

Optimisation non linéaire

Irène Charon, Olivier Hudry

École nationale supérieure des télécommunications

A.	Optimisation sans contrainte	1
1.	Généralités	1
2.	Condition nécessaire et condition suffisante d'optimalité locale.....	2
3.	Fonctions quadratiques.....	3
4.	Fonctions convexes	4
5.	Généralités sur les méthodes d'optimisation sans contrainte.....	5
6.	Méthodes de gradient	5
7.	Méthode des gradients conjugués.....	7
8.	Méthode de Newton	10
9.	Optimisation unidimensionnelle.....	10
B.	Optimisation avec contraintes	13
1.	Généralités	13
2.	Condition de Lagrange	13
3.	Condition de Kuhn et Tucker	14
4.	Méthode des directions admissibles	15
C.	Exercices.....	16

A. Optimisation sans contrainte

1. Généralités

On considère ici des fonctions f définies dans \mathbb{R}^n et à valeurs dans \mathbb{R} . On cherche à déterminer les points où f atteint des extrema locaux ou globaux. Pour cela, nous avons besoin de quelques définitions.

a) Gradient

Soit f une fonction de \mathbb{R}^n dans \mathbb{R} admettant en un point x des dérivées partielles du premier ordre. On posera $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^t$ (les éléments de \mathbb{R}^n sont assimilés à des vecteurs-colonnes).

On note $\nabla f(x)$ et on appelle *gradient* de f au point x le vecteur-colonne :

$$\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(x), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(x) \right)^t.$$

Si $F(x) = (f_1(x), \dots, f_p(x))$ est un vecteur-ligne où f_1, \dots, f_p sont des fonctions réelles de n variables réelles dérivables au point x , alors $\nabla F(x)$ est la matrice dont la j^e colonne est $\nabla f_j(x)$.

Les formules suivantes nous seront utiles ultérieurement : si A est une matrice carrée constante d'ordre n , si $u(x)$ et $v(x)$ sont deux vecteurs-colonnes dépendant de x , alors

$$\nabla(u^t . A) = \nabla(u^t) . A,$$

et
$$\nabla(u^t . v) = \nabla(u^t) . v + \nabla(v^t) . u .$$

Si f admet en x^0 des dérivées partielles continues, on peut lui appliquer la formule de Taylor à l'ordre 1 : $f(x) = f(x^0) + (x - x^0)^t . \nabla f(x^0) + \|x - x^0\| . \varepsilon(x)$, où $\varepsilon(x)$ est une fonction qui tend vers 0 quand x tend vers x^0 .

Remarques

- Supposons f de classe C^1 . Si on considère la surface S de \mathbb{R}^{n+1} d'équation $x_{n+1} = f(x_1, \dots, x_n)$, alors $x_{n+1} = f(x^0) + (x - x^0)^t . \nabla f(x^0)$ est l'équation de l'hyperplan tangent à S au point $(x^0, f(x^0))$.
- Nous nous intéresserons par la suite aux variations de f dans une direction d de \mathbb{R}^n donnée ; x^0 et d étant fixés, posons, pour $s \in \mathbb{R}$: $g(s) = f(x^0 + s.d)$
On obtient alors : $g'(s) = d^t . \nabla f(x^0 + s.d)$
et $g'(0) = d^t . \nabla f(x^0)$.

b) *Hessien*

Si maintenant f admet des dérivées partielles d'ordre 2 en x , on pose :

$$\nabla^2 f(x) = \nabla(\nabla f(x)^t),$$

$$\text{c'est-à-dire : } \nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(x) & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n}(x) \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1}(x) & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n}(x) \\ \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1}(x) & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2}(x) \end{pmatrix};$$

$\nabla^2 f$ s'appelle le hessien de f .

Si f est une fonction de classe C^2 (admet des dérivées partielles d'ordre 2 continues), le hessien de f est une matrice symétrique.

Si f est de classe C^2 en x^0 , on peut écrire la formule de Taylor d'ordre 2 :

$$f(x) = f(x^0) + (x - x^0)^t \cdot \nabla f(x^0) + \frac{1}{2} (x - x^0)^t \cdot \nabla^2 f(x^0) \cdot (x - x^0) + \|x - x^0\|^2 \cdot \varepsilon(x),$$

où $\varepsilon(x)$ est une fonction qui tend vers 0 quand x tend vers x^0 .

2. Condition nécessaire et condition suffisante d'optimalité locale

On suppose ici que f est de classe C^2 .

Théorème (condition nécessaire d'optimalité). Si f admet un minimum local en x^* , alors :

- 1) $\nabla f(x^*) = 0$.
- 2) $\nabla^2 f(x^*)$ est une matrice positive ($\forall h \in \mathbb{R}^n, h^t \cdot \nabla^2 f(x^*) \cdot h \geq 0$).

Preuve. D'après le développement de Taylor à l'ordre 1 en x^* , on a :

$$f(x) = f(x^*) + (x - x^*)^t \cdot \nabla f(x^*) + \|x - x^*\| \cdot \varepsilon(x),$$

où $\varepsilon(x)$ est une fonction qui tend vers 0 quand x tend vers x^* .

En particulier, en choisissant $x = x^* - \theta \cdot \nabla f(x^*)$, avec $\theta \in \mathbb{R}$, on obtient :

$$f(x) - f(x^*) = -\theta \cdot \|\nabla f(x^*)\|^2 + \theta \cdot \varepsilon_1(\theta) = \theta \left(-\|\nabla f(x^*)\|^2 + \varepsilon_1(\theta) \right),$$

où $\varepsilon_1(\theta)$ est une fonction qui tend vers 0 quand θ tend vers 0. Pour θ positif, $f(x) - f(x^*)$ est du signe de $-\|\nabla f(x^*)\|^2 + \varepsilon_1(\theta)$. Si $\nabla f(x^*) \neq 0$, il existe dans tout voisinage de x^* des points x vérifiant $f(x) < f(x^*)$ (pour θ petit, $f(x) - f(x^*)$ est du signe de $-\|\nabla f(x^*)\|^2$, si on suppose ce terme non nul), contradiction avec l'optimalité locale de x^* . D'où le résultat 1).

