

3. Optimisation sans contrainte

Fonctions à plusieurs variables

3.1 Résultats préliminaires

Notes:

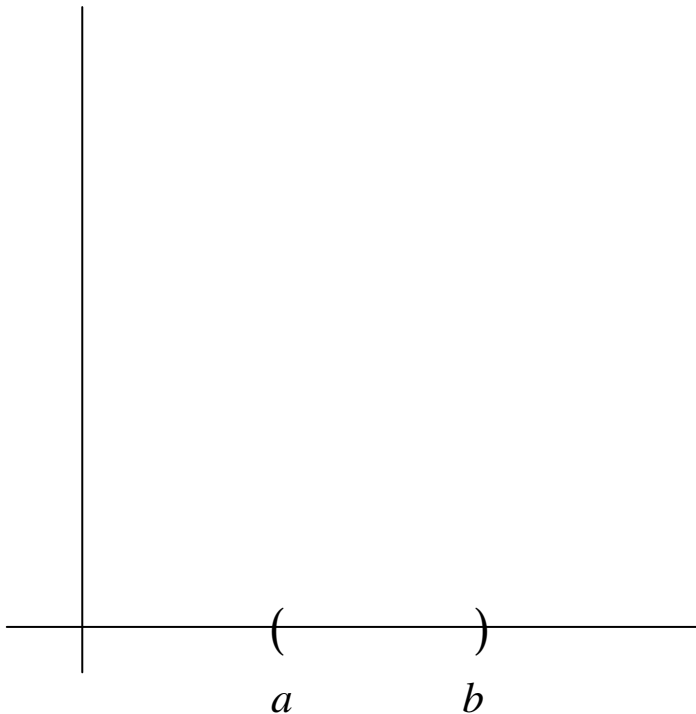
i) norme euclidienne de $x \in R^n$: $\|x\| = \sqrt{x^T x} = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}$

ii) $\nabla f(x)$ le gradient de f à $x \in R^n$:

$$\nabla f(x) = \left[\frac{\partial f(x)}{\partial x_1}, \frac{\partial f(x)}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f(x)}{\partial x_n} \right]^T.$$

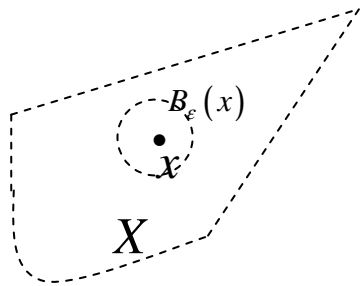
$X \subset R^n$ est un ensemble ouvert si $\forall x \in X$ il existe un $\varepsilon > 0$ tel que $B_\varepsilon(x) = \{z \in R^n; \|x - z\| < \varepsilon\} \subset X$.

Dans R^1 l'intervalle ouvert (a, b) est un ensemble ouvert puisque $\forall x \in (a, b), \exists \varepsilon > 0$ tel que $B_\varepsilon(x) = \{z : |x - z| < \varepsilon\} \subset (a, b)$



Dans R^2 l'ensemble $\Gamma = \{[x, y] \in R^2 : x \in (a, b), y = 0\}$ n'est pas un ensemble ouvert puisque nous ne pouvons pas bouger pour modifier la valeur de y

$X \subset R^n$ est un ensemble ouvert si $\forall x \in X$ il existe un $\varepsilon > 0$ tel que $B_\varepsilon(x) = \{z \in R^n; \|x - z\| < \varepsilon\} \subset X$.



Dans R^2 l'ensemble X est ouvert
puisque pour tout $x \in X$, il existe
un $\varepsilon > 0$ tel que la sphère ouverte de
rayon ε ,

$$B_\varepsilon(x) = \{z \in R^2; \|x - z\| < \varepsilon\} \subset X.$$

Soit $Y \subset \mathbb{R}^n$ un ensemble ouvert et $f : Y \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction à valeurs réelles.

