :

- $U$  un ouvert de  $\mathbb{R}^n$
- $a \in U$
- $f$  une fonction de  $U$  dans  $\mathbb{R}^m$ ,  $k$  fois différentiable en  $a$

Alors :

$$\forall x \in I, \quad f(a+h) = f(a) + Df(a)(h) + \dots + \frac{1}{k!} D^k f(a)(h)^k + R_n(x)$$

où

$$R_n(x) = o(\|h\|^k)$$

Ainsi, en remplaçant  $a$  par l'itéré  $x_k$  et  $h$  par pas (pas), le modèle quadratique  $m_k$ , le modèle approchant  $f$  autour du point, est défini comme :

$$p \in \mathbb{R}^n, \quad m_k(p) = f(x_k) + \nabla f(x_k)^T p + \frac{1}{2} p^T H_k p \quad (4)$$

avec  $\nabla f : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}^n$  le gradient de  $f$  au point  $x_k$  et  $H_k \in \mathbb{R}^{n \times n}$  la hessienne de  $f$  en  $x_k$ .

De plus, on retrouve ces propriétés :

$$\begin{cases} m_k \in C^1 \\ m_k(0) = f(x_k) \\ \nabla m_k(0) = \nabla f(x_k) \end{cases}$$

Dans cet écrit, les gradients exacts des fonctions seront utilisés ; toutefois, une approximation peut être employée si l'évaluation des gradients exacts s'avère difficile. De même, une approximation de  $H_k$  peut être utilisée dans le cas de fonctions complexes, celle-ci sera basée sur le gradient exact et calculée grâce à des méthodes telles que le BFGS. La méthode BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno) est un algorithme d'optimisation sans contrainte utilisé pour résoudre des problèmes d'optimisation non linéaires.

Finalement, les sous-problèmes de la méthode à région par confiance reviennent à trouver l'élément  $p$  qui minimise  $m_k$ , c'est-à-dire :

$$\min_{p \in \mathbb{R}^n} m_k(p) = f(x_k) + \nabla f(x_k)^T p + \frac{1}{2} p^T H_k p \quad \text{tel que} \quad \|p\| \leq \Delta_k \quad (5)$$

où  $\Delta_k$  le rayon de la région de confiance à l'itéré  $k$ ,  $\|p\| = \|p\|_2 = \sqrt{p^T p}$ .

Ainsi, un algorithme classique se déroule de cette manière :

**Données :**  $\eta_1, \eta_2, \Delta_0 > 0$  et  $x_0$ . Tel que  $\eta_1 = 0.25$  et  $\eta_2 = 0.75$

**Résultat :**  $x_k$

1 **début**

2  $\Delta_k = \Delta_0$

3  $k = 0$

4 Tant que ( $\|\nabla f(x)\| < \varepsilon$ ) faire

5 **Etape 1 :** Définir un modèle  $m_k$  comme (5)

6 **Etape 2 :** Calcul du pas  $p$  dans la région de confiance de rayon  $\Delta_k$

7 **Etape 3 :** Acceptation/rejet du pas et mise à jour de la région de confiance

8 Calcul de  $f(x_k + p)$  et de  $\rho_k = \frac{f(x_k) - f(x_k + p)}{m_k(0) - m_k(p)}$

9 a) Si  $\rho_k < \eta_1$  alors  $\Delta_{k+1} = \frac{1}{4} \Delta_k$

10 b) Si  $\rho_k > \eta_2$  et  $\|p\| = \Delta_k$  alors  $\Delta_k \min(2\Delta_{k+1}, \Delta_{max})$

11 c) Sinon  $\Delta_{k+1} = \Delta_k$

12 d) Si  $\rho_k > 0$  alors  $x_{k+1} = x_k + p$  sinon  $x_{k+1} = x_k$   $k = k + 1$

13 Fin tant que

14 **fin**

**Algorithme 1 :** Région de confiance

Nous verrons dans la partie II une méthodologie permettant de trouver (5) (ligne 6). Le paramètre  $\rho_k$  (ligne 8) évalue la qualité du modèle  $m_k$ , si le modèle choisis est une bonne approximation alors  $f(x_k) - f(x_k + p)$  et  $m_k(x_k) - m_k(x_k + p)$  sont proches. En d'autres termes, une diminution du modèle entraîne une diminution proportionnelle de la fonction objectif et un bon modèle équivaut à  $\rho_k \approx 1$ . Le cas a) est le cas où le modèle  $m_k$  est une très bonne approximation de la fonction  $f$ , la taille de la région de confiance peut être agrandi et la solution  $x_k$  mise à jour. Le cas b) est le cas où le modèle est une bonne approximation, la solution peut être mise à jour. Le dernier cas traite d'une mauvaise approximation de  $f$ , dans ce cas la solution n'est pas mise à jour et la taille de la région est réduite afin de trouver un meilleur modèle  $m_k$ .

Pour assurer la convergence globale de la méthode, la solution approximative doit au moins atteindre le même niveau de réduction de la valeur du modèle que ce qu'obtiendrait un pas dans la direction de la pente la plus raide, tout en respectant les contraintes de la région de confiance. Intéressons-nous donc au pas de Cauchy qui est le minimiseur de  $m_k$ .

### 3. Le pas de Cauchy et convergence globale du principe

Bien qu'une solution optimale soit recherchée, une solution approchée à l'intérieur de la région de confiance suffit à montrer la convergence globale de la méthode et ceux grâce à une "réduction suffisante"[5] du modèle. Cette réduction du modèle peut être quantifié par le pas de Cauchy défini comme suit :

**Définition 4** (Pas de Cauchy). Soit  $p^c$  le pas de Cauchy, alors :

$$p^c = -\alpha^c \nabla f(x_k) \quad \text{où} \quad \alpha^c = \arg \min \{m_k(-\alpha \nabla f(x_k)) \mid \alpha > 0, \alpha \|\nabla f(x_k)\| \leq \Delta_k\} \quad (6)$$

Le pas de Cauchy représente la réduction la plus significative du modèle quadratique dans la direction de plus forte descente de la pente, c'est-à-dire  $-\nabla f(x_k)$ . Le pas de Cauchy se quantifie tel que :

**Proposition 1.**

$$p^c = -\min \left\{ \frac{\Delta_k}{\|\nabla f(x_k)\|}, \frac{\|\nabla f(x_k)\|^2}{\nabla f(x_k)^T H_k \nabla f(x_k)} \right\} \nabla f(x_k)$$

*Démonstration.* Calculons  $p^c$  en exprimant  $\alpha^c$  :

$$\begin{aligned} m_k(-\alpha \nabla f(x_k)) &= f(x_k) - \alpha \|\nabla f(x_k)\| \|\nabla f(x_k)\| + \frac{1}{2} (-\alpha \nabla f(x_k))^T H_k (-\alpha \nabla f(x_k)) \\ \iff m_k(-\alpha \nabla f(x_k)) &= f(x_k) - \alpha \|\nabla f(x_k)\|^2 + \frac{1}{2} \alpha^2 \nabla f(x_k)^T H_k \nabla f(x_k) \end{aligned}$$

Soit :  $\nabla f(x_k)^T H_k \nabla f(x_k) > 0$ , autrement dit,  $m_k$  est strictement convexe en  $\alpha$ , alors le min est obtenu lorsque la dérivée de  $m_k$  s'annule en 0.

$$\frac{\partial m_k(-\alpha \nabla f(x_k))}{\partial \alpha} = 0$$

C'est-à-dire :

$$-\|\nabla f(x_k)\|^2 + \alpha \nabla f(x_k)^T H_k \nabla f(x_k) = 0$$

On obtient finalement :

$$\alpha = \frac{\|\nabla f(x_k)\|^2}{\nabla f(x_k)^T H_k \nabla f(x_k)}$$

Cependant, le minimum obtenu avec ce  $\alpha$  peut se retrouver hors de la région de confiance, c'est-à-dire :

$$\alpha \|\nabla f(x_k)\| \geq \Delta_k$$

La contrainte étant de rester dans la zone de confiance, on pose :

$$\alpha = \min \left\{ \frac{\Delta_k}{\|\nabla f(x_k)\|}, \frac{\|\nabla f(x_k)\|^2}{\nabla f(x_k)^T H_k \nabla f(x_k)} \right\}$$

Soit :  $\nabla f(x_k)^T H_k \nabla f(x_k) \leq 0$ . Alors  $m_k(p^c)$  décroît, c'est-à-dire,  $m_k(p^c)$  n'est pas bornée inférieurement. Ainsi, le minimum se trouvera sur la frontière de la région de confiance. Autrement dit :

$$\alpha = \frac{\Delta_k}{\|\nabla f(x_k)\|}$$

□

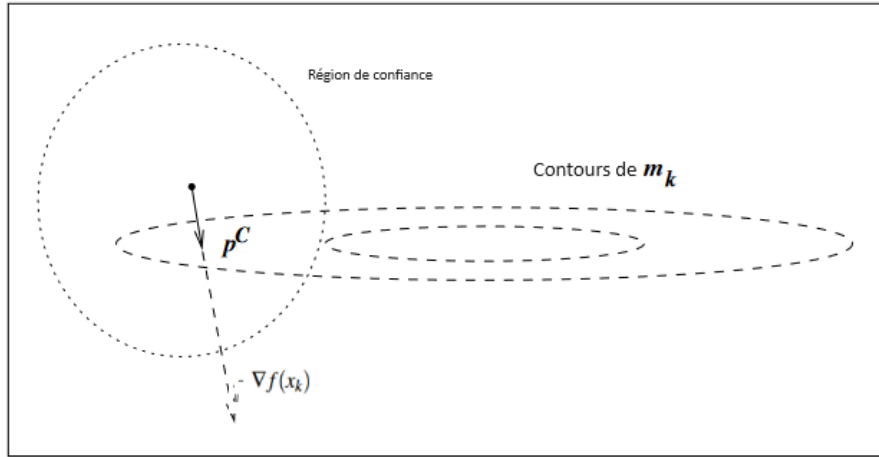


FIGURE 3 – Représentation du Pas de Cauchy

[5]

La relation entre la fonction approchée et le pas de Cauchy est maintenant observée :

**Lemme 1.** [5] Le point de Cauchy  $p^c$  satisfait :

$$m_k(0) - m_k(p^c) \geq c_1 \|\nabla f(x_k)\| \min \left\{ \Delta_k, \frac{\|\nabla f(x_k)\|}{\|H_k\|} \right\} \quad (7)$$

avec  $c_1 = \frac{1}{2}$ .