Supposons maintenant qu'il existe $h \in \mathbb{R}^n$ tel qu'on ait : $h^t \cdot \nabla^2 f(x^*) \cdot h < 0$. On a alors, d'après le développement de Taylor d'ordre 2 :

$$f(x^* + \theta h) - f(x^*) = \theta^2 \cdot \left(\frac{1}{2} h^t \cdot \nabla^2 f(x^*) \cdot h + \varepsilon_2(\theta) \right),$$

où $\varepsilon_2(\theta)$ est une fonction qui tend vers 0 quand θ tend vers 0. Pour θ assez petit, la différence $f(x^* + \theta h) - f(x^*)$ serait négative, ce qui contredit l'hypothèse sur x^* . ♦

Théorème (condition suffisante d'optimalité). Si une fonction f vérifie en x^* :

- 1) $\nabla f(x^*) = 0$
- 2) $\nabla^2 f(x^*)$ est une matrice définie positive ($\forall h \in \mathbb{R}^n$ avec $h \neq 0$, $h^t \cdot \nabla^2 f(x^*) \cdot h > 0$), alors f admet un minimum local en x^* .

Preuve. La matrice $\nabla^2 f(x^*)$ étant définie positive, il existe $a > 0$ tel que :

$$\forall h \in \mathbb{R}^n, h^t \cdot \nabla^2 f(x^*) \cdot h \geq a \|h\|^2.$$

En effet, plaçons-nous sur la sphère S de centre 0 et de rayon 1 et définissons a par $a = \inf \{ h^t \cdot \nabla^2 f(x^*) \cdot h \text{ pour } h \in S \}$. La sphère étant un compact, a est atteint : $\exists h_0 \in S$ tel que $a = h_0^t \cdot \nabla^2 f(x^*) \cdot h_0 > 0$. On en déduit aisément la proposition précédente. D'où, en appliquant la formule de Taylor avec $h = x - x^*$:

$$f(x) - f(x^*) = f(x^* + h) - f(x^*) \geq \|h\|^2 \left(\frac{a}{2} + \varepsilon(h) \right),$$

où $\varepsilon(h)$ est une fonction qui tend vers 0 quand h tend vers 0, ce qui montre le théorème car, pour h de norme assez petite, $\frac{a}{2} + \varepsilon(h)$ est du signe de a , c'est-à-dire positif. ♦

3. Fonctions quadratiques.

Soit A une matrice symétrique d'ordre n , b un vecteur-colonne d'ordre n et c un nombre réel. L'application q de \mathbb{R}^n dans \mathbb{R} définie par

$$q(x) = c + b^t \cdot x + \frac{1}{2} x^t \cdot A \cdot x$$

s'appelle **fonction quadratique**.

Remarque : la partie polynomiale du développement de Taylor d'ordre 2 d'une fonction f est la fonction quadratique q telle que la surface d'équation $x_{n+1} = q(x)$ soit « la plus proche » de la surface d'équation $x_{n+1} = f(x)$ au voisinage du point considéré.

On a, en utilisant les formules données dans le paragraphe 1 :

$$\nabla q(x) = \nabla(x^t) \cdot b + \frac{1}{2} [\nabla(x^t) \cdot A \cdot x + \nabla((A \cdot x)^t) \cdot x].$$

Or, $\nabla(x^t)$ est la matrice identité et :

$$\nabla[(A \cdot x)^t] = \nabla(x^t \cdot A^t) = \nabla(x^t) \cdot A^t = A^t.$$

$$\text{D'où : } \quad \nabla q(x) = b + \frac{1}{2} (A + A^t) \cdot x.$$

$$\text{et donc : } \quad \nabla q(x) = b + A \cdot x.$$

De plus : $\nabla^2 q(x) = \nabla(\nabla q^t(x)) = \nabla(b^t + x^t A^t) = A^t = A$.

On a donc finalement : $\nabla^2 q(x) = A$

Les dérivées d'ordre au moins 3 de q sont nulles. Une fonction quadratique coïncide avec son développement de Taylor à l'ordre 2 à l'origine.

4. Fonctions convexes

On dit qu'une fonction f de \mathbb{R}^n dans \mathbb{R} est *convexe* si, pour tout x et tout y de \mathbb{R}^n et pour tout λ de $]0,1[$, on a : $f(\lambda x + (1 - \lambda)y) \leq \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y)$. Si cette inégalité est stricte, on dit que f est *strictement convexe*.

Théorème. Si f est convexe et admet un minimum local en x^* , alors f admet un minimum global en x^* .

Preuve : Supposons qu'il existe x vérifiant $f(x) < f(x^*)$. Pour $\lambda \in]0,1[$, on a

$$f(\lambda x + (1 - \lambda)x^*) \leq \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(x^*) < f(x^*).$$

La fonction f ayant un minimum local en x^* , il existe une sphère S centrée en x^* à l'intérieur de laquelle la fonction f est supérieure ou égale à $f(x^*)$; or, quand λ tend vers 0, $\lambda x + (1 - \lambda)x^*$ tend vers x^* ; en choisissant λ assez proche de 0, le point $\lambda x + (1 - \lambda)x^*$ appartient à S ce qui entraîne $f(\lambda x + (1 - \lambda)x^*) \geq f(x^*)$; : on obtient ainsi une contradiction avec la précédente inégalité. ♦

Théorème. Si f est une fonction convexe et admet des dérivées partielles, alors f admet un minimum global en x^* si et seulement si on a $\nabla f(x^*) = 0$.

Preuve. Il faut montrer que si $\nabla f(x^*) = 0$, alors f admet un minimum en x^* . Soit $x \in \mathbb{R}^n$. Posons $g(s) = f(x^* + s(x - x^*))$. On a : $g(0) = f(x^*)$ et $g(1) = f(x)$. De plus, on a la relation $g'(0) = (x - x^*)^t \nabla f(x^*) = 0$. Par ailleurs, on vérifie facilement que g est une fonction convexe de \mathbb{R} dans \mathbb{R} . La dérivée d'une fonction convexe de \mathbb{R} dans \mathbb{R} étant croissante, on a, pour $s \geq 0$, $g'(s) \geq 0$. Or, on peut écrire $g(1) - g(0) = g'(c)$ avec $c \in]0,1[$, ce qui implique l'inégalité $g(1) \geq g(0)$: f admet donc un minimum global en x^* . ♦

On admettra le théorème suivant.