Si $f \in C^1 / Y$ (f possède des dérivées partielles de premier ordre continues sur Y), pour toute paire de points $x, y \in Y$
développement de Taylor de premier ordre (version résidu)

$$f(y) = f(x) + \nabla f(x)^T (y - x) + \alpha(x, (y - x)) \|y - x\|$$

où

$$\lim_{(y-x) \rightarrow 0} \alpha(x, (y - x)) = 0$$

développement de Taylor sans résidu

il existe un vecteur z sur le segment de droite entre x et y

$$\left(z \in \mathfrak{S}(x, y) = \left\{ t \in \mathbb{R}^n : t = \theta x + (1 - \theta) y, \theta \in [0, 1] \right\} \right)$$

tel que

$$f(y) = f(x) + \nabla f(z)^T (y - x)$$

Si $f \in C^1 / Y$ (f possède des dérivées partielles de premier ordre continues sur Y), pour toute paire de points $x, y \in Y$
développement de Taylor de premier ordre (version résidu)

$$f(y) = f(x) + \nabla f(x)^T (y - x) + \alpha(x, (y - x)) \|y - x\|$$

où

$$\lim_{(y-x) \rightarrow 0} \alpha(x, (y - x)) = 0$$

Si $f \in C^1 / Y$ (f possède des dérivées partielles de premier ordre continues sur Y), pour tout $x \in Y$ et $d \in R^n$

développement de Taylor de premier ordre (version résidu)

$$f(x + \theta d) = f(x) + \nabla f(x)^T (x + \theta d - x) + \alpha(x, x + \theta d - x) \|x + \theta d - x\|$$

$$f(x + \theta d) = f(x) + \theta \nabla f(x)^T d + \alpha(x, \theta d) \|\theta d\| \quad (3.1)$$

pour tout θ , où $\alpha(x, \theta d)$ est une fonction de θ prenant des valeurs réelles telles que

$$\lim_{\theta \rightarrow 0} \alpha(x, \theta d) = 0$$

Lemme 3.1: Soient $Y \subset R^n$ un ensemble ouvert, $f : Y \rightarrow R^1$,
 $f \in C^1 / Y$, $x \in Y$ et $d \in R^n$. Alors

$$\lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{f(x + \theta d) - f(x)}{\theta} = \nabla f(x)^T d.$$

Preuve: Utilisant la relation (3.1)

$$f(x + \theta d) = f(x) + \theta \nabla f(x)^T d + \alpha(x, \theta d) \|\theta d\| \quad (3.1)$$

alors pour $\theta \neq 0$

$$\frac{f(x + \theta d) - f(x)}{\theta} - \frac{\alpha(x, \theta d) \|\theta d\|}{\theta} = \nabla f(x)^T d$$

$$\frac{f(x + \theta d) - f(x)}{\theta} \pm \alpha(x, \theta d) \|d\| = \nabla f(x)^T d$$

Preuve: Utilisant la relation (3.1)

$$f(x + \theta d) = f(x) + \theta \nabla f(x)^T d + \alpha(x, \theta d) \|\theta d\| \quad (3.1)$$

alors pour $\theta \neq 0$

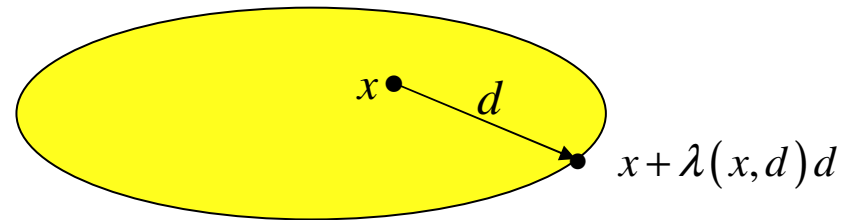
$$\frac{f(x + \theta d) - f(x)}{\theta} - \frac{\alpha(x, \theta d) \|\theta d\|}{\theta} = \nabla f(x)^T d$$

$$\frac{f(x + \theta d) - f(x)}{\theta} \pm \alpha(x, \theta d) \|\theta d\| = \nabla f(x)^T d$$

$$\lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{f(x + \theta d) - f(x)}{\theta} \pm \lim_{\theta \rightarrow 0} \alpha(x, \theta d) \|\theta d\| = \lim_{\theta \rightarrow 0} \nabla f(x)^T d$$

$$\lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{f(x + \theta d) - f(x)}{\theta} = \lim_{\theta \rightarrow 0} \nabla f(x)^T d. \quad \square$$