*Démonstration.* Soit  $\nabla f(x_k)^T H_k \nabla f(x_k) \leq 0$ , alors :

$$\begin{aligned}
m_k(p^c) - m_k(0) &= m_k \left( \frac{-\Delta_k \nabla f(x_k)}{\|\nabla f(x_k)\|} \right) - m_k(0) \\
&= f(x_k) - \frac{\Delta_k \nabla f(x_k)^T \nabla f(x_k)}{\|\nabla f(x_k)\|} + \Delta_k \frac{\nabla f(x_k)^T}{\|\nabla f(x_k)\|} H_k \frac{\Delta_k \nabla f(x_k)}{\|\nabla f(x_k)\|} - f(x_k) \\
&= -\frac{\Delta_k \|\nabla f(x_k)\|^2}{\|\nabla f(x_k)\|} + \frac{\Delta_k^2}{\|\nabla f(x_k)\|^2} \nabla f(x_k)^T H_k \nabla f(x_k) \\
&\leq -\Delta_k \|\nabla f(x_k)\| \\
&\leq -\|\nabla f(x_k)\| \min \left\{ \Delta_k, \frac{\|\nabla f(x_k)\|}{\|H_k\|} \right\}
\end{aligned}$$

car  $\nabla f(x_k)^T H_k \nabla f(x_k) \leq 0$ . Ainsi :

$$m_k(0) - m_k(p) \geq \|\nabla f(x_k)\| \min \left\{ \Delta_k, \frac{\|\nabla f(x_k)\|}{\|H_k\|} \right\} \geq \frac{1}{2} \|\nabla f(x_k)\| \min \left\{ \Delta_k, \frac{\|\nabla f(x_k)\|}{\|H_k\|} \right\}.$$

Soit  $\nabla f(x_k)^T H_k \nabla f(x_k) > 0$ , alors :

$$\begin{aligned}
m_k(p^c) - m_k(0) &= m_k \left( \frac{-\|\nabla f(x_k)\|^2 \nabla f(x_k)}{\nabla f(x_k)^T H_k \nabla f(x_k)} \right) - m_k(0) \\
&= \frac{-\nabla f(x_k)^T \|\nabla f(x_k)\|^2 \nabla f(x_k)}{\nabla f(x_k)^T H_k \nabla f(x_k)} + \frac{\|\nabla f(x_k)\|^4}{2(\nabla f(x_k)^T H_k \nabla f(x_k))^2} \nabla f(x_k)^T H_k \nabla f(x_k) \\
&= \frac{-\|\nabla f(x_k)\|^4}{\nabla f(x_k)^T H_k \nabla f(x_k)} + \frac{\|\nabla f(x_k)\|^4}{2\nabla f(x_k)^T H_k \nabla f(x_k)} \\
&= -\frac{1}{2} \frac{\|\nabla f(x_k)\|^4}{\nabla f(x_k)^T H_k \nabla f(x_k)} \\
&\leq -\frac{1}{2} \frac{\|\nabla f(x_k)\|^4}{\|H_k\| \|\nabla f(x_k)\|^2} \\
&= -\frac{1}{2} \frac{\|\nabla f(x_k)\|^2}{\|H_k\|} \\
&\leq -\frac{1}{2} \|\nabla f(x_k)\| \min \left\{ \Delta_k, \frac{\|\nabla f(x_k)\|}{\|H_k\|} \right\}
\end{aligned}$$

car  $\nabla f(x_k)^T H_k \nabla f(x_k) > 0$ . Ainsi :

$$m_k(0) - m_k(p) \geq \frac{1}{2} \|\nabla f(x_k)\| \min \left\{ \Delta_k, \frac{\|\nabla f(x_k)\|}{\|H_k\|} \right\}$$

D'où le résultat. □

Le pas de Cauchy est essentiel pour déterminer les directions permettant la convergence de l'algorithme (1). Ainsi, en garantissant qu'à chaque itération la direction produit une décroissance significative (une fraction de celle produite par le pas de Cauchy), il est alors assuré que le modèle quadratique  $m_k$  diminue suffisamment. Cela implique que la fonction objectif  $f$  elle-même diminue, assurant ainsi la convergence vers un point stationnaire et évitant la stagnation dans des directions n'apportant pas ou peu de réduction du modèle. La fraction du pas de Cauchy est alors exprimée comme :

**Théorème 3.** [5] Soit  $p_k$  un vecteur tel que  $\|(p_k)\| \leq \Delta_k$  et  $m_k(0) - m_k(p_k) \geq c_1(m_k(0) - m_k(p_k^c))$ . Alors  $p_k$  satisfait (7) avec  $c_1 = \frac{c_2}{2}$ . En particulier, si  $p_k$  est la solution exacte de (5) alors, il satisfait (7) avec  $c_1 = \frac{1}{2}$ .

$$m_k(0) - m_k(p_k) \geq \frac{1}{2}c_2\|\nabla f(x_k)\| \min \left\{ \Delta_k, \frac{\|\nabla f(x_k)\|}{\|H_k\|} \right\} \quad (8)$$

*Démonstration.* Dès que  $\|(p_k)\| \leq \Delta_k$ , (7) donne :

$$m_k(0) - m_k(p_k) \geq c_1(m_k(0) - m_k(p_k^c)) \geq \frac{1}{2}c_2\|\nabla f(x_k)\| \min \left\{ \Delta_k, \frac{\|\nabla f(x_k)\|}{\|H_k\|} \right\}$$

En posant  $c_1 = \frac{1}{2}c_2$ , on a le résultat. □

Finalement, la convergence globale est déterminée par :

Convergence faible :

**Théorème 4.** [3] Soit  $f$  une fonction tel que :  $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  et tel que  $f$  soit continûment dérivable sur  $\Omega = \{x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) < f(x_0)\}$ . Supposons  $\|H_k\| \leq \beta$ , avec  $\beta$  une constante. Soit  $x_k$  une suite d'itéré générés par l'algorithme (1) avec  $H_k$  uniformément bornée et tel que  $\|p_k\| \leq \eta\Delta_k$ , avec  $\eta \leq 1$ . Si de plus  $p_k$  vérifie la condition précédente 3, alors

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \inf(\|\nabla f(x_k)\|) = 0$$

Autrement dit, la suite  $(x_k)_{k \geq 0}$  converge vers un point stationnaire.

*Démonstration.* Soit la décomposition de Taylor de  $f$  suivante :

$$\begin{aligned} f(x_k + p_k) &= f(x_k) + \nabla f(x_k + tp_k)^T p_k \\ &= f(x_k) + \nabla f(x_k)^T p_k + \int_0^1 (\nabla f(x_k + tp_k) - \nabla f(x_k))^T p_k dt \end{aligned}$$

D'où :

$$|m_k(p_k) - f(x_k + p_k)| = \left| \frac{1}{2}p_k^T H_k p_k - \int_0^1 (\nabla f(x_k + tp_k) - \nabla f(x_k))^T p_k dt \right| \leq \frac{\beta}{2}\|p_k\|^2 + Cp_k\|p_k\|$$

Supposons qu'il existe  $\varepsilon > 0$  et  $K$  un index tel que

$$\|\nabla f(x_k)\| \geq \varepsilon \quad \forall k \geq K \quad (9)$$

alors par (8), on a :  $\forall k \geq K$ ,

$$m_k(0) - m_k(p_k) \geq c_1\|\nabla f(x_k)\| \min(\Delta_k, \frac{\|\nabla f(x_k)\|}{\|H_k\|}) \geq c_1\varepsilon \min(\Delta_k, \frac{\varepsilon}{\beta}) \quad (10)$$

En utilisant (9) et (10), on a :

$$|\rho_k - 1| \leq \frac{\eta\Delta_k(\beta\eta\frac{\Delta_k}{2} + Cp_k)}{2c_1\varepsilon \min(\Delta_k, \frac{\varepsilon}{\beta})} \quad (11)$$

□

Le gradient étant la direction pour laquelle la fonction  $f$  diminue le plus rapidement, s'il est proche de 0, cela signifie que  $x_k$  est proche d'un point stationnaire. Autrement dit, la fonction  $f$  ne change pas beaucoup localement en ces points.

Convergence forte :

**Théorème 5.** [3] Soit  $f$  une fonction tel que :  $f : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$  et tel que le gradient de  $f$  soit continu au sens de Lipschitz, inférieurement bornée sur  $\Omega = \{x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) < f(x_0)\}$ . Soit  $x_k$  une suite d'itérés générés par l'algorithme (1) avec  $H_k$  uniformément bornée. Si de plus  $p_k$  vérifie la condition précédente 3, alors

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} (\|\nabla f(x_k)\|) = 0$$

*Démonstration.* Admis. □

En conclusion, cette section a présenté une exploration détaillée des régions de confiance en tant qu'alternative viable aux méthodes standards d'optimisation. Ces analyses approfondies constituent les fondements nécessaires à la compréhension des régions de confiance et de leur application dans l'optimisation numérique.

La prochaine section se concentrera sur la résolution du minimum au sein de ces régions de confiance, en examinant de manière plus spécifique les algorithmes et techniques utilisés pour atteindre des solutions optimales tout en intégrant les concepts généraux abordés ici.

## II. Mise en lumière des méthodes de recherche du minimum

Cette deuxième partie se concentrera sur les sous-méthodes employées pour trouver le minimum dans une région de confiance. La résolution du sous-problème (5) constitue un algorithme à part entière dans la région de confiance. Selon la nature de la matrice  $H_k$ , trois approches différentes peuvent être employées pour obtenir une solution approchée. En effet, si la matrice  $H_k$  est définie positive, la méthode "Dogleg" sera privilégiée, elle combine les directions de descente de Cauchy et de Newton pour améliorer la convergence. La méthode de "minimisation dans un sous-espace de dimension deux" est basée sur l'estimation de la valeur propre la plus négative de  $H_k$ , ce qui en fait une approche appropriée lorsque la matrice est non définie. Enfin, la méthode "Steihaug" est considérée comme une alternative si  $H_k$  est une matrice Hessienne de grande dimension, elle utilise une version modifiée de la méthode par gradient conjugué.

### 1. La méthode "Dogleg"

Le principe de la méthode "Dogleg" est de minimiser le modèle  $m$  le long d'un chemin partant du centre de la région de confiance jusqu'à un point sur la frontière de la région avec pour contrainte que ce chemin soit linéaire par morceau. Elle combine les caractéristiques de la descente de gradient et de la méthode de Newton pour trouver une direction de recherche optimale. L'idée est de trouver un compromis entre la direction descendante (assurée par le pas de Cauchy) et l'efficacité du pas de Newton.