Théorème. Si f est deux fois continûment dérivable, les propositions suivantes sont équivalentes :

(a) f est convexe.

(b) Pour tout x et tout y de \mathbb{R}^n , $f(y) \geq f(x) + (\nabla f(x))^t \cdot (y - x)$ (autrement dit, la surface de \mathbb{R}^{n+1} d'équation $x_{n+1} = f(x)$ est au-dessus de ses hyperplans tangents).

(c) Pour tout x , $\nabla^2 f(x)$ est positive.

De ce théorème, on déduit qu'une fonction quadratique $q(x) = \frac{1}{2} x^t A x + b^t x + c$ est convexe si et seulement si A est positive. Par ailleurs, si A est définie positive, alors q admet un minimum global unique.

5. Généralités sur les méthodes d'optimisation sans contrainte

Même si on s'intéresse le plus souvent à des extrema globaux, on cherchera en général des extrema locaux, quitte à examiner ensuite (si possible) s'il s'agit d'extrema globaux.

Toutes les méthodes que nous indiquerons concernent des minima. Les modifications pour la recherche d'un maximum sont toujours immédiates. Par ailleurs, quand nous considérerons des fractions dans ce qui suit, nous supposerons que les dénominateurs sont non nuls (les adaptations étant immédiates sinon).

Pour déterminer un point où une fonction f atteint un minimum local, les méthodes consistent à construire une suite $x^0, x^1, \dots, x^k, \dots$ qui doit converger vers un point x^* vérifiant une condition nécessaire d'optimalité. Cette condition (par exemple, $\nabla f(x^*) = 0$) n'est en général pas suffisante et le comportement de f au voisinage de x^* doit donc faire l'objet d'une étude supplémentaire (pouvant porter entre autres sur le hessien de f en x^*).

Enfin, les méthodes que nous utiliserons seront quasiment toutes des *méthodes de descente* ; on appelle méthode de descente toute méthode où, à chaque étape, on pose $x^{k+1} = x^k + s_k d^k$, où $s_k \in \mathbb{R}^+$ et d^k est une direction qui vérifie $(d^k)^t \cdot \nabla f(x^k) < 0$. Cette dernière condition signifie que $f(x^k + s d^k)$ a une dérivée négative pour $s = 0$: partant de x^k dans la direction d^k , on « descend ».

Lorsque la convergence d'un algorithme a été établie, une qualité importante de cet algorithme est sa vitesse de convergence.

- Si $\frac{\|x^{k+1} - x^*\|}{\|x^k - x^*\|} \leq \alpha < 1$ pour k assez grand, on dit que la convergence est *linéaire* de taux α .
- Si $\frac{\|x^{k+1} - x^*\|}{\|x^k - x^*\|}$ tend vers 0 quand k tend vers l'infini, on dit que la convergence est *superlinéaire*.
- Si $\frac{\|x^{k+1} - x^*\|}{\|x^k - x^*\|^\gamma}$ est borné, avec $\gamma > 1$, on dit que la convergence est *superlinéaire* d'ordre γ .

Dans le cas $\gamma = 2$, on dit que la convergence est *quadratique*.

6. Méthodes de gradient

a) Principe

Il s'agit d'une famille de méthodes itératives qui s'appliquent à des fonctions dérivables et qui utilisent l'idée ci-dessous.

Soient d un vecteur de \mathbb{R}^n et x^k un point de \mathbb{R}^n tel que $\nabla f(x^k) \neq 0$. Posons, pour $s \in \mathbb{R}$:

$$g(s) = f(x^k + s d).$$

On dit que d est une *direction de descente* si $g'(0) < 0$. Nous avons vu la relation $g'(0) = d^t \cdot \nabla f(x^k)$. D'où, en notant θ l'angle entre $\nabla f(x^k)$ et d :

$$g'(0) = \|\nabla f(x^k)\| \|d\| \cos \theta.$$

En supposant d unitaire, $g'(0)$ est minimum si $\cos \theta = -1$, c'est-à-dire si $d = -\frac{\nabla f(x^k)}{\|\nabla f(x^k)\|}$.

Cette dernière direction donne ce qu'on appelle la *direction de plus grande pente*.

La différence entre les diverses méthodes de gradient porte sur le choix de s_k et de d^k , choix qui doit au minimum assurer $f(x^{k+1}) \leq f(x^k)$.

b) Méthode de la plus forte pente à pas optimal

La méthode de la plus forte pente à pas optimal est la méthode de gradient la plus utilisée. On choisit ici $-\nabla f(x^k)$ pour d^k : il s'agit de la descente de plus forte pente. On pose ensuite $g(s) = f(x^k - s \cdot \nabla f(x^k))$ et on calcule s_k de façon à minimiser g pour $s \geq 0$. On est alors ramené à un problème d'optimisation unidimensionnelle.

L'algorithme de la plus forte pente peut s'écrire de la façon suivante :

- Choisir un point de départ x^0 ;
- $k \leftarrow 0$
- répéter
 - $d^k \leftarrow -\nabla f(x^k)$
 - déterminer s_k tel que $f(x^k + s_k d^k) = \text{Min}_{s \geq 0} f(x^k + s d^k)$
 - $x^{k+1} \leftarrow x^k + s_k d^k$
 - $k \leftarrow k + 1$

tant que le test d'arrêt n'est pas vérifié.