Définition: Soient $X \subset R^n$ et $f : X \rightarrow R^1$. Étant donné $x \in X$, $d \in R^n$ est une **direction réalisable à x** s'il existe un scalaire $\lambda(x, d) > 0$ tel que

$$(x + \lambda d) \in X \quad \forall \lambda \in [0, \lambda(x, d)].$$


Lemme 3.2: Soient $X \subset R^n$, $f \in C^1 / X$, et $x \in X$. Si $d \in R^n$ est une direction réalisable à x et $\nabla f(x)^T d < 0$, alors il existe un scalaire $\xi > 0$ tel que pour tout $0 < \tau \leq \xi$

$$f(x + \tau d) < f(x).$$

(i.e., d est une **direction de descente** à x .)

Lemme 3.2: Soient $X \subset \mathbb{R}^n$, $f \in C^1 / X$, et $x \in X$. Si $d \in \mathbb{R}^n$ est une direction réalisable à x et $\nabla f(x)^\top d < 0$, alors il existe un scalaire $\xi > 0$ tel que pour tout $0 < \tau \leq \xi$
 $f(x + \tau d) < f(x)$.
 (i.e., d est une **direction de descente** à x .)

Preuve : Puisque $\lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{f(x + \theta d) - f(x)}{\theta} = \nabla f(x)^\top d < 0$, alors il existe un scalaire $\xi > 0$ tel que pour tout $\tau \neq 0$, $-\xi \leq \tau \leq \xi$,

$$\frac{f(x + \tau d) - f(x)}{\tau} < 0.$$

Il suffit de restreindre τ à être positif pour avoir

$$f(x + \tau d) - f(x) < 0 \quad \text{ou} \quad f(x + \tau d) < f(x). \quad \square$$

Lemme 3.3: Soient $X \subset \mathbb{R}^n$ un ensemble ouvert, $f \in C^1 / X$.
Si x est un minimum local de f sur X , alors $\nabla f(x) = 0$.

Preuve. Par contradiction, supposons que x est un minimum local et que $\nabla f(x) \neq 0$. Considérons la direction $d = -\nabla f(x)$. Puisque X est ouvert, alors d est une direction réalisable à x , et $\nabla f(x)^T d = -\nabla f(x)^T \nabla f(x) < 0$, puisque $\nabla f(x) \neq 0$. Par le Lemme 3.2, $d = -\nabla f(x)$ est une direction de descente à x et par conséquent il est possible de déterminer un scalaire $\tau > 0$ tel que $x + \tau d \in B_\varepsilon(x)$ et $f(x + \tau d) < f(x)$, une contradiction. $\square$

Lemme 3.4: Soient $X \subset \mathbb{R}^n$ un ensemble ouvert, $f \in C^1 / X$.
Si x est un maximum local de f sur X , alors $\nabla f(x) = 0$.

Preuve. Similaire

Définition: Étant donné une matrice réelle D de dimension $n \times n$, la **forme quadratique** associée est la fonction $\psi : R^n \rightarrow R^1$ suivante

$$\psi(x) = x^T D x.$$

$$\begin{aligned} \psi(x_1, x_2, x_3) &= [x_1, x_2, x_3] \begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \\ &= [x_1, x_2, x_3] \begin{bmatrix} d_{11}x_1 + d_{12}x_2 + d_{13}x_3 \\ d_{21}x_1 + d_{22}x_2 + d_{23}x_3 \\ d_{31}x_1 + d_{32}x_2 + d_{33}x_3 \end{bmatrix} \\ &= (d_{11}x_1^2 + d_{21}x_1x_2 + d_{31}x_1x_3) + (d_{12}x_1x_2 + d_{22}x_2^2 + d_{32}x_2x_3) + (d_{13}x_1x_3 + d_{23}x_2x_3 + d_{33}x_3^2) \\ &= d_{11}x_1^2 + d_{22}x_2^2 + d_{33}x_3^2 + (d_{12} + d_{21})x_1x_2 + (d_{13} + d_{31})x_1x_3 + (d_{23} + d_{32})x_2x_3 \end{aligned}$$