En effet, deux facteurs influent sur la solution du problème (5), la taille de la région de confiance et le modèle quadratique  $m$ . Lorsque  $H$  est définie positive, la solution  $p^*$  du problème est :  $p^* = -H^{-1}\nabla f$  car lorsque  $H$  est définie positive, il y a :

$$v^T H v > 0 \quad \forall v$$

Ceci implique que la fonction quadratique  $m$  est convexe et ainsi que le minimum est atteint par le point qui annule le gradient, c'est-à-dire pour  $-H^{-1}\nabla f$ . Pour des petits rayons, la contrainte  $\|p\| > \Delta$  implique que la partie quadratique de  $m$ ,  $\frac{1}{2}p^T H p$ , a peu d'effet sur la solution  $p^*$ . Cela signifie que la taille de  $p^*$  est principalement déterminée par la composante linéaire de la fonction  $m$ . Plus précisément, la solution est approximativement la même que celle minimisant :

$$m = f + \nabla f^T p \quad | \quad \|p\| \leq \Delta$$

C'est-à-dire :

$$p^* \approx -\Delta \frac{\nabla f}{\|\nabla f\|} \quad (12)$$

Enfin, pour des valeurs intermédiaires du rayon de région de confiance, la solution  $p^*$  est influencée par  $\Delta$ , le rayon, ainsi que par le terme quadratique de  $m$ . La contrainte  $\|p\| \leq \Delta$  restreint la taille de  $p^*$  tandis que le terme quadratique tend à l'étirer dans une direction qui minimise la fonction. Cette combinaison conduit à des trajectoires de solution qui suivent généralement une courbe dans l'espace des paramètres. Ainsi, la méthode "Dogleg" trouve une approximation de la solution en remplaçant la courbe décrite ci-dessus par un double segment (cf. figure (4)).



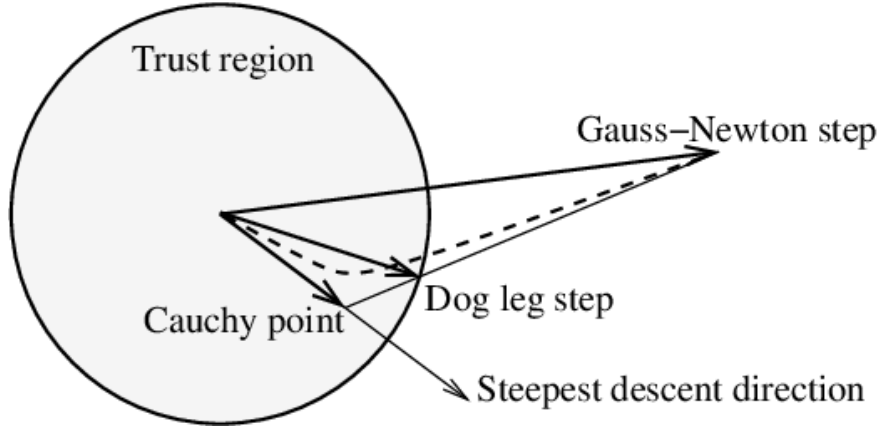


FIGURE 4 – Construction du pas de la méthode Dogleg  
[5]

Le premier segment s'étend du centre de la région de confiance jusqu'au point de Cauchy le long de la plus forte descente (gradient négatif). Quant au deuxième, il part de ce point et se prolonge jusqu'au point de Newton. Pour rappel, le pas de Cauchy est défini comme :

$$p^U = p^C = -\frac{\nabla f(x_k)^T \nabla f(x_k) \nabla f(x_k)}{\nabla f(x_k)^T H_k \nabla f(x_k)}$$

Il représente le pas qui minimise le modèle le long de la plus forte descente. Ce pas est optimal pour de petites régions de confiance et garantit une décroissance suffisante de la fonction objectif (cf 2).

Le pas de la méthode de Newton est lui défini comme :

$$p^B = -H_k^{-1} \nabla f(x_k)$$

Ce pas est optimal en termes de convergence quadratique lorsque l'itération est proche du minimum.

En effet :

**Théorème 6.** [6] Soit  $f$  une fonction deux fois différentiable et soit  $x^*$  un minimum local de  $f$ . Soit  $x$  suffisamment proche de  $x^*$  et  $H$  la Hessienne de  $f$  définie positive. Alors la séquence générée par la méthode de Newton ( $x_{k+1} = x_k - H^{-1}g$ ,  $g$  gradient de  $f$ ) converge quadratiquement vers  $x^*$ . Autrement dit :

$$\exists \varepsilon > 0 \quad | \quad \|x - x^*\| < \varepsilon \implies x_k \xrightarrow[k \rightarrow +\infty]{} x^*$$

et

$$\forall k, \exists C > 0 \quad | \quad \|x_{k+1} - x^*\| \leq C \|x_k - x^*\|^2$$

Démonstration. Admis. □

Finalement, le pas généré par la méthode peut être caractérisé par l'équation suivante :

$$p^*(\alpha) = \begin{cases} \alpha p^C & 0 \leq \alpha \leq 1 \\ p^C + (\alpha - 1)(p^B - p^C) & 1 \leq \alpha \leq 2 \end{cases}$$

C'est pourquoi le pas intersecte une fois la frontière de la région de confiance :

**Proposition 2.** Soit  $H_k$  définie positive, alors :

- 1)  $\|p^*(\alpha)\|$  est une fonction croissante pour  $\alpha$
- 2)  $m(p^*(\alpha))$  est une fonction décroissante pour  $\alpha$

*Démonstration.* 1) Soit  $g(\alpha) = \|p^*(\alpha)\|^2$ . Montrons que sa dérivée est positive.

$$\begin{aligned}
 g'(\alpha) &= (\|p^*(\alpha)\|)' \\
 &= (\|p^U + \alpha(p^B - p^U)\|)' \\
 &= (\|p^U\|^2 + 2(p^U)^T \alpha \|p^B - p^U\| + \alpha^2 \|p^B - p^U\|^2)' \\
 &= 2(p^U)^T \|p^B - p^U\| + 2(p^U)^T \alpha \|p^B - p^U\| \\
 &\geq 2(p^U)^T \|p^B - p^U\| \quad \text{car } \alpha > 0 \\
 &\geq -\frac{\nabla f(x_k)^T \nabla f(x_k) \nabla f(x_k)^T}{\nabla f(x_k)^T H_k \nabla f(x_k)} \left( \frac{\nabla f(x_k)^T \nabla f(x_k) \nabla f(x_k)}{\nabla f(x_k)^T H_k \nabla f(x_k)} + H_k^{-1} \nabla f(x_k) \right) \\
 &\geq 0
 \end{aligned}$$

Soit  $h(\alpha) = m(p^*)$ . Montrons que la dérivée est négative.

$$\begin{aligned}
 m'(p^*) &= (f(x_k) + \nabla f(x_k)^T p^* + \frac{1}{2} p^{*T} H_k p^*)' \\
 &\quad \nabla f(x_k) + \frac{1}{2} [(p^U + \alpha(p^B - p^U))^T H_k (p^U + \alpha(p^B - p^U))]
 \end{aligned}$$

□

Les différents cas de figure se présentent alors pour la méthode :

- $\|p^U\| > \Delta_k$
- $\|p^B\| \leq \Delta_k$
- $\|p^U\| < \Delta_k$  et  $\|p^B\| > \Delta_k$

Autrement dit, la solution  $p^*$  du sous-problème (5) revient à prendre le point sur le double segment "pas de Cauchy/pas de Newton" intersecté avec la région de confiance.

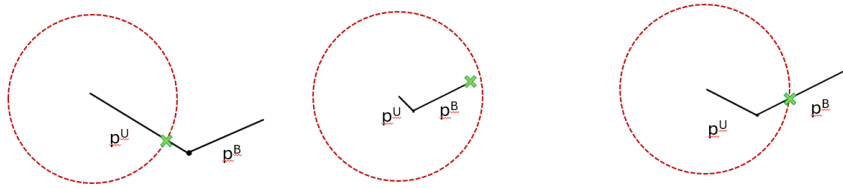


FIGURE 5 – Différents cas de figure du problème de minimisation avec la méthode Dogleg

Le premier cas ( $\|p^U\| > \Delta_k$ ) est représenté dans la figure (5) par la région de gauche, le deuxième cas ( $\|p^B\| \leq \Delta_k$ ) par la région du milieu et le dernier cas est la région de droite.

Cas 1 :  $\|p^U\| > \Delta_k$

L'intersection  $p^*$  entre la région de confiance et le pas de Cauchy est définie comme :

$$p^* = \frac{\Delta_k p^U}{\|p^U\|}$$

Autrement dit, le pas  $p^*$  est de même taille que le rayon  $\Delta_k$  mais dans la direction du pas de Cauchy.

Cas 2 :  $\|p^B\| \leq \Delta_k$

Le double segment étant contenu dans la région, le pas  $p^*$  est défini par le pas complet de Newton.

$$p^* = p^B$$

Cas 3 :  $\|p^U\| < \Delta_k$  et  $\|p^B\| > \Delta_k$

L'intersection  $p^*$  entre la région de confiance et le pas de Newton est définie comme :

$$p^* = p^U + \alpha(p^B - p^U) \quad | \quad \|p^U + \alpha(p^B - p^U)\| = \Delta_k$$

Autrement dit, le pas  $p^*$  est une combinaison linéaire du pas de Cauchy et du pas de Newton tel que ce pas soit dans la région de confiance.

### Implémentation de la méthode "Dogleg" en Matlab :

```

1  function [minmk]=Dogleg(xk,Grdfxk,Hk,Deltak)
2  %Appel :
3  % Entrees : xk --> centre de la region de confiance
4  %           Grdfxk --> gradient de f
5  %           Hk --> hessienne de f
6  %           Deltak --> rayon de la region de confiance
7  % Sorties : minmk --> minimum de la fonction mk (fonction approche de
8  %           f en la region de confiance de centre xk et de rayon
9  %           Deltak); autrement dit le "pas"
10
11 %Initialisation
12 x=xk;
13 p=0;
14 g=Grdfxk(x);
15 H=Hk(x);
16 p_B=-inv(Hk(x))*Grdfxk(x);
17 p_U=-(g'*g)/(g'*H*g)*g;
18
19 %Separation des 3 cas de la methode
20 if norm(p_B)<=Deltak %Pas de Newton dans la region
21     p=p_B;
22 elseif norm(p_B)>Deltak %Pas de Cauchy hors de la region
23     if norm(p_U)>Deltak
24         p=Deltak*p_U/norm(p_U);
25     else %Pas de Cauchy dans la region mais pas de Newton hors
26         a=p_U;
27         b=p_B-p_U;
28         tau=roots([norm(b)^2,2*(a'*b),norm(a)^2-Deltak^2]);
29         %resolution de norm(pu+t(pb-pu))^2=Deltak^2
30         t=max(tau);
31         p=p_U+t*(p_B-p_U);

```

```

32     end
33 end
34 minmk=p;
35 end

```

## 2. La méthode de minimisation dans un sous-espace à deux dimensions

La méthode Dogleg, bien qu'efficace, nécessite que la matrice  $H$  soit définie positive. Cependant, cette condition n'est pas toujours satisfaite, ce qui suppose des méthodes alternatives pour traiter les autres cas de figure. Pour traiter les cas où la matrice Hessienne n'est pas définie, il est crucial d'adopter une approche qui, certes, exploite les mêmes propriétés de la méthode précédente, mais avec une méthodologie différente. Contrairement à la méthode Dogleg qui cherche une solution uniquement le long du pas "Dogleg" (combinaison de  $p^U$  et  $p^B$ ), l'algorithme cherche dans tout le sous-espace engendré par ces deux pas.