Le test d'arrêt peut être par exemple :

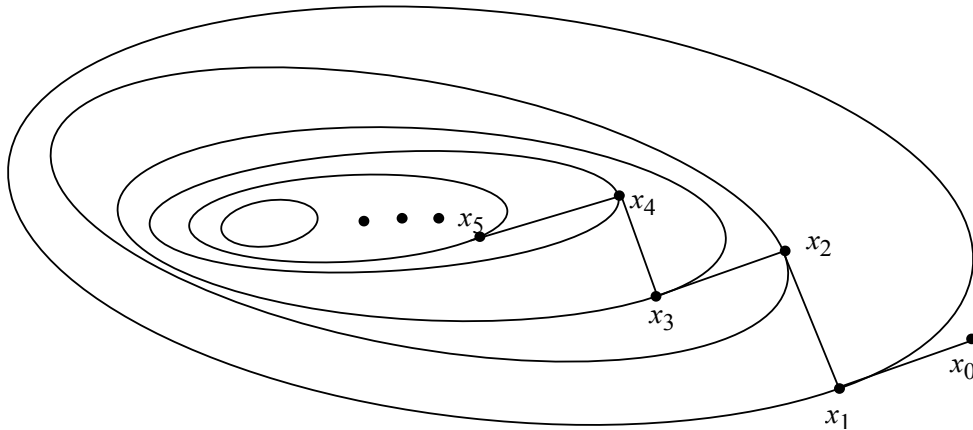
- le gradient est très petit : $\sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial x_i}(x^k) \right)^2 \leq \varepsilon$, où ε est un paramètre donné ;
- la suite x^k est « presque » stationnaire : $|f(x^{k+1}) - f(x^k)| \leq \varepsilon$ (ε donné).

On peut aussi exiger que l'un de ces tests soit vérifié sur plusieurs itérations ou que plusieurs tests soient satisfaits simultanément.

On peut montrer que si $f(x)$ est une fonction de classe C^1 qui tend vers l'infini quand $\|x\|$ tend vers l'infini, cet algorithme converge vers un point stationnaire (point où le gradient s'annule).

L'inconvénient de cette méthode est que la vitesse de convergence peut être très faible (linéaire avec un coefficient proche de 1). Cette lenteur peut s'expliquer de la façon suivante : l'égalité $\frac{d}{ds} [f(x^k - s \cdot \nabla f(x^k))](s_k) = 0$ s'écrit : $[\nabla f(x^k)]^t \cdot \nabla f(x^{k+1}) = 0$; les directions de déplacement successives sont orthogonales.

Sur le dessin ci-dessous, on a représenté quelques courbes de niveau et les déplacements.



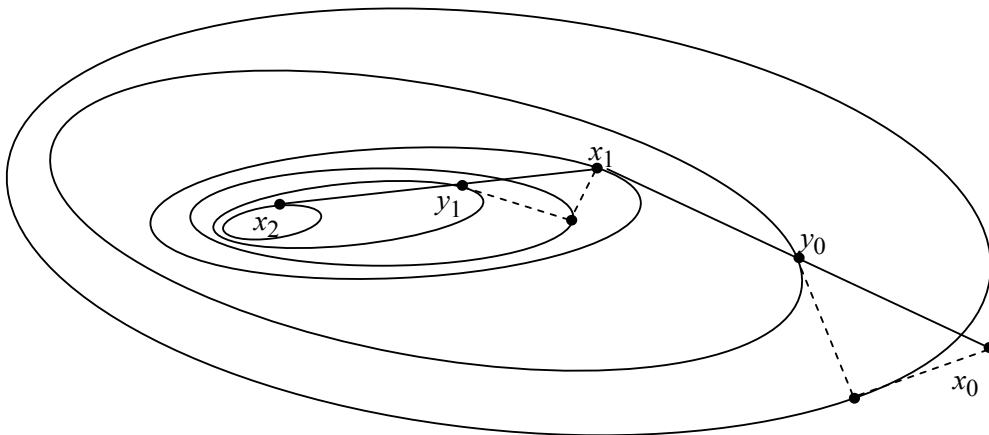
Il y a convergence en zig-zag.

c) *Méthode de la plus forte pente accéléré*

La méthode de la plus forte pente accélérée est une méthode de descente qui s'appuie sur la méthode de la plus forte pente.

Soit p un entier fixé. À partir d'un point x^k , on effectue p itérations de la méthode de la plus forte pente ; on obtient un point y^k et on pose $d^k = y^k - x^k$. Le point x^{k+1} est le point où la fonction $f(x^k + sd^k)$ admet un minimum pour $s > 0$.

Cette méthode peut gagner beaucoup de temps par rapport à la méthode précédente. Le dessin ci-dessous illustre cette méthode dans le cas $p = 2$.



7. Méthode des gradients conjugués

a) *Cas d'une fonction quadratique*

Soit $q(x) = \frac{1}{2} x^t A x + b^t x + c$ une fonction quadratique, où A est définie positive.

La méthode consiste, à partir d'un point x^0 , à minimiser q suivant n directions d^0, d^1, \dots, d^{n-1} mutuellement conjuguées par rapport à A , c'est-à-dire vérifiant :

$$\text{pour } 1 \leq i < j \leq n, (d^i)^t A d^j = 0.$$

Soient n telles directions : d^0, d^1, \dots, d^{n-1} .

Ayant déterminé x^k , le point x^{k+1} est le point : $x^{k+1} = x^k + s_k d^k$
où s_k est choisi de façon à minimiser $q(x^k + s_k d^k)$.

On a donc : $(d^k)^t \cdot \nabla q(x^k + s_k d^k) = 0$ ou encore : $(d^k)^t \cdot [A(x^k + s_k d^k) + b] = 0$

d'où l'on déduit : $s_k = - \frac{(d^k)^t \cdot (Ax^k + b)}{(d^k)^t \cdot A \cdot d^k}$

Lemme : Si d^0, d^1, \dots, d^{k-1} sont mutuellement conjuguées, alors on a pour tout $i < k$ la relation : $(d^i)^t \cdot \nabla q(x^k) = 0, .$

Preuve : on a en effet $(d^i)^t \cdot \nabla q(x^k) = (d^i)^t \cdot (Ax^k + b)$
 $= (d^i)^t [A(x^i + \sum_{j=i}^{k-1} s_j d^j) + b]$
 $= (d^i)^t \cdot (Ax^i + b) + s_i \cdot (d^i)^t \cdot A \cdot d^i$
 $= 0$ d'après la valeur de s_i calculée ci-dessus.