Définition: Étant donné une matrice réelle D de dimension $n \times n$, la **forme quadratique** associée est la fonction $\psi : R^n \rightarrow R^1$ suivante

$$\psi(x) = x^T D x.$$

Définition: Une matrice réelle D de dimension $n \times n$ est **semi-définie positive** (**définie positive**) si $\psi(x) \geq 0 \quad \forall x \in R^n$ ($\psi(x) > 0 \quad \forall x \in R^n, x \neq 0$).

Résultats: Une matrice D réelle symétrique de dimension $n \times n$ est **semi-définie positive** (**définie positive**) si et seulement si

- i) toutes ses valeurs propres sont **non négatives** (**positives**);
- ii) tous les **mineurs principaux sont non négatifs** (tous les "leading" mineurs principaux sont positifs).

$$\begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} \end{bmatrix}$$

Mineurs principaux

d'ordre 1:

$$d_{11}, d_{22}, d_{33}$$

d'ordre 2:

$$\begin{vmatrix} d_{11} & d_{12} \\ d_{21} & d_{22} \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} d_{22} & d_{23} \\ d_{32} & d_{33} \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} d_{11} & d_{13} \\ d_{31} & d_{33} \end{vmatrix}$$

d'ordre 3:

$$\begin{vmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} \end{vmatrix}$$

Leading mineurs principaux

d'ordre 1:

$$d_{11}$$

d'ordre 2:

$$\begin{vmatrix} d_{11} & d_{12} \\ d_{21} & d_{22} \end{vmatrix}$$

d'ordre 3:

$$\begin{vmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} \end{vmatrix}$$

Conditions de 2^{ième} ordre pour minimum local

Définition: Soit $\nabla^2 f(x) = \left[\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_i \partial x_j} \right]$ le **Hessien** (matrice réelle $n \times n$) au point x d'une fonction f de classe C^2 (ayant des dérivées partielles continues d'ordre 2).

Lemme 3.5: Soient $X \subset \mathbb{R}^n$ un ensemble ouvert et $f \in C^2 / X$. Si $x \in X$ est un minimum local de f sur X , alors $\nabla f(x) = 0$ et $\nabla^2 f(x)$ est une matrice semi-définie positive.

Lemme 3.5: Soient $X \subset \mathbb{R}^n$ un ensemble ouvert et $f \in C^2 / X$.
Si $x \in X$ est un minimum local de f sur X , alors $\nabla f(x) = 0$ et $\nabla^2 f(x)$ est une matrice semi-définie positive.

Preuve. La première condition a été démontrée au Lemme 3.4.
La seconde condition est établie à partir du développement de Taylor de 2^{ième} ordre:

$$f(x + \theta d) = f(x) + \theta \nabla f(x)^T d + \frac{1}{2} \theta^2 d^T \nabla^2 f(x) d + \bar{\alpha}(x, \theta d) \|\theta d\|^2$$

où $\lim_{\theta \rightarrow 0} \bar{\alpha}(x, \theta d) = 0$.

Puisque $\nabla f(x) = 0$, alors

$$\begin{aligned} f(x + \theta d) - f(x) &= \frac{1}{2} \theta^2 d^T \nabla^2 f(x) d + \bar{\alpha}(x, \theta d) \|\theta d\|^2 \\ &= \frac{1}{2} \theta^2 \left[d^T \nabla^2 f(x) d + 2\bar{\alpha}(x, \theta d) \|d\|^2 \right]. \end{aligned}$$

Preuve. La première condition a été démontrée au Lemme 3.4.
La seconde condition est établie à partir du développement de Taylor de 2^{ième} ordre:

$$f(x + \theta d) = f(x) + \theta \nabla f(x)^T d + \frac{1}{2} \theta^2 d^T \nabla^2 f(x) d + \bar{\alpha}(x, \theta d) \|\theta d\|^2$$

où $\lim_{\theta \rightarrow 0} \bar{\alpha}(x, \theta d) = 0$.