La minimisation dans un sous-espace de dimension 2 consiste à limiter l'optimisation à un plan défini par deux directions significatives. Plutôt que de résoudre le problème d'optimisation dans l'espace complet, la méthode se restreint à un sous-espace de dimension 2 engendré par deux directions. Le vecteur de recherche  $p$  est alors exprimé comme une combinaison linéaire de ces deux directions. Ainsi,  $p$  s'écrit comme :  $\exists \alpha, \beta \mid p = \alpha d_1 + \beta d_2$ , où  $d_1$  et  $d_2$  sont les deux directions choisies.

Le problème (5) devient alors :

$$\min_p m(p) = f + \nabla f^T p + \frac{1}{2} p^T H p \mid \|p\| \leq \Delta_k \text{ et } p \in \text{Vect}(d_1, d_2) \quad (13)$$

### a. Choix des directions

Pour rappel, la direction du gradient est une direction de descente indiquant la direction dans laquelle la fonction diminue le plus rapidement. Une fraction de cette direction est utilisée pour le pas de Cauchy, dont la convergence a été prouvée dans la partie (3). La première direction  $d_1$  peut être remplacée par le gradient à des fins de convergence de la méthode.

La deuxième direction sera choisie après une analyse des solutions de 5.

**Théorème 7.** [2] Soient  $H \in \mathbb{R}^{n \times n}$  symétrique,  $\nabla f \in \mathbb{R}^n$  et  $\lambda > 0$ . Soit  $p^*$  la solution de (5). Posons  $\lambda_1$  la plus petite valeur propre de  $H$  et  $v_1$  son vecteur propre associé. Notons  $A^+$  l'inverse généralisé d'une matrice  $A$ . Alors :

- Si  $H$  est définie positive et  $\|H^{-1} \nabla f\| \leq \Delta$ , alors  $p^* = -H^{-1} \nabla f$
- Si  $\|H^{-1} \nabla f\| > \Delta$  alors  $\exists ! \alpha > 0 \mid \|(H + \alpha Id)^{-1}\| = \Delta$ ,  $p^* = -(H + \alpha Id)^{-1} \nabla f$
- Si  $\lambda_1 \leq 0$  et si  $\exists \alpha \geq -\lambda_1$  tel que  $\|H^{-1} \nabla f\| > \Delta$ , alors  $p^* = -(H + \alpha Id)^{-1} \nabla f$
- Sinon,  $\exists \varepsilon \in \mathbb{R} \mid \|(H - \lambda_1 Id)^+ \nabla f + \varepsilon v_1\| = \lambda$ , alors  $p^* = -(H - \lambda_1 Id)^+ \nabla f + \varepsilon v_1$

Démonstration. Admis. □

L'attention se tourne vers les propositions concernant le cas non définis. Il est clair que pour approcher une solution du problème (13), l'approximation de la valeur propre de  $H$  la plus petite est utile. La deuxième direction sera alors choisie comme :

$$d_2 = -(H + \alpha Id)^{-1} \nabla f \quad | \quad \alpha \in ]\lambda_1, 2\lambda_1] \quad (14)$$

avec  $\lambda_1$

Premièrement :

**Lemme 1.**  $H + \alpha Id$  est semi-défini positif lorsque  $\alpha \in ]\lambda_1, 2\lambda_1]$  avec  $\lambda_1 \leq 0$ . Dans le cas où  $\lambda_1 < 0$ , la matrice est définie positive.

*Démonstration.*  $H$  étant symétrique, on a par le théorème spectral :  $H = Q^T \Sigma Q$ , avec  $Q$  une matrice orthogonale composée des vecteurs propres de  $H$  et  $\Sigma$  une matrice diagonale composée des valeurs propres de  $H$ . Notons :

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{bmatrix}$$

avec  $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ , les  $n$  valeurs propres de  $H$ . Ainsi :  $H + \alpha Id = Q^T \Sigma Q + \alpha Id = Q^T (\Sigma + \alpha Id) Q$ .

Ceci donne que les éléments diagonaux de  $\Sigma$  sont strictement positifs. Puisque :  $\lambda_k + \alpha \geq \lambda_k + (-\lambda_1) \geq 0$  car  $-\lambda_1 \geq 0$  et  $-\lambda_1 \geq -\lambda_2 \geq \dots \geq -\lambda_n$ . D'où  $H + \alpha Id$  est semi-défini positif. Dans le cas où  $\lambda_1 < 0$ , les inégalités deviennent strictes et ainsi  $H$  est définie positive.  $\square$

Deuxièmement :

**Lemme 2.** [6] Soit  $\lambda \in \mathbb{R}$ ,  $p \in \mathbb{R}^n$  tel que  $p$  satisfait :

$$(H + \lambda Id)p = -\nabla f \quad (15)$$

et  $H + \lambda Id$  définie positive. Alors :

- Si  $\lambda = 0$  et  $\|p\| \leq \Delta$  alors  $p$  résout (5).
- Si  $\lambda \geq 0$  et  $\|p\| = \Delta$  alors  $p$  résout (5).

*Démonstration.* [6] Soit  $\lambda$  et  $p$  qui satisfont les conditions du lemme (15), alors :

$$f + \nabla f^T m + \frac{1}{2} m^T (H + \lambda Id) m \geq f + \nabla f^T p + \frac{1}{2} p^T (H + \lambda Id) p \quad | \quad \forall m \in \mathbb{R}^n$$

Ainsi :

$$f + \nabla f^T m + \frac{1}{2} m^T H m \geq f + \nabla f^T p + \frac{1}{2} p^T H p + \frac{\lambda}{2} (p^T p - m^T m) \quad (16)$$

D'où si  $\lambda = 0$ , alors  $f + \nabla f^T m + \frac{1}{2} m^T H m \geq f + \nabla f^T p + \frac{1}{2} p^T H p$  et comme  $\|p\| \leq \Delta$ , alors  $p$  minimise  $m$ .  $\square$

Autrement dit, les solutions du problème (5) sont proches des solutions du problème :

$$\phi(a) = \Delta \quad | \quad \phi(a) = \|(H + aId)^{-1} \nabla f\|$$

Pour résumer, si la matrice  $H$  est définie positive alors  $d_1 = -\nabla f$  et  $d_2 = -H^{-1}\nabla f$ . Autrement,  $d_1 = -\nabla f$  et  $d_2 = -(H + \alpha Id)^{-1}\nabla f$ .

## b. Déroulé de l'algorithme : minimisation dans un sous-espace de dimension 2

Le problème (13) devient :

$$\min_{\alpha, \beta} m(\alpha, \beta) = f + \nabla f^T (\alpha d_1 + \beta d_2) + \frac{1}{2} (\alpha d_1 + \beta d_2)^T H (\alpha d_1 + \beta d_2) \quad | \quad \|(\alpha d_1 + \beta d_2)\| \leq \Delta_k \quad (17)$$

D'où, sous forme matricielle :

$$\min_{\alpha, \beta} m(\alpha, \beta) = f + \alpha \nabla f^T d_1 + \beta \nabla f^T d_2 + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \alpha & \beta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1^T H d_1 & d_1^T H d_2 \\ d_2^T H d_1 & d_2^T H d_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} \quad (18)$$

Le minimum est ainsi calculé avec les techniques habituelles de la dérivée.

$$\begin{cases} \frac{\partial m}{\partial \alpha} = \nabla f^T d_1 + \alpha d_1^T H d_1 + d_1^T H d_2 = 0 \\ \frac{\partial m}{\partial \beta} = \nabla f^T d_2 + \alpha d_2^T H d_1 + d_2^T H d_2 = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{bmatrix} d_1^T H d_1 & d_1^T H d_2 \\ d_2^T H d_1 & d_2^T H d_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \nabla f^T d_1 \\ \nabla f^T d_2 \end{bmatrix}$$

Ainsi, si

$$A = \begin{bmatrix} d_1^T H d_1 & d_1^T H d_2 \\ d_2^T H d_1 & d_2^T H d_2 \end{bmatrix}$$

est inversible alors il suffit de résoudre :  $\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = A^{-1} \begin{bmatrix} \nabla f^T d_1 \\ \nabla f^T d_2 \end{bmatrix}$ . Dans le cas où  $A$  n'est pas inversible, une décomposition QR peut être utile pour la résolution car pour rappel, la décomposition QR permet de transformer une matrice en un produit de matrices orthogonales et triangulaires supérieures. Cela permet dès lors de faciliter les calculs en raison aux propriétés d'orthogonalité. Une fois cette étape résolue, l'algorithme à région de confiance initial (1) est utilisé pour mettre à jour les informations et itéré jusqu'au résultat.

## 3. Méthode de Steihaug

Contrairement aux méthodes vu précédemment qui nécessitent la résolution exacte d'un système linéaire, la méthode de Steihaug se base sur l'algorithme du gradient conjugué. C'est un algorithme itératif utilisé pour résoudre des systèmes linéaires avec matrices symétriques et définies positives. En effet, la méthode Dogleg et la méthode de réduction dans un espace vectoriel de dimension 2 reposent sur la résolution d'un système dépendant de la matrice  $H$ . Or, lorsque cette matrice est grande, le nombre de calculs augmente considérablement. L'idée étant de réduire ce coût, la méthode de Steihaug propose une approche alternative

pour trouver une solution approximative du point de Cauchy. Ainsi, au lieu de résoudre un système, la méthode utilisera des itérations successives afin de rechercher une direction de descente.

Contrairement à la méthode classique du gradient conjugué, l'approche de Steihaug présente quelques différences significatives. Elle se termine lorsque le point courant sort de la région de confiance ou lorsqu'elle rencontre une direction de courbure négative dans la matrice  $H$ , qui représente une indication d'augmentation de la fonction objectif dans cette direction.

### a. Le gradient conjugué ; cas linéaire

Le gradient conjugué est principalement utilisé pour résoudre des systèmes linéaires de la forme  $Ax = b$ , où  $A$  est une matrice symétrique définie positive. Il existe toutefois des méthodes de gradient conjugué pour des problèmes non-linéaires et qui sont abordés dans ([5]). Ces techniques sont des variantes des méthodes de descente à pas optimal, utilisant des directions de descente "A-conjuguées".

Soit le problème suivant :

$$\inf_{x \in \mathbb{R}^n} K(x) \quad | \quad K(x) = \frac{1}{2} \langle Ax, x \rangle - \langle b, x \rangle$$

$K$  étant fortement convexe, le problème de minimisation revient à résoudre :

$$\nabla K(x) = Ax - b = 0$$

Autrement dit, résoudre un système de la forme :  $Ax = b$ .