Théorème : Le point x^n est l'optimum de $q(x)$ sur \mathbb{R}^n .

Preuve : Les directions d^0, d^1, \dots, d^{n-1} étant mutuellement conjuguées, elles forment une base de \mathbb{R}^n . D'après le lemme, $\nabla q(x^n) = 0$, ce qui démontre le théorème.

La méthode de Fletcher et Reeves engendre au fur et à mesure les directions d^i ; on l'explique ci-dessous en posant : $g^k = \nabla q(x^k) = Ax^k + b$.

- Choisir un point de départ x^0 ; poser $d^0 := -g^0$.
- Pour k variant de 0 à n faire :

- $s_k \leftarrow - \frac{(d^k)^t \cdot g^k}{(d^k)^t \cdot A \cdot d^k}$
- $x^{k+1} \leftarrow x^k + s_k \cdot d^k$
- $b_k \leftarrow \frac{(g^{k+1})^t \cdot A \cdot d^k}{(d^k)^t \cdot A \cdot d^k}$
- $d^{k+1} \leftarrow -g^{k+1} + b_k \cdot d^k$

(on pourra remarquer l'égalité suivante : $(d^k)^t \cdot g^k = - \|g^k\|^2$)

Pour justifier la méthode, il suffit de vérifier que $d^0, d^1 \dots d^{n-1}$ sont mutuellement conjuguées. Nous montrons qu'elles le sont à l'aide d'une récurrence. Pour cela, soit k compris entre 0 et $n - 2$; on suppose que les directions $d^0, d^1 \dots d^k$ sont mutuellement conjuguées. On a alors pour $k + 1$:

$$\begin{aligned} (d^k)^t \cdot A \cdot d^{k+1} &= (d^k)^t \cdot A \cdot (-g_{k+1} + b_k \cdot d^k) \\ &= - (d^k)^t \cdot A \cdot g^{k+1} + b_k \cdot (d^k)^t \cdot A \cdot d^k = 0 \text{ d'après le choix de } b_k. \end{aligned}$$

Pour $i < k$, $(d^{k+1})^t \cdot A \cdot d^i = - (g^{k+1})^t \cdot A \cdot d^i + b_k \cdot (d^k)^t \cdot A \cdot d^i = - (g^{k+1})^t \cdot A \cdot d^i$

$$\text{Or : } A.d^i = A \left(\frac{x^{i+1} - x^i}{s_i} \right) = \frac{Ax^{i+1} - Ax^i}{s_i} = \frac{g^{i+1} - g^i}{s_i}$$

$$\text{D'autre part : } g^{i+1} = -d^{i+1} + b_i.d^i \text{ et } g^i = -d^i + b_{i-1}.d^{i-1}.$$

D'après le lemme, g^{k+1} est orthogonal à d^{i+1} , d^i et d^{i-1} ; $A.d^i$ étant combinaison linéaire de ces trois vecteurs, $(g^{k+1})^t.A.d^i = 0$, ce qui montre l'égalité $(d^{k+1})^t.A.d^i = 0$.

Pour terminer, nous démontrons une formule qui nous sera utile dans le paragraphe suivant. On a : $g^{k+1} - g^k = A(x^{k+1} - x^k) = s_k A.d^k$.

$$\text{D'où : } (g^{k+1})^t.A.d^k = \frac{(g^{k+1})^t.(g^{k+1} - g^k)}{s_k}$$

Comme $g^k = -d^k + b_{k-1}.d^{k-1}$, le lemme montre l'égalité $(g^{k+1})^t.g^k = 0$.

$$\text{D'où : } b_k = \frac{1}{s_k} \frac{(g^{k+1})^t.g^{k+1}}{(d^k)^t.A.d^k} = -\frac{(g^{k+1})^t.g^{k+1}}{(g^k)^t.d^k}$$

$$(g^k)^t.d^k = (g^k)^t(-g^k + b_{k-1}.d^{k-1}) = -(g^k)^t.g^k \text{ d'après le lemme.}$$

$$\text{On en déduit le résultat : } b_k = \frac{\|g^{k+1}\|^2}{\|g^k\|^2}.$$

b) Cas d'une fonction quelconque

L'algorithme de Fletcher et Reeves pour une fonction quelconque est le suivant :

- partir d'un point x^0 ;
- faire $d^0 \leftarrow -\nabla f(x^0)$ et $k \leftarrow 0$;
- répéter
 - choisir s_k minimisant $f(x^k + s.d^k)$, par rapport à s
 - $x^{k+1} \leftarrow x^k + s_k.d^k$
 - $b_k \leftarrow \frac{\|\nabla f(x^{k+1})\|^2}{\|\nabla f(x^k)\|^2}$
 - $d^{k+1} \leftarrow -\nabla f(x^{k+1}) + b_k.d^k$
 - $k \leftarrow k + 1$

jusqu'à ce qu'un test d'arrêt soit vérifié.

Cette méthode a deux avantages : elle nécessite le stockage de très peu d'informations et sa vitesse de convergence est très supérieure à celle des algorithmes de gradient classiques.

8. Méthode de Newton

On suppose ici que f est deux fois continûment dérivable et que l'on sait calculer ses dérivées secondes.

Au voisinage d'un point x^k , on approche f par la fonction quadratique donnée par la formule de Taylor d'ordre 2 :

$$q(x) = f(x^k) + (x - x^k)^t \cdot \nabla f(x^k) + \frac{1}{2} (x - x^k)^t \cdot \nabla^2 f(x^k) \cdot (x - x^k).$$

On peut alors choisir pour x^k le point, s'il existe, qui minimise q ; pour que ce point minimisant q existe, il est suffisant que $\nabla^2 f(x^k)$ soit définie positive ; il est alors déterminé par l'équation $\nabla q(x) = 0$ qui s'écrit : $\nabla f(x^k) + \nabla^2 f(x^k) \cdot (x - x^k) = 0$; d'où :

$$x^{k+1} = x^k - [\nabla^2 f(x^k)]^{-1} \cdot \nabla f(x^k).$$

Proposition : Si x^0 est choisi suffisamment proche d'un minimum local x^* où le hessien de f est défini positif, alors la suite (x^k) a une convergence quadratique vers x^* .