Puisque $\nabla f(x) = 0$, alors

$$\begin{aligned} f(x + \theta d) - f(x) &= \frac{1}{2} \theta^2 d^T \nabla^2 f(x) d + \bar{\alpha}(x, \theta d) \|\theta d\|^2 \\ &= \frac{1}{2} \theta^2 \left[d^T \nabla^2 f(x) d + 2\bar{\alpha}(x, \theta d) \|d\|^2 \right]. \end{aligned}$$

Par contradiction, si $\nabla^2 f(x)$ n'est pas semi-définie positive, alors il existe un $\bar{d} \in \mathbb{R}^n$ tel que $\bar{d}^T \nabla^2 f(x) \bar{d} < 0$.

Ainsi, pour $\bar{\theta} > 0$ suffisamment petit, $x + \bar{\theta} \bar{d} \in B_\varepsilon(x)$ et $\bar{\alpha}(x, \bar{\theta} \bar{d}) \rightarrow 0$.

Par conséquent

$$\bar{d}^T \nabla^2 f(x) \bar{d} + 2\bar{\alpha}(x, \bar{\theta} \bar{d}) \|\bar{d}\|^2 < 0$$

et alors $f(x + \bar{\theta} \bar{d}) - f(x) < 0$ ou $f(x + \bar{\theta} \bar{d}) < f(x)$, contredisant le fait que x est un minimum local de f . □

Contre-exemple: Les conditions que $\nabla f(x) = 0$ et que $\nabla^2 f(x)$ est une matrice semi-définie positive ne sont pas suffisantes pour assurer que x est un minimum local.

Au point $x = y = 0$

$$f(x, y) = x^3 + y^3$$

$$f(0, 0) = 0$$

$$\nabla f(x, y) = [3x^2, 3y^2]^T$$

$$\nabla f(0, 0) = [0, 0]^T$$

$$\nabla^2 f(x, y) = \begin{pmatrix} 6x & 0 \\ 0 & 6y \end{pmatrix}$$

$$\nabla^2 f(0, 0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ semi-def. pos.}$$

Donc les conditions sont satisfaites au point $x = y = 0$.

Mais pour un $\varepsilon > 0$ suffisamment petit, $\left[-\frac{\varepsilon}{2}, -\frac{\varepsilon}{2}\right] \in B_\varepsilon(0, 0)$ et

$$f\left(-\frac{\varepsilon}{2}, -\frac{\varepsilon}{2}\right) = \left(-\frac{\varepsilon}{2}\right)^3 + \left(-\frac{\varepsilon}{2}\right)^3 = -\frac{2\varepsilon^3}{8} < 0 = f(0, 0),$$

et $[0, 0]$ ne peut être un minimum local même si les conditions sont satisfaites.

Lemme 3.6: Soient $X \subset \mathbb{R}^n$ un ensemble ouvert et $f \in C^2 / X$.
 Si $\nabla f(x^*) = 0$ et $\nabla^2 f(x^*)$ est une matrice définie positive, alors
 il existe un $\varepsilon > 0$ suffisamment petit tel que $f(x^*) < f(x)$ pour
 tout $x \in B_\varepsilon(x^*)$.

Preuve. Se référant au Lemme 3.5,

$$f(x^* + \theta d) = f(x^*) + \theta \nabla f(x^*)^\top d + \frac{1}{2} \theta^2 d^\top \nabla^2 f(x^*) d + \bar{\alpha}(x^*, \theta d) \|\theta d\|^2$$

où $\lim_{\theta \rightarrow 0} \bar{\alpha}(x^*, \theta d) = 0$.