La définition mathématique de la méthode de pas optimal est la suivante :

$$u_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$$

où  $\alpha_k$  est le pas et  $p_k$  la direction de descente. Contrairement à la méthode avec pas fixe vu en partie I)1), le pas  $\alpha_k$  change à chaque itération. L'algorithme du gradient conjugué est ainsi construit de telle sorte que les directions de descente soient orthogonales pour le produit scalaire issu de  $A$  (ie.,  $\langle u, v \rangle = u^T A v$ ). Autrement dit, les gradients (en chaque point  $x_k$ ) de la fonctions  $K$  sont tous orthogonaux deux à deux.

$$\forall 0 \leq k < j, \quad \langle \nabla K(x_k), \nabla K(x_j) \rangle = 0$$

Le prochain théorème fait par du comportement du minimum de  $K$  dans le sous-espace affine dirigée par les vecteurs A-conjugué.

**Théorème 8.** [4] Soient  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  symétrique définie positive,  $b \in \mathbb{R}^n$  et  $K(x) = \frac{1}{2} \langle Ax, x \rangle - \langle b, x \rangle$ . Soient  $x_0 \in \mathbb{R}^n$  et une famille libre  $(p_i)_{0 \leq i \leq k}$  de  $k+1$  vecteurs A-conjugués, avec  $0 \leq k \leq n-1$ . Alors :

- Dans le sous-espace affine  $x_0 + \text{Vect}(p_0, \dots, p_k)$ ,  $K$  possède un unique point de minimum  $x_{k+1}$ .
- Le résidu associé  $r_{k+1} = -\nabla K(x_{k+1})$  est orthogonal à  $\text{Vect}(p_0, \dots, p_k)$  pour  $\langle \cdot, \cdot \rangle$ .
- Si  $x_k$  est le point de minimum de  $K$  sur  $x_0 + \text{Vect}(p_0, \dots, p_{k-1})$ , alors  $x_{k+1}$  est le point de minimum de  $K$  sur la droite affine  $x_k + \text{Vect}(p_k)$ .

Démonstration. Admis. □

De manière formelle, le premier point explique que parmi les points de la forme :  $x_0 + \sum_{i=0}^k \alpha_i p_i$ , il en existe un seul où la fonction  $K$  atteint sa valeur minimale. Autrement dit, à chaque étape de la méthode, il y a un point unique qui minimise  $K$  dans l'espace des combinaisons linéaires des directions de descente construit par l'algorithme. Le deuxième point indique que le résidu est orthogonal à l'espace engendré par les vecteurs A-conjugué, ce qui indique que la direction de descente a été choisie de manière optimale. Enfin, le dernier point indique qu'à chaque étape de la méthode, la solution progresse vers le minimum de la fonction  $K$  en explorant une nouvelle direction, tout en capitalisant sur les progrès réalisés dans les directions précédentes. Cela se fait en ajoutant une dimension de recherche à chaque étape tout en maintenant l'efficacité des directions de descente A-conjuguées.

Ainsi, l'algorithme du gradient conjugué construit itérativement une famille de vecteurs A-conjugués par orthogonalisation de Schmidt sur les directions de plus forte descente. Autrement dit, l'idée générale de l'algorithme est de construire les directions  $p_k$  en orthogonalisant les directions de plus forte descente de  $K$  :  $r_k = -\nabla K(x_k)$ , où  $x_k$  minimise  $K$  sur  $x_0 + \text{Vect}(p_0, \dots, p_{k-1})$ .

#### Procédé de l'algorithme :

La méthode est construite de manière itérative et s'arrête quand l'un des résidus  $r_k$  vaut 0, ceci impliquant que le  $x_k$  trouvé est optimale. L'initialisation se fait en posant :

$$r_0 = p_0 = -\nabla K(x_0) \quad (19)$$

avec  $r_0$  le résidu de la première itération,  $p_0$  la première direction de descente et  $x_0$  le point de départ choisi arbitrairement.  $x_{k+1}$  est construit selon la formule du gradient optimal :  $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$  avec  $\alpha_k = \frac{r_k^T r_k}{p_k^T A p_k}$ .  $\alpha_k$  est de cette forme car il est construit de telle sorte à minimiser  $K(x_{k+1}) = K(x_k + \alpha_k p_k)$ . Le résidu est ensuite actualisé de la manière suivante :

$$r_{k+1} = Ax_{k+1} - b = A(x_k + \alpha_k p_k) - b = (Ax_k - b) + A\alpha_k p_k = r_k + \alpha_k A p_k \quad (20)$$

Finalement, la direction  $p_k$  est actualisée comme suit :

$$p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_{k+1} p_k$$

avec  $\beta_{k+1} = \frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{r_k^T r_k}$ .  $p_{k+1}$  est construit de cette manière afin de préserver l'orthogonalité avec les vecteurs  $p_k$  précédent ( $p_{k+1}^T A p_k = 0$ )

### b. Révision de l'algorithme du Gradient conjugué pour la Méthode de Steihaug

La méthode de Steihaug est une approche qui étend les principes du gradient conjugué. Alors que le gradient conjugué se concentre sur la recherche de directions de descente efficaces dans l'espace de recherche, la méthode de Steihaug prend en compte les contraintes et les conditions de recherche non linéaires. Autrement dit, elle prend en compte la contrainte liée à la région de confiance et à la nature quadratique de la fonction  $m$ . En prenant :  $x = p$ ,  $A = H$ ,  $b = -\nabla f$  et  $p = d$  de l'algorithme du Gradient conjugué précédent, la méthode Steihaug se distingue par deux critères d'arrêt de convergence.



**Données :**  $x_0$

**Résultat :**  $x_k$

```
1 début
2    $r_0 = Ax_0 - b$ 
3    $p_0 = -r_0$ 
4    $k = 0$ 
5   Tant que  $r_k \neq 0$ 
6      $\alpha_k = \frac{r_k^T r_k}{p_k^T A p_k}$ 
7      $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$ 
8      $r_{k+1} = r_k + \alpha_k A p_k$ 
9      $\beta_{k+1} = \frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{r_k^T r_k}$ 
10     $p_{k+1} = -r_{k+1} + \beta_{k+1} p_k$ 
11     $k = k + 1$ 
12  Fin Tant que
13 fin
```

**Algorithme 2 :** Algorithme du Gradient conjugué linéaire [5]

**Données :**  $\varepsilon > 0$

**Résultat :**  $x_k$

```
1 début
2    $r_0 = \nabla f$ 
3    $d_0 = -r_0$ 
4    $p_0 = 0$ 
5    $k = 0$ 
6   Si  $\|r_0\| < \varepsilon$  Alors L'algorithme s'arrête
   et renvoie  $p = p_0$ 
7   Tant que  $k < n$ 
8     Si  $d_j^T H d_j \leq 0$ 
9     Alors Trouver  $\tau$  tel que  $p = p_j + \tau d_j$ 
      minimise (5) et tel que  $\|p\| = \Delta$ 
10    L'algorithme s'arrête et renvoie  $p$ 
11     $\alpha_j = \frac{r_j^T r_j}{d_j^T H d_j}$ 
12     $p_{j+1} = p_j + \alpha_j d_j$ 
13    Si  $\|p_{j+1}\| \geq \Delta$ 
14    Alors Trouver  $\tau \geq 0$  tel que
       $p = p_j + \tau d_j$  avec  $\|p\| = \Delta$ 
15    L'algorithme s'arrête et renvoie  $p$ 
16     $r_{j+1} = r_j + \alpha_j H d_j$ 
17    Si  $\|r_{j+1}\| < \varepsilon \|r_0\|$ 
18    Alors L'algorithme s'arrête et renvoie
       $p = p_{j+1}$ 
19     $\beta_{j+1} = \frac{r_{j+1}^T r_{j+1}}{r_j^T r_j}$ 
20     $d_{k+1} = r_{j+1} + \beta_{j+1} d_j$ 
21     $k = k + 1$ 
22  Fin Tant que
23 fin
```

**Algorithme 3 :** Algorithme du Gradient conjugué de Steihaug

Le premier "Si" en rouge met en évidence une courbure nulle ou négative le long de  $H$ , traduisant une augmentation de la fonction  $m$  le long de la direction de recherche, ce qui est contraire à l'objectif de minimisation. Le deuxième "Si" en rouge sert à arrêter l'algorithme lorsque le pas  $p_{j+1}$  sort de la région de confiance.

De plus, le choix de l'itération de  $p_0$  à 0 entraîne que  $p_1$  vaut le point de Cauchy :  $p_1 = \alpha_0 d_0 = \frac{r_0^T r_0}{d_0^T d_0} d_0 = -\frac{\nabla f^T \nabla f}{\nabla f^T H \nabla f} \nabla f = p^C$ . En résulte la convergence de l'algorithme grâce à la diminution de  $m$  à chaque itération (cf. 3). Par ailleurs :

**Théorème 9.** [5] Soient  $p_0, \dots, p_k$  générés par l'algorithme précédent (3). Alors :

$$\Delta \geq \|p\|_2 > \dots > \|p_{j+1}\|_2 > \|p_j\|_2 > \dots > \|p_0\|_2 = 0$$

*Démonstration.* Soit  $p_j$  généré par l'algorithme précédent (3) et soit  $j \geq 1$ , alors  $p_j$  devient :

$$p_j = p_0 - \sum_{i=0}^{j-1} \alpha_i d_i = \sum_{i=0}^{j-1} \alpha_i d_i$$

car  $p_0 = 0$  par hypothèse d'initialisation de l'algorithme. En multipliant par  $r_n$ , l'équation se réécrit :

$$p_j^T r_j = \sum_{i=0}^{j-1} \alpha_i d_i^T r_j = 0$$

car la méthode construit les  $d_j$  de manière à ce qu'ils soient orthogonaux aux résidus  $r_j$ . Ainsi :  $p_j^T r_j = 0 \quad \forall j \geq 1$ .