Preuve : On a : $(\nabla f)(x^k + h) = (\nabla f)(x^k) + (\nabla^2 f)(x^k) \cdot h + O(\|h\|^2)$ où $\frac{O(\|h\|^2)}{\|h\|^2}$ est une fonction bornée de h .

Pour $h = x^* - x^k$, on obtient :

$$0 = (\nabla f)(x^*) = (\nabla f)(x^k) - (\nabla^2 f)(x^k) \cdot (x^k - x^*) + O(\|x^k - x^*\|^2).$$

Au voisinage de x^* , le hessien de f est inversible. On multiplie l'égalité ci-dessus par $[(\nabla^2 f)(x^k)]^{-1}$. On admet $[(\nabla^2 f)(x^k)]^{-1} \cdot O(\|x^k - x^*\|^2) = O(\|x^k - x^*\|^2)$ (résultat qui découle de la continuité de $[(\nabla^2 f)(x^k)]^{-1}$). Comme on a $x^{k+1} - x^k = -[(\nabla^2 f)(x^k)]^{-1} \cdot \nabla f(x^k)$, on obtient :

$$-(x^{k+1} - x^k) - (x^k - x^*) + O(\|x^k - x^*\|^2) = 0,$$

c'est-à-dire : $x^{k+1} - x^* = O(\|x^k - x^*\|^2)$.

La contrainte de choisir x^0 proche de x^* est forte ; on peut éventuellement appliquer d'abord une autre méthode pour s'approcher de x^* , puis appliquer la méthode de Newton. ♦

9. Optimisation unidimensionnelle

On considère ici une application f de \mathbb{R} dans \mathbb{R} . Les méthodes d'optimisation de telles fonctions ont d'autant plus d'importance qu'elles servent d'outils pour l'optimisation de fonctions de plusieurs variables.

a) Méthode de Newton

La méthode de Newton que nous avons étudiée dans le cas des fonctions de plusieurs variables réelles peut s'appliquer ici. À partir d'un point x_k , on approche f par :

$$q(x) = f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k) + \frac{1}{2} f''(x_k)(x - x_k)^2.$$

On remarque : $q'(x) = f'(x_k) + f''(x_k)(x - x_k)$.

Si $f''(x_k) > 0$ (cas où f est convexe autour de x_k), on pose :

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

qui est le point où q atteint son minimum ($q'(x_{k+1}) = 0$).

Si $f''(x_k) \leq 0$, la méthode échoue.

b) Méthode par dichotomie pour une fonction dérivable

Définition : On dit qu'une fonction est **unimodale** s'il existe un réel x^* pour lequel la fonction est strictement décroissante sur $]-\infty, x^*]$ et strictement croissante sur $[x^*, +\infty[$.

Le point x^* est alors minimum global de f .

On suppose ici que f est unimodale.

La première étape consiste en la recherche de x_{min} et x_{max} tels qu'on ait les deux relations $f'(x_{min}) < 0$ et $f'(x_{max}) > 0$.

Après cette première étape, on pose : $x = \frac{1}{2}(x_{min} + x_{max})$; si $f'(x) > 0$, on remplace x_{max} par x , sinon on remplace x_{min} par x ; on répète l'opération jusqu'à un critère d'arrêt à préciser.

La longueur de l'intervalle étant à chaque itération divisée par 2, on montre que la convergence est linéaire de taux 0,5.

Pour déterminer x_{min} et x_{max} , une bonne méthode est la suivante :

- définir un pas de déplacement $h > 0$.
- si $f'(0) < 0$, faire :

$x_{min} \leftarrow 0$
tant que $f'(h) < 0$, faire
 $x_{min} \leftarrow h$
 $h \leftarrow 2h$

$x_{max} \leftarrow h$
sinon si $f'(0) > 0$, faire :
 $h \leftarrow -h$
 $x_{max} \leftarrow 0$
tant que $f'(h) > 0$, faire
 $x_{max} \leftarrow h$
 $h \leftarrow 2h$
 $x_{min} \leftarrow h$

c) Interpolation quadratique

On suppose ici que f est une fonction qui peut ne pas être dérivable ou bien dont on ne connaît pas la dérivée.

La méthode part du principe suivant : on choisit d'abord, à l'aide d'un algorithme préliminaire, x_1, x_2 et x_3 tels que : $x_1 < x_2 < x_3$ avec $f(x_2) \leq f(x_1)$ et $f(x_2) \leq f(x_3)$

On approche f par une fonction quadratique q ayant les mêmes valeurs que f en x_1, x_2 et x_3 :

$$q(x) = f(x_1) \cdot \frac{(x-x_2) \cdot (x-x_3)}{(x_1-x_2) \cdot (x_1-x_3)} + f(x_2) \cdot \frac{(x-x_1) \cdot (x-x_3)}{(x_2-x_1) \cdot (x_2-x_3)} + f(x_3) \cdot \frac{(x-x_1) \cdot (x-x_2)}{(x_3-x_1) \cdot (x_3-x_2)}.$$

Le minimum de q est atteint sur $[x_1, x_3]$ en un point dont l'abscisse s'exprime facilement en fonction de $x_1, x_2, x_3, f(x_1), f(x_2)$ et $f(x_3)$; on note x_4 ce point.