Puisque $\nabla f(x) = 0$, alors

$$f(x^* + \theta d) - f(x^*) = \frac{1}{2} \theta^2 \left[d^\top \nabla^2 f(x^*) d + 2\bar{\alpha}(x^*, \theta d) \|d\|^2 \right].$$

Il est facile de vérifier que $d^T \nabla^2 f(x^*) d \geq \beta \|d\|^2$ où $\beta > 0$ est la plus petite valeur propre de $\nabla^2 f(x^*)$. En effet, sous l'hypothèse que $f \in C^2 / X$, alors $\nabla^2 f(x^*)$ est symétrique.

Par conséquent, il existe une matrice orthogonale P (i.e., $P^T = P^{-1}$) telle que

$$\nabla^2 f(x^*) = P \Delta P^T$$

où Δ est une matrice diagonale comportant les valeurs propres de $\nabla^2 f(x^*)$ sur la diagonale et où les colonnes de P sont les vecteurs propres normalisés de $\nabla^2 f(x^*)$.

Donc

$$d^T \nabla^2 f(x^*) d = d^T P \Delta P^T d = y^T \Delta y = \sum_{i=1}^n \lambda_i y_i^2$$

où les λ_i sont les valeurs propres de $\nabla^2 f(x^*)$.

Ainsi, si $\beta = \min_{i=1, \dots, n} \{\lambda_i\}$, alors

$$d^T P \Delta P^T d = \sum_{i=1}^n \lambda_i y_i^2 \geq \beta \sum_{i=1}^n y_i^2 = \beta d^T P P^T d = \beta \|d\|^2.$$

Preuve. Se référant au Lemme 3.5,

$$f(x^* + \theta d) = f(x^*) + \theta \nabla f(x^*)^T d + \frac{1}{2} \theta^2 d^T \nabla^2 f(x^*) d + \bar{\alpha}(x^*, \theta d) \|\theta d\|$$

où $\lim_{\theta \rightarrow 0} \bar{\alpha}(x^*, \theta d) = 0$.

Puisque $\nabla f(x) = 0$, alors

$$f(x^* + \theta d) - f(x^*) = \frac{1}{2} \theta^2 \left[d^T \nabla^2 f(x^*) d + 2\bar{\alpha}(x^*, \theta d) \|d\|^2 \right].$$

Nous venons de vérifier que $d^T \nabla^2 f(x^*) d \geq \beta \|d\|^2$ où $\beta > 0$ est la plus petite valeur propre de $\nabla^2 f(x^*)$.

Donc

$$\begin{aligned} f(x^* + \theta d) - f(x^*) &\geq \frac{1}{2} \theta^2 \left[\beta \|d\|^2 + 2\bar{\alpha}(x^*, \theta d) \|d\|^2 \right] \\ &\geq \frac{1}{2} \theta^2 \|d\|^2 \left[\beta + 2\bar{\alpha}(x^*, \theta d) \right]. \end{aligned}$$

Puisque $\beta > 0$, il s'ensuit que pour $\theta > 0$ suffisamment petit

$$(x^* + \theta d) \in B_\varepsilon(x^*) \quad \text{et} \quad \beta + 2\bar{\alpha}(x^*, \theta d) > 0$$

et ainsi

$$f(x^* + \theta d) - f(x^*) > 0 \quad \text{ou} \quad f(x^* + \theta d) > f(x^*). \quad \square$$

Corollaire 3.7: Soient $X \subset \mathbb{R}^n$ un ensemble ouvert et $f \in C^2 / X$.
Si $\nabla f(x^*) = 0$ et $\nabla^2 f(x^*)$ est une matrice définie positive, alors
 x^* est un minimum local de f sur X .

3.2 Méthodes itératives de résolution

Une **méthode itérative** pour optimiser une fonction $f : R^n \rightarrow R^1$ génère une suite de points $\{x^k\}$ où x^0 est un point initial choisi dans R^n et où

$$x^{k+1} = x^k + \sigma_k d^k$$

i.e., x^{k+1} est généré à partir de x^k en choisissant une **direction** $d^k \in R^n$ et en prenant un **pas** $\sigma_k \in R^1$ dans cette direction pour s'éloigner de x^k .