De plus, l'inégalité suivante est démontrée par récurrence :  $p_j^T d_j > 0$ .

$$p_1^T d_1 = (p_0 + \alpha_0 d_0)^T (r_1 + \beta_1 d_0) = (\alpha_0 d_0)^T r_1 + (\alpha_0 d_0)^T (\beta_1 d_0) = \alpha_0 \beta_1 d_0^T d_0 > 0$$

car  $p_0 = 0$  et  $(\alpha_0 d_0)^T r_1 = 0$  car  $d_0$  est orthogonal à  $r_1$ . Soit maintenant l'hypothèse de récurrence :  $p_k^T d_k > 0$ , supposé vraie jusqu'à un rang  $j$ . L'objectif est de montrer que la propriété reste vraie pour  $j + 1$ .

$$\begin{aligned} p_{j+1}^T d_{j+1} &= p_{j+1}^T (r_{j+1} + \beta_{j+1} d_j) \\ &= \beta_{j+1} p_{j+1}^T d_j \\ &= \beta_{j+1} (p_j + \alpha_j d_j)^T d_j \\ &= \beta_{j+1} (p_j^T d_j + \alpha_j d_j^T d_j) > 0 \end{aligned}$$

car  $p_{j+1}^T r_{j+1} = 0$ . Et par hypothèse de récurrence il y a :  $p_j^T d_j > 0$ ,  $d_j^T d_j = \|d_j\|^2 > 0$  et  $\beta_{j+1} = \frac{\|r_{j+1}\|^2}{\|r_{j+1}\|^2} > 0$ . Il reste donc à déterminer le signe de :  $\alpha_j = \frac{\|r_j\|^2}{d_j^T H d_j}$ . Quand  $H$  est définie positive, l'inégalité  $d_j^T H d_j > 0$  est automatiquement vraie, sinon le signe de  $\alpha_j$  dépend de  $d_j^T H d_j$ . Généralement ce signe est négatif mais ici, l'algorithme est construit de telle sorte que si cela est négatif, la méthode s'arrête. Dans le cas contraire,  $\alpha_i$  est construit. D'où la positivité du résultat. Ainsi, l'inégalité est toujours vraie :  $p_j^T d_j > 0 \quad \forall j \geq 1$ . Enfin, lorsque les deux critères d'arrêt (en rouge) sont vérifiés,  $p$  est construit de telle sorte que  $\|p\| = \Delta$ , c'est-à-dire,  $\|p\|$  a la plus grande largeur possible. Dans les autres cas,  $p_{j+1} = p_j + \alpha_j d_j$  :

$$\|p_{j+1}\|^2 = (p_j + \alpha_j d_j)^T (p_j + \alpha_j d_j) = \|p_j\|^2 + 2\alpha_j p_j^T d_j + \alpha_j^2 \|d_j\|^2 > \|p_j\|^2$$

D'où le résultat du théorème :

$$\Delta \geq \|p\|_2 > \dots > \|p_{j+1}\|_2 > \|p_j\|_2 > \dots > \|p_0\|_2 = 0$$

□

Ceci implique qu'il est acceptable que l'algorithme s'arrête lorsque la frontière de la région de confiance est atteinte car les itérations suivantes sortiront de celle-ci, et donc la contrainte liée à la région de confiance ne sera plus respectée.

En conclusion, l'analyse de la méthode de Steihaug une adaptation aux matrices Hessiennes celles-ci pouvant ne pas être définies positives. Elle exploite les propriétés des directions de descente pour assurer

la convergence et le respect des contraintes tout en utilisant des techniques de troncature et en ajustant les itérations lorsque des directions de courbure négative sont rencontrées. C'est un bon moyen de pallier au

### III. Applications de la méthode Dogleg

Après avoir étudié les méthodes par région de confiance dans un cadre théorique, elles seront maintenant appliquées à des cas concrets. En particulier, la méthode Dogleg, implémentée en MATLAB, sera utilisée pour résoudre des problèmes concrets d'optimisation réels. Cette transition de la théorie à la pratique permettra d'évaluer l'efficacité et la robustesse de cette technique.

#### 1. Implémentation des Algorithmes et Applications Pratiques

En reprenant les concepts décrits dans les parties précédentes, l'implémentation de l'algorithme général peut maintenant être effectuée comme suit :

```
1 function [xk,k] = region_de_confiance(xk, f, Grdfxk, Hk, Delta0, Deltamax,
2 bornemax,tol)
3 % Appel :
4 % Entrees : xk --> centre de la region de confiance
5 %           f --> fonction objectif
6 %           Grdfxk --> gradient de f
7 %           Hk --> hessienne de f
8 %           Delta0 --> rayon de la premiere region de confiance
9 %           Deltamax --> taille maximal de la region de confiance
10 %          bornemax --> borne maximum d'iteration
11 % Sorties : minmk --> minimum de la fonction mk (fonction approche de f en
12 %              la region de confiance de centre xk et de rayon
13 %              Deltak)
14
15 % Initialisation
16 k=0;
17 eta_1 = 0.25; %Valeur seuil pour le critere de performance
18 eta_2=0.75;
19 Deltak=Delta0; %initialisation de la region de confiance
20 convergence=0; %initialisation de convergence, cela vaudra 1 quand
21 %le minimum trouver passera sous le seuil de tolerance; arret algo
22 minprecedent=f(xk);
23 while k < bornemax && convergence==0
24     % Calcul du minimum dans la region de confiance avec la methode Dogleg
25     minmk = Dogleg(xk,Grdfxk,Hk,Deltak);
26     mk0=f(xk);
27     mkmink=f(xk)+Grdfxk(xk)'+minmk+(1/2)*(minmk)'*Hk(xk)*minmk;
28     rho_k=(f(xk) - f(xk+minmk)) / (mk0-mkmink); %performance
29     if rho_k<eta_1
30         Deltak=1/4*Deltak;
31     end
32     if (rho_k>eta_2)&&(norm(minmk)==Deltak)
33         Deltak=min(2*Deltak,Deltamax);
34     else
```

```

35     Deltak=Deltak;
36 end
37 if rho_k>0
38     xk=xk+minmk;
39 else
40     xk=xk;
41 end
42 if abs(f(xk+minmk)-minprecedent)<tol
43     convergence=1;
44 end
45 k=k+1;
46 minprecedent=f(xk+minmk);
47 end
48 end

```

### a. Exemple 1

Pour le premier exemple, l'algorithme sera testé sur la fonction vu dans la première partie (b).

$$f(x,y) = 100x^2 + y^2$$

Pour rappel, la méthode Dogleg est implémenté dans la partie II)1).

```

1 f=@(x) 100*x(1)^2 + x(2)^2;
2 Gradf=@(x) [200*x(1);2*x(2)];
3 Hessf=@(x) [200,0;0,2];
4 x0=[1;1];
5 Delta0 = 1;
6 tol=0.0001;
7 [min,k]=region_de_confiance4(x0,f,Gradf,Hessf,Delta0,10,10,tol)

```

Pour ce premier test, l'initialisation se fait avec  $(x,y) = (1,1)$  et avec une région de confiance de rayon égale à 1.

Le résultat est alors :  $[\min, k] = [[0, 0], 4]$ . Autrement dit, le minimum trouvé en 4 itérations est  $(x, y) = (0, 0)$ . Dans ce cas précis, le résultat est exact.

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial x}(x, y) = 200x^2 = 0 \\ \frac{\partial f}{\partial y}(x, y) = 2y = 0 \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} x = 0 \\ y = 0 \end{cases}$$

Ainsi, contrairement à la méthode du gradient à pas fixe utilisé dans la première partie, l'algorithme de région de confiance utilisé avec la méthode Dogleg converge rapidement (4 itérations) et exactement.

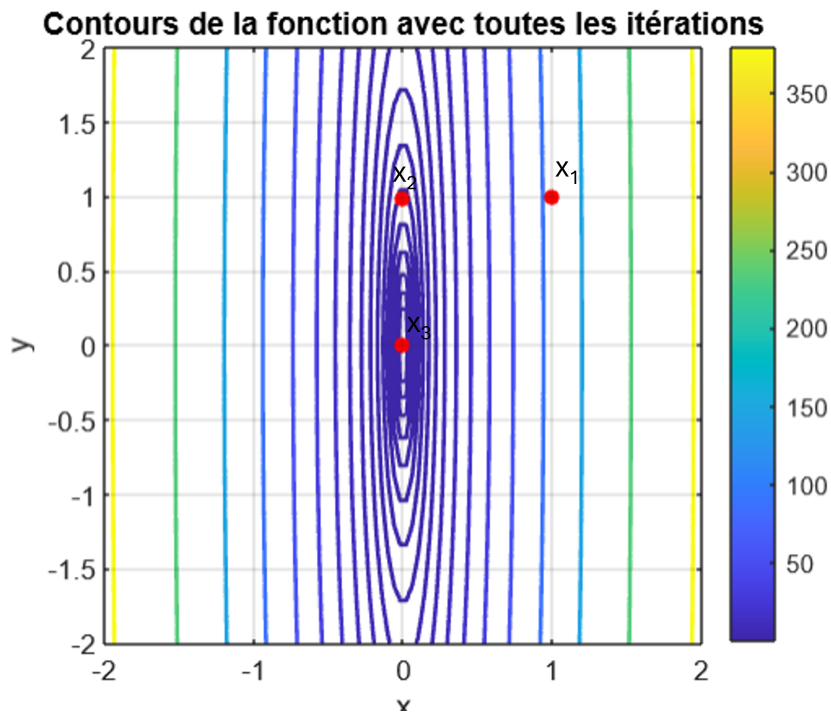


FIGURE 6 – Aperçu des itérations par la méthode Dogleg de la fonction  $100x^2 + y^2$

Soit maintenant la méthode de Newton :

$$u_0 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$u_1 = u_0 - \nabla^2 f(u_0) \nabla f(u_0) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Ainsi, cette méthode converge aussi. Pour rappel, la méthode Dogleg revient en la méthode de Newton pour de grand pas (par construction).