Si $f(x_4) \leq f(x_2)$

si $x_4 \leq x_2$, le nouveau triplet est (x_1, x_4, x_2)

sinon le nouveau triplet est (x_2, x_4, x_3)

Si $f(x_4) > f(x_2)$

si $x_4 \leq x_2$, le nouveau triplet est (x_4, x_2, x_3)

sinon le nouveau triplet est (x_1, x_2, x_4)

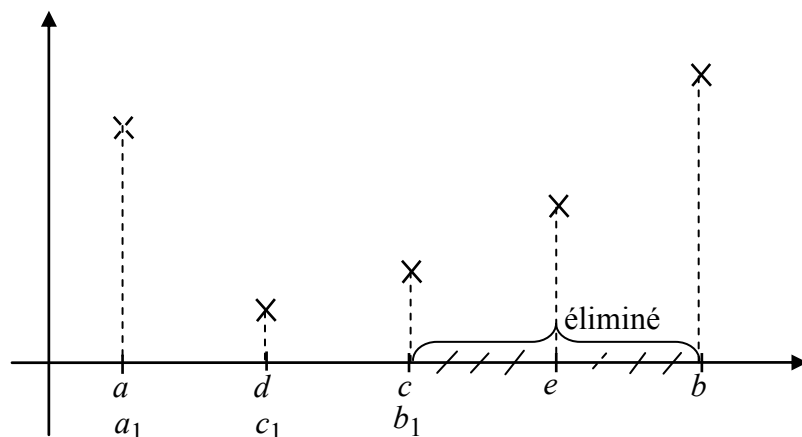
On peut montrer que, si f est assez régulière, la convergence est superlinéaire d'ordre 1,3.

d) Méthode par dichotomie sans dérivation

On suppose ici que f est unimodale.

Au départ, à l'aide d'un algorithme préliminaire, on choisit a et b tels que le minimum de f soit atteint entre a et b . On partage alors, à l'aide de points d, c et e , l'intervalle $[a, b]$ en quatre sous-intervalles égaux : $c = \frac{a+b}{2}, d = \frac{a+c}{2}, e = \frac{c+b}{2}$.

En comparant les valeurs prises par f en a, b, c, d et e , on peut éliminer deux des sous-intervalles définis par ces points et affirmer que le minimum de f est atteint dans l'union de deux sous-intervalles contigus $[a_1, c_1]$ et $[c_1, b_1]$. La figure ci-dessous illustre un tel cas. On recommence alors avec l'intervalle $[a_1, b_1]$. À chaque étape, la longueur de l'intervalle est divisée par 2. La vitesse de convergence est linéaire.



B. Optimisation avec contraintes

1. Généralités

Dans cette partie, beaucoup de résultats ne seront pas démontrés.

Soit (P) le problème :

$$(P) \quad \begin{array}{l} \text{Minimiser } f(x) \\ \text{avec} \quad \left\{ \begin{array}{l} g_i(x) = 0 \text{ pour } 1 \leq i \leq m \\ h_j(x) \geq 0 \text{ pour } 1 \leq j \leq p \end{array} \right. \\ \text{et} \quad x \in \mathbb{R}^n. \end{array}$$

Les fonctions f , g_i ($1 \leq i \leq m$) et h_j ($1 \leq j \leq p$) sont supposées de classe C^1 . Les conditions $g_i(x) = 0$ et $h_j(x) \geq 0$ s'appellent les *contraintes*. Tout x appartenant à \mathbb{R}^n qui vérifie le système des contraintes s'appelle *solution réalisable*. On note X l'ensemble des solutions réalisables. Si, pour $j \in \{1, 2, \dots, p\}$ et pour $x \in X$, on a $h_j(x) = 0$, on dit que la contrainte h_j est *saturée* en x .

Certains énoncés de ce chapitre nécessiteraient, pour être tout à fait exacts, des conditions supplémentaires difficiles à énoncer (et qui correspondent à des cas « pathologiques ») ; afin de simplifier, nous n'avons pas précisé celles-ci.

Définition : On dit qu'une direction d est admissible en $x^0 \in X$ si :

- pour $i \in \{1, 2, \dots, m\}$, $d^t \cdot \nabla g_i(x^0) = 0$
- pour $j \in \{1, 2, \dots, p\}$, si $h_j(x^0) = 0$ alors $d^t \cdot \nabla h_j(x^0) \geq 0$.

Suivre une direction admissible à partir d'un point de X permet de rester dans X ou de le quitter « tangentiellement ».

Théorème. On suppose que le problème admet un minimum local en x^* . Alors, si d est une direction admissible en x^* :

$$d^t \cdot \nabla f(x^*) \geq 0$$

(autrement dit, aucune direction de descente n'est admissible en x^*).

2. Condition de Lagrange

On s'intéresse ici au problème :

$$(P) \quad \begin{array}{l} \text{Minimiser } f(x) \\ \text{avec} \quad g_i(x) = 0 \quad (1 \leq i \leq m) \\ \text{et} \quad x \in \mathbb{R}^n \end{array}$$

où les fonctions f et g_i ($1 \leq i \leq m$) sont de classe C^1 . La condition de Lagrange, que donne le théorème suivant, fournit une condition nécessaire pour qu'un élément de \mathbb{R}^n soit un minimum local de (P).

Théorème. Soit x^* un minimum local du problème. Alors il existe des réels $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ tels

$$\text{que : } \nabla f(x^*) = \sum_{i=1}^m \lambda_i \nabla g_i(x^*).$$

Preuve. Notons E le sous-espace de \mathbb{R}^n engendré par les vecteurs $\nabla g_i(x^*)$ et E^\perp le sous-espace orthogonal à E . On a :

$$\nabla f(x^*) = y + z \text{ avec } y \in E \text{ et } z \in E^\perp.$$

Pour $1 \leq i \leq m$, $z^t \cdot \nabla g_i(x^*) = 0$ puisque z appartient à E^\perp . Par conséquent, z est une direction admissible ; d'après le théorème du paragraphe précédent, il vient : $z^t \cdot \nabla f(x^*) \geq 0$. De plus, pour $1 \leq i \leq m$, $(-z)^t \cdot \nabla g_i(x^*) = 0$; on a donc aussi $(-z)^t \cdot \nabla f(x^*) \geq 0$. D'où :

$$z^t \cdot \nabla f(x^*) = 0.$$

Or :

$$z^t \cdot \nabla f(x^*) = z^t \cdot y + z^t \cdot z = z^t \cdot z = \|z\|^2.$$

Par conséquent $\|z\|^2 = 0$ et donc $z = 0$. D'où le théorème. ♦

La condition de Lagrange n'est généralement pas suffisante. Elle l'est cependant dans le cas suivant, ce que nous ne prouvons pas.

Théorème. La condition de Lagrange est suffisante lorsque f est convexe dans un ouvert contenant X et que les g_i ($1 \leq i \leq m$) sont linéaires.