Les méthodes diffèrent par leurs choix de **direction** d^k et de **pas** σ_k .

Méthode du gradient

Supposons que $f \in C^1$.

Dans cette méthode nous utilisons l'information au niveau du gradient pour déterminer la direction d^k :

$$d^k = -\nabla f(x^k).$$

Si $\nabla f(x^k) \neq 0$, alors la direction $d_k = -\nabla f(x^k)$

est une direction de descente au point x^k puisque

$$\nabla f(x^k)^T d_k = \nabla f(x^k)^T (-\nabla f(x^k)) = -\nabla f(x^k)^T (\nabla f(x^k)) < 0$$

La valeur de f diminue à mesure que les courbes de niveau se rapproche du centre des ellipses

Étape 0 Soit $f : R^n \rightarrow R^1$ à minimiser.

$$f \in C^1$$

Choisir solution initiale x^0

Poser $k = 0$

Étape 1 Si $\nabla f(x^k) = 0$, alors l'algo.
s'arrête avec $x^* = x^k$.

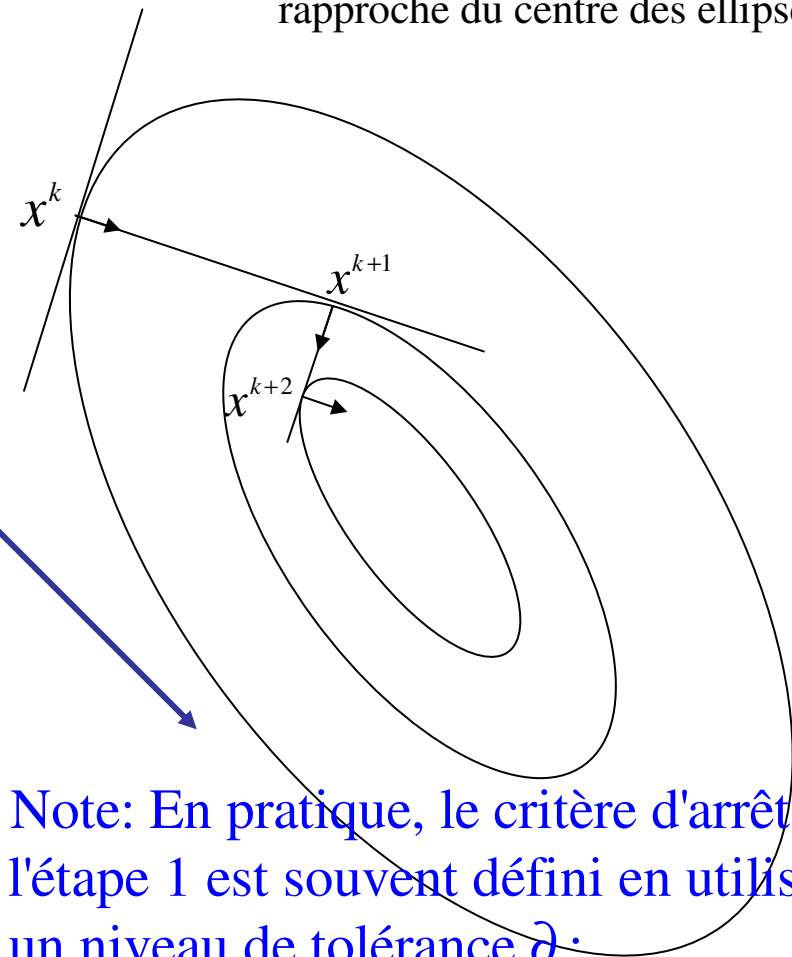
Étape 2 Déterminer σ_k tel que

$$f(x^k - \sigma_k \nabla f(x^k)) = \min_{\sigma \geq 0} \left\{ f(x^k - \sigma \nabla f(x^k)) \right\}.$$

$$\text{Poser } x^{k+1} = x^k - \sigma_k \nabla f(x^k).$$

Poser $k = k + 1$.

Répéter l'étape 1.