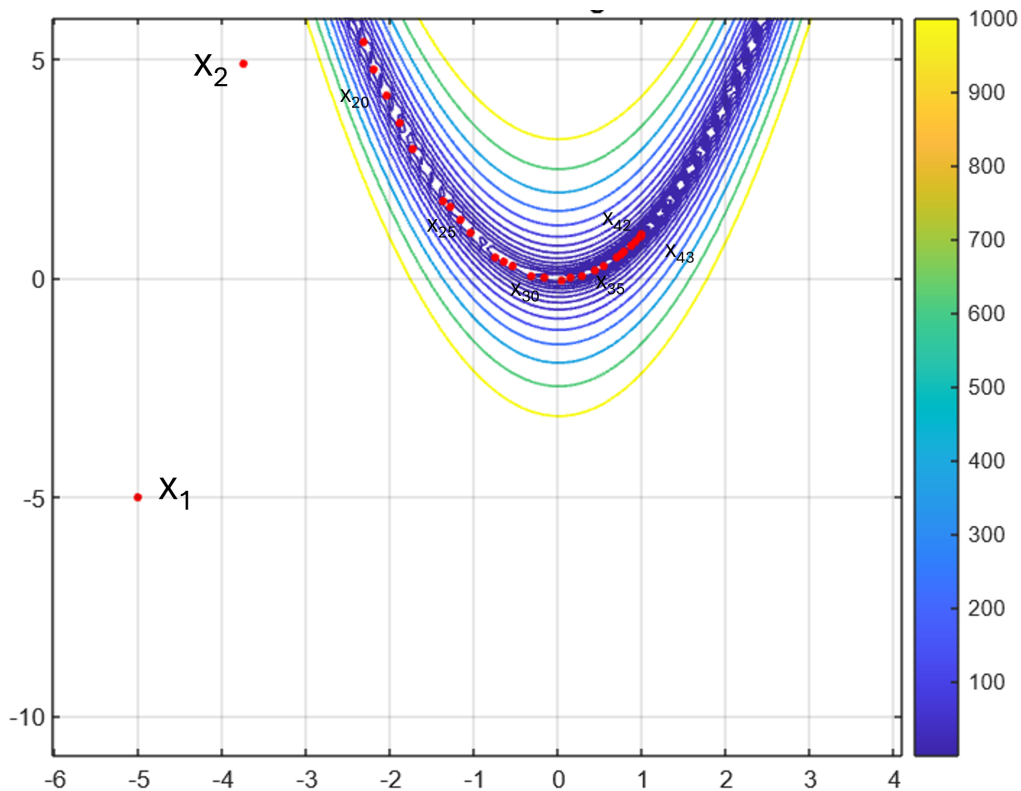


FIGURE 7 – Aperçu des itérations par la méthode Dogleg de la fonction de Rosenbrock

## b. Exemple 2

Pour ce deuxième exemple, le test sera effectué sur la fonction de Rosenbrock. C'est une fonction couramment testée dans les problèmes d'optimisation.

$$f(x,y) = (1-x)^2 + 100(y-x^2)^2$$

Sa structure particulière en fait un bon test pour l'optimisation. En effet, la fonction possède un minimum global, atteignable en un point spécifique au creux d'une vallée étroite et allongée comportant des plateaux où le gradient est proche de zéro.

```

1 R = @(x) (1 - x(1)).^2 + 100 * (x(2) - x(1).^2).^2;
2 GradR=@(x) [-2*(1 - x(1)) - 400*x(1)*(x(2) - x(1).^2); 200*(x(2) - x(1).^2)];
3 HessR= @(x) [2 - 400*x(2) + 1200*x(1)^2, -400*x(1); -400*x(1), 200];
4 x0=[-5;-5];
5 Delta0 = 10;
6 tol=0.0001;
7 [min,k]=region_de_confiance4(x0,R,GradR,HessR,Delta0,10,100,tol)

```

Le résultat ici est :  $[min,k] = [[1, 1], 43]$  Application par la méthode de Newton :

```

1 function [uk, iter,k] = newton(u0, G, H, kmax, tol)
2     uk = u0;
3     iter = uk';
4     for k = 1:kmax

```

```

5      delta = -inv(H(uk)) * G(uk);
6      uk = uk + delta;
7      iter = [iter; uk'];
8      if norm(G(uk)) < tol
9          break;
10     end
11 end
12 end

```

Le bon résultat est trouvé rapidement puisque l'algorithme s'effectue en 5 itérations.

$$\begin{aligned}
 u_0 &= \begin{bmatrix} -5 \\ -5 \end{bmatrix} \\
 u_1 &= \begin{bmatrix} -4.999 \\ 24.99 \end{bmatrix} \\
 u_2 &= \begin{bmatrix} 0.9988 \\ -34.9760 \end{bmatrix} \\
 u_3 &= \begin{bmatrix} 0.9988 \\ 0.9976 \end{bmatrix} \\
 u_4 &= \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

Comparé au premier exemple, l'algorithme a convergé en plus d'itérations (43), bien qu'en terme computationnel le temps a été très rapide (1 seconde). Cela suggère que la méthode est plus efficace que d'autre mais pourrait avoir des limites face à des fonctions plus complexe. Quant à la méthode de Newton, elle converge plus rapidement que le Dogleg, ainsi la mise à jour de la région de confiance est inutile lorsque la méthode de Newton fonctionne en peu d'étape.

### c. Exemple 3 :

Pour ce troisième exemple, le test sera effectué sur la fonction suivante :

$$f(x, y) = x^3 - 3xy^2$$

Le minimum (locale) se trouve en (0,0) :

$$f'(x, y) = 0 \iff \begin{bmatrix} 3x^2 - 3y^2 \\ -6xy \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \iff x = y = 0$$

Les implémentations donnent :

```

1 f = @(x) x(1)^3 - 3*x(1)*x(2)^2;

```



```

2 G = @(x) [3*(1)^2-3*x(2)^2;-6*x(1)*x(2)];
3 Hf=@(x) [6*x(1), -6*x(2); -6*x(2), -6*x(1)];
4 u0=5;
5 tol=10^-6;
6 kmax=50;
7 [x,k]=region_de_confiance4(u0, f, G, Hf, 6, 10, 100,tol)
8 [uk, iter,k] = newton(u0, G, Hf, kmax, 10^-6)

```

Le résultat obtenu est :  $[x,k] = [[0.0142, 19]$ , autrement dit, l'algorithme converge bien vers un minimum (0). En revanche, la méthode de Newton diverge puisque l'algorithme ne converge pas ( $u_50 = [90, 0]$ ). Ainsi, la méthode de Newton voit ses limites apparaître dans des exemples la où la méthode dogleg s'adapte grâce à la mise à jour de la région de confiance.

## 2. Application à un cas concret

Dans cette étude de cas concret, la méthode de région de confiance a été employée pour résoudre un problème de régression linéaire sur un jeu de données réelles. La régression linéaire est une technique couramment utilisée en analyse de données, permettant de modéliser la relation entre une variable dépendante et une ou plusieurs variables explicative. Les données de cette étude représentant les résultats d'un examen (sur 100) de 25 élèves en fonction de leur temps de révision (en heure). La méthode de région de confiance avec une résolution type Dogleg a été utilisée pour minimiser l'erreur quadratique entre les valeurs observées et celles prédites par le modèle linéaire. Cette approche a permis d'obtenir des coefficients de régression optimaux, tout en assurant la robustesse et l'efficacité de la solution obtenue.

### Définition du modèle :

La régression linéaire a pour but de trouver une droite ajustée au nuage de points de données  $y$  en fonction de données  $x$ . Ainsi, l'ajustement affine peut se traduire par l'équation suivante :

$$y = \beta_0 + \beta_1 * x + \varepsilon$$

avec  $y = (y_1, \dots, y_n)$ , la variable à expliquer,  $x = (x_1, \dots, x_n)$ , la variable variable explicative,  $\varepsilon$  le résidu d'erreur et  $\beta_0$  et  $\beta_1$  les coefficient de la droite affine. L'objectif est de trouver les coefficients  $\beta_0$  et  $\beta_1$  qui minimisent l'erreur quadratique moyenne entre les valeurs prédites par le modèle et les valeurs observées de la variable dépendante.

Le problème peut être exprimé par la fonction suivante :

$$f(\beta) = \sum_{i=1}^n (y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i))^2$$

avec  $\beta = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{bmatrix}$ . Le gradient de cette fonction est :

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial \beta_0} = \sum_{i=1}^n -2(y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i)) \\ \frac{\partial f}{\partial \beta_1} = \sum_{i=1}^n -2(y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i))x_i \end{cases}$$

Enfin, la hessienne de  $f$  est :

$$\begin{bmatrix} 2n & \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n x_i^2 \end{bmatrix}$$

La méthode Dogleg est donc applicable car la matrice Hessienne est définie positive. En effet, le mineur de la Hessienne est strictement positif ( $2n > 0$ ) et :

$$2n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left( \sum_{i=1}^n x_i \right)^2 \geq 2 \left( \sum_{i=1}^n x_i \right)^2 - \left( \sum_{i=1}^n x_i \right)^2 = \left( \sum_{i=1}^n x_i \right)^2 > 0$$

Autrement dit, la positivité du déterminant implique que tous les mineurs principaux de la Hessienne sont également positifs.

### Application de l'algorithme à région de confiance (Dogleg)

```

1 x=[2.5,5.1,3.2,8.5,3.5,1.5,9.2,5.5,8.3,2.7,7.7,5.9,4.5,3.3,1.1,8.9,2.5,1.9,
2 6.1,7.4,2.7,4.8,3.8,6.9,7.8]
3 y=[21,47,27,75,30,20,88,60,81,25,85,62,41,42,17,95,30,24,67,69,30,54,35,76,
4 86]
5 % Parametres de la region de confiance
6 Delta0 = 0.1;
7 Deltamax = 1.0;
8 bornemax = 100;
9 tol = 1e-6;
10 beta=[mean(y);(y(end)-y(1))/(x(end)-x(1))];
11
12 f=@(beta)sum((y-(beta(1)+beta(2)*x)).^2);%f
13 grad=@(beta)[-2*sum(y-(beta(1)+beta(2)*x)); ...
14 ... -2*sum((y-(beta(1)+beta(2)*x)).*x)];%grad
15 n=length(x);
16 H=@(beta)[2*n,2*sum(x);2*sum(x),2*sum(x.^2)];%hess
17
18 % Appel de la fonction region de confiance
19 [xk_opt,k]=region_de_confiance(beta,f,grad,H,Delta0,Deltamax,bornemax,tol)

```

$x$  est le vecteurs des données "temps de révision (en heures)" et  $y$  le vecteur des données "notes de l'examen (sur 100)".

Le résultat obtenu est :  $\beta = [2.4837, 9.7758]$ . Autrement dit, la droite de régression linéaire de ces points est :  $y = 2.4837 + 9.7758x$ . Ce qui donne de manière graphique :

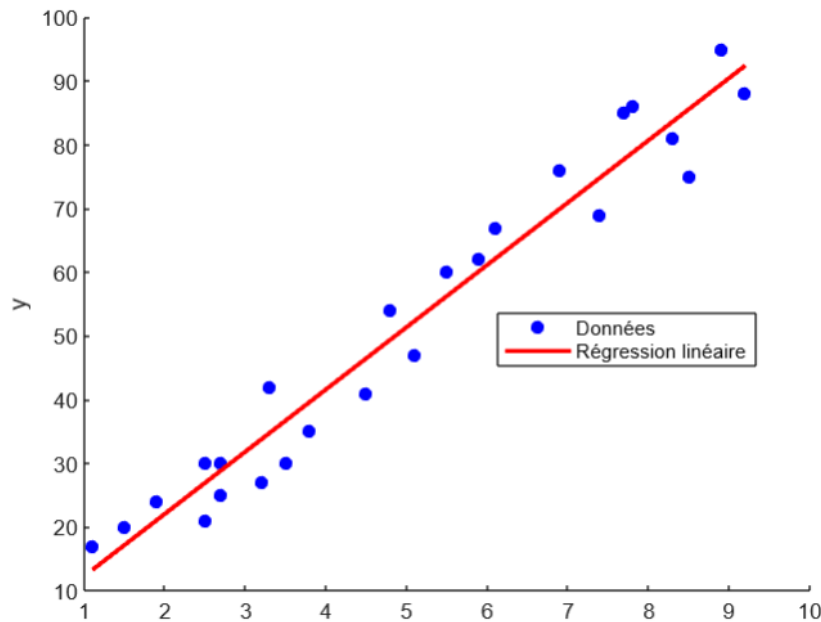


FIGURE 8 – Représentation des données et de la droite de régression linéaire calculé par l'algorithme à région de confiance

À l'aide du logiciel R, les coefficients sont comparés et montrent des résultats similaires.

```
Call:
lm(formula = y ~ x)

Coefficients:
(Intercept)      x 
    2.484      9.776
```

FIGURE 9 – Résultat des coefficients de régression à partir d'un logiciel (R)

Cependant, les résultats ont été trouvés en 70 itérations, ce qui reste raisonnable en terme de temps de calculs (moins de 1 secondes) mais qui pourrait être problématique dans des problèmes où la Hessienne est grande.