3. Condition de Kuhn et Tucker

On reprend le problème (P) initial :

$$\begin{array}{ll} \text{Minimiser } f(x) \\ \text{(P)} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} g_i(x) = 0 \text{ pour } 1 \leq i \leq m \\ h_j(x) \geq 0 \text{ pour } 1 \leq j \leq p \end{cases} \\ \text{et} \quad x \in \mathbb{R}^n \end{array}$$

où les fonctions f , g_i ($1 \leq i \leq m$) et h_j ($1 \leq j \leq p$) sont supposées de classe C^1 . La condition suivante, appelée condition de Kuhn et Tucker, généralise la condition de Lagrange :

Théorème. Si x^* est un minimum local du problème, alors il existe :

- m nombres réels $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$
- p nombres réels positifs ou nuls $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_p$

tels que :

$$1) \nabla f(x^*) = \sum_{i=1}^m \lambda_i \nabla g_i(x^*) + \sum_{j=1}^p \mu_j \nabla h_j(x^*)$$

2) si $h_j(x^*) \neq 0$, alors $\mu_j = 0$ (dans la seconde somme, seuls les gradients des contraintes saturées en x^* peuvent figurer).

Comme la condition de Lagrange, la condition de Kuhn et Tucker n'est généralement pas suffisante. Elle l'est cependant dans le cas suivant. Nous ne prouvons pas le théorème précédent, ni le suivant.

Théorème. La condition de Kuhn et Tucker est suffisante lorsque simultanément f est convexe dans un ouvert contenant X , les g_i ($1 \leq i \leq m$) sont linéaires et les h_j ($1 \leq j \leq p$) sont concaves dans un ouvert contenant X .

4. Méthode des directions admissibles

Dans cette dernière partie, nous nous intéressons au problème suivant :

$$\begin{array}{ll} \text{Minimiser } & f(x) \\ \text{avec} & h_j(x) \geq 0 \text{ pour } 1 \leq j \leq p \\ \text{et} & x \in \mathbb{R}^n. \end{array}$$

Pour tenter de résoudre ce problème, on choisit un point de départ $x^0 \in X$ et on construit de façon itérative une suite x^k de X vérifiant $f(x^{k+1}) \leq f(x^k)$, jusqu'à ce qu'on « estime » avoir obtenu une approximation satisfaisante.

À partir de x^k , on recherche une direction de descente d qui ne fasse pas sortir « immédiatement » de X . On cherche alors, en se déplaçant dans la direction d , un point x^{k+1} de X meilleur que x^k (par exemple, en minimisant $f(x^k + s.d)$ pour $s > 0$, avec la contrainte que $x^k + s.d$ appartienne à X , si on sait résoudre ce nouveau problème). On recommence à partir de x^{k+1} tant qu'un certain critère d'arrêt n'est pas vérifié.

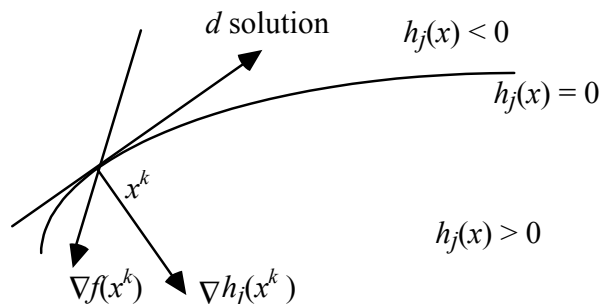
Pour choisir d , on peut résoudre le problème :

$$\begin{array}{ll} \text{Minimiser } & d^t \cdot \nabla f(x^k) \\ \text{avec} & d^t \cdot \nabla h_j(x^k) \geq 0 \text{ pour tout } j \text{ tel que } h_j(x^k) = 0 \\ \text{et} & d^t \cdot d = 1. \end{array}$$

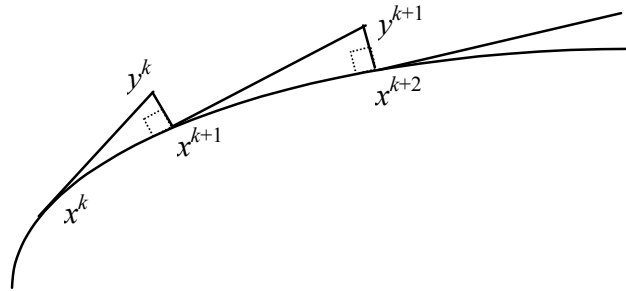
On obtient alors pour d la direction admissible de plus grande pente.

On peut remplacer la condition $d^t \cdot d = 1$ par la condition : $-1 \leq d_i \leq 1$ ($1 \leq i \leq n$) pour avoir un problème linéaire ; dans ce cas, la direction admissible retenue ne sera pas exactement la direction de plus grande pente.

La méthode, telle qu'elle vient d'être exposée, doit être accompagnée de compléments. Considérons l'exemple suivant :



Tout déplacement dans la direction d fait sortir de X . Il faut alors une procédure de projection pour que x^{k+1} soit dans X , procédure qui peut être schématiquement représentée par le dessin ci-dessous.



Remarquons néanmoins que ce dépassement n'apparaît pas, par exemple, dans le cas où les contraintes sont linéaires.

C. Exercices

Exercice 1

Déterminer le minimum de la fonction f définie sur \mathbb{R}^2 par :

$$f(x, y) = e^{x+y} + x^2 + 2y^2.$$

Exercice 2

On s'intéresse au problème d'optimisation sur \mathbb{R}^2 suivant :

$$\text{Minimiser } 2x^2 + y^4$$

$$\text{avec les contraintes : } \begin{cases} x \geq 1 \\ x + a \cdot y \geq a + 1 \end{cases}$$

où a est un paramètre réel.

1) Pour quelle(s) valeur(s) de a peut-on affirmer que le minimum est atteint au point $(1, 1)$?

2) Résoudre :

$$\text{Minimiser } 2x^2 + y^4$$

$$\text{avec les contraintes : } \begin{cases} x \geq 1 \\ 2x + y \geq 3 \end{cases}.$$