Note: En pratique, le critère d'arrêt à l'étape 1 est souvent défini en utilisant un niveau de tolérance ∂ :

$$\|\nabla f(x^k)\| < \partial$$

Lemme 3.9: (Convergence) Soit $f \in C^1$. Tout point limite x^* d'une sous-suite convergente de la suite générée par la méthode du gradient est tel que $\nabla f(x^*) = 0$.

Preuve. Considérons la sous-suite $\{x^{k_j}\}$ de $\{x^k\}$ telle que $\{x^{k_j}\} \rightarrow x^*$.

Par conséquent, se référant aux suites

$$\begin{aligned}\{x^k\} &= \{\dots, x^{k_j}, x^{k_j+1}, \dots, x^{k_j+\tau}, \dots\} \\ \{x^{k_j}\} &= \{\dots, x^{k_j}, \quad, x^{k_j+1}, \dots\} \text{ où } x^{k_j+1} = x^{k_j+\tau}.\end{aligned}$$

Preuve. Considérons la sous-suite $\{x^{k_j}\}$ de $\{x^k\}$ telle que $\{x^{k_j}\} \rightarrow x^*$.

Par conséquent, se référant aux suites

$$\{x^k\} = \{\dots, x^{k_j}, x^{k_{j+1}}, \dots, x^{k_{j+\tau}}, \dots\}$$

$$\{x^{k_j}\} = \{\dots, x^{k_j}, \quad, x^{k_{j+1}}, \dots\} \text{ où } x^{k_{j+1}} = x^{k_{j+\tau}}.$$

Ainsi, se référant à la suite $\{x^k\}$

$$f(x^{k_{j+1}}) = f(x^{k_{j+\tau}}) \leq \dots \leq f(x^{k_{j+1}})$$

$$f(x^{k_{j+1}}) \leq f(x^{k_{j+1}}) = \text{Min}_{\sigma \geq 0} \left\{ f\left(x^{k_j} - \sigma \nabla f(x^{k_j})\right) \right\}.$$

Donc

$$f(x^{k_{j+1}}) \leq f\left(x^{k_j} - \sigma \nabla f(x^{k_j})\right) \quad \forall \sigma \geq 0.$$

$$f\left(x^{k_{j+1}}\right) \leq f\left(x^{k_j+1}\right) \quad \left(\text{puisque } k_{j+1} \geq k_j + 1\right)$$

$$f\left(x^{k_{j+1}}\right) = \underset{\sigma \geq 0}{\text{Min}} \left\{ f\left(x^{k_j} - \sigma \nabla f\left(x^{k_j}\right)\right) \right\}.$$

Ainsi

$$f\left(x^{k_{j+1}}\right) \leq f\left(x^{k_j} - \sigma \nabla f\left(x^{k_j}\right)\right) \quad \forall \sigma \geq 0.$$

Puisque $f \in C^1$, f est continue sur R^n et

$$\lim_{j \rightarrow \infty} f\left(x^{k_{j+1}}\right) = f\left(x^*\right)$$

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \left[f\left(x^{k_j} - \sigma \nabla f\left(x^{k_j}\right)\right) \right] = f\left(x^* - \sigma \nabla f\left(x^*\right)\right) \quad \forall \sigma \geq 0.$$

Donc

$$f\left(x^*\right) \leq f\left(x^* - \sigma \nabla f\left(x^*\right)\right) \quad \forall \sigma \geq 0. \quad (3.2)$$

$$f(x^*) \leq f(x^* - \sigma \nabla f(x^*)) \quad \forall \sigma \geq 0. \quad (3.2)$$

Par conséquent $\nabla f(x^*) = 0$ car autrement si $\nabla f(x^*) \neq 0$, alors $-\nabla f(x^*)$ est une direction de descente et se référant au lemme 3.2, il existe un scalaire $\tau > 0$ tel que $f(x^* - \tau \nabla f(x^*)) < f(x^*)$. Nous obtenons une contradiction à la relation (3.2). $\square$

Le prochain résultat indique que la méthode de descente se **déplace en zig-zag** puisque les directions utilisées à deux itérations successives sont à angle droit.

Lemme