### 3. Limites de la méthode

La principale limite de la méthode Dogleg, discutée précédemment, est son inadéquation pour des matrices Hessiennes  $H$  qui ne sont pas définies positives. Cette limitation est cruciale car, dans de nombreux problèmes d'optimisation du monde réel, la Hessienne peut ne pas être définie positive, ce qui rend l'application de la méthode Dogleg inefficace ou inappropriée.

En outre, il est important de noter que les tests effectués jusqu'à présent ont été réalisés en tenant compte de cette limitation bien connue. Cependant, au-delà de cette contrainte évidente, il existe des problématiques plus sous-jacentes associées à la méthode Dogleg qui méritent également d'être explorées. Ces problématiques incluent, par exemple, la difficulté à gérer des fonctions avec de multiples minima locaux.

Soit  $f(x) = x^2 - 2\cos(2\pi x) + 5x + 10$ . La particularité de cette fonction est la présence de plusieurs minima locaux dans un petit périmètre

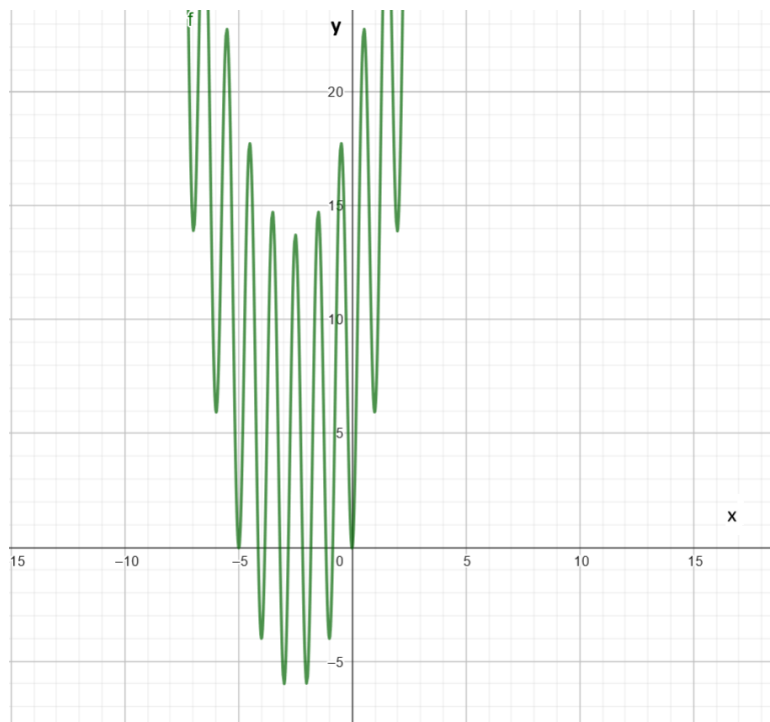


FIGURE 10 – Représentation graphique de la fonction  $f(x) = x^2 - 10\cos(2\pi x) + 10 + 5x$

```

1 f=@(x) x^2-10*cos(2*pi*x)+10+5*x;
2 Grdfxk=@(x) 2*x+sin(2*pi*x)*2*pi+5;
3 Hf=@(x) 2+4*pi^2*cos(2*pi*x);
4 tol=10^-6;
5 Bornemax=10;
6 Deltamax=20;
7 [m,k]=region_de_confiance4(x0,f,Grdfxk,Hf,Delta0,Deltamax,Bornemax,tol)

```

Pour ce test, l'algorithme a été initialisé avec différentes valeurs de départ et différentes valeurs de rayon de confiance, voici les résultats :

| $\Delta_0 \backslash x_0$ | -10   | -7.2  | -5    | -2.1  | -0.2  | 0     | 0.3  | 5    |
|---------------------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|------|------|
| 0.01                      | -9.97 | -6.98 | -4.99 | -2.03 | -0.18 | -0.01 | 0.55 | 4.97 |
| 0.1                       | -9.95 | -6.9  | -4.97 | -2.01 | -0.1  | -0.02 | 0.6  | 4.95 |
| 1                         | -9.94 | -3.26 | -5    | -2.01 | 0.1   | 0     | 2.63 | 4.94 |
| 5                         | -10   | -6.12 | -5    | -2.01 | -0.1  | 0     | 1.43 | 5    |

Il se déduit des résultats que l'algorithme converge vers des minimaux locaux car selon l'initialisation, la méthode converge vers différentes valeurs. Pour des initialisations proches des minimaux, la taille du rayon n'influe pas sur la convergence. En revanche pour un point comme 0.3 qui est près d'un maximum local, la taille du rayon influe sur la valeur de la convergence. Quand bien même ce résultat, aucune initialisation (non proche du point de minima global) ne permet à l'algorithme de tendre vers le minimum global. L'influence de l'initialisation joue alors un grand rôle pour des fonctions qui admettent plusieurs extrema locaux.

## Conclusion

Les méthodes traditionnelles d'optimisation, bien qu'efficace dans de nombreux cas, présentent certaines limitations qui peuvent entraver leur performance dans des contextes complexes. La nécessité d'explorer d'autres manières d'aborder une problématique s'impose pour répondre à ces limitations. Les méthodes par région de confiance apparaissent alors comme une alternative de part leur approche différente résidant dans la manière de décomposer le problème. Contrairement aux méthodes standards qui explore le domaines des solutions dans son entièreté, les méthodes par région de confiance subdivise le problème initial. Réduire le champ de recherche à une région de confiance permet de gérer efficacement la complexité des fonctions, notamment les changements abrupts de direction ou les points non définis. En limitant l'exploration à cette région restreinte, les méthodes d'optimisation peuvent mieux s'adapter aux variations locales et éviter les pièges potentiels posés par la non-différentiabilité ou les discontinuités de la fonction.

Les principaux résultats obtenus démontrent que les méthodes par région de confiance, incluant les approches telles que la méthode Dogleg ou Steihaug, offrent une flexibilité et une robustesse accrues par rapport aux méthodes traditionnelles. En particulier, l'application de la méthode Dogleg a permis d'illustrer son efficacité dans des scénarios pratiques de recherche de droite de régression linéaire pour un jeu de donnée concret. Cette techniques a aussi pu répondre là où les méthodes traditionnelles comme la méthode du gradient n'ont pas pu trouvé de solution.

Ces résultats confirment que les méthodes par région de confiance peuvent surmonter certaines des limitations lié aux méthodes standards, notamment en terme de convergence lente. Cependant, l'analyse des applications pratiques a également révélé la sensibilité de l'algorithme avec différentes initialisations pour des fonctions à plusieurs extrema locaux.

En conclusion, les méthodes par région de confiance offrent une amélioration des approches standards, en permettant d'augmenter l'efficacité de celle-ci de part la manière d'aborder une problématique. Cependant, la méthode ne répond pas infailliblement à toutes les exigences qu'un problème d'optimisation peut apporter comme la gestion de contraintes lié à des problèmes concrets ou la sensibilité aux paramètres initiaux. En effet, il n'existe pas de solution universelle ni de méthode toute faite qui garantisse un succès systématique lorsqu'il s'agit d'approcher une solution. Chaque problème est unique, avec ses propres complexités et spécificités. Ainsi, l'adaptation judicieuse des méthodes d'optimisation en fonction des caractéristiques particulières de chaque situation devient essentielle.

La diversité des méthodes disponibles offre la flexibilité nécessaire pour choisir et appliquer des approches adaptées aux dimensions de l'espace de recherche, à la nature de la fonction, ainsi qu'aux exigences spécifiques de convergence. En conséquence, la clé du succès réside dans la capacité à sélectionner et à ajuster les techniques d'optimisation de manière à maximiser efficacement les résultats tout en répondant aux objectifs et aux contraintes spécifiques de chaque problème.

## Références

- [1] Fabian BASTIN. *Fonctions à plusieurs variables, Optimisation sans contraintes, Méthodes de région de confiance*. Présentation PowerPoint. URL : [http://www.slashbin.net/nlp/nonconstraint\\_regionsconfiance.pdf](http://www.slashbin.net/nlp/nonconstraint_regionsconfiance.pdf).
- [2] Richard H BYRD, Robert B SCHNABEL et Gerald A SHULTZ. « Approximate solution of the trust region problem by minimization over two-dimensional subspaces ». In : *Mathematical programming* 40.1 (1988), p. 247-263.
- [3] Samuel GOYETTE. « FACULTÉ DES SCIENCES UNIVERSITÉ DE SHERBROOKE ». In : ().
- [4] Bellet J.B. *Optimisation ; Optimisation sans contrainte ; cours M1-Maths*. Cours.
- [5] Jorge NOCEDAL et Stephen J WRIGHT. *Numerical optimization*. Springer, 1999.
- [6] DC SORENSEN. « Newton's method with a model trust region modification : SIAM Journal on Numerical Analysis ». In : (1982).

## Table des figures

|     |  |    |
|-----|--|----|
| 1.  | Exemple d'une région de confiance . . . . .  | 7  |
| 2.  | Descente de type région de confiance . . . . .   | 8  |
| 3.  | Représentation du Pas de Cauchy . . . . .  | 11 |
| 4.  | Construction du pas de la méthode Dogleg . . . . .   | 16 |
| 5.  | Différents cas de figure du problème de minimisation avec la méthode Dogleg . . . . .                                      | 17 |
| 6.  | Aperçu des itérations par la méthode Dogleg de la fonction $100x^2 + y^2$ . . . . .  | 29 |
| 7.  | Aperçu des itérations par la méthode Dogleg de la fonction de Rosenbrock . . . . .   | 30 |
| 8.  | Représentation des données et de la droite de régression linéaire calculé par l'algorithme à région de confiance . . . . . | 34 |
| 9.  | Résultat des coefficients de régression à partir d'un logiciel (R) . . . . .   | 34 |
| 10. | Représentation graphique de la fonction $f(x) = x^2 - 10\cos(2\pi x) + 10 + 5x$ . . . . .                                  | 35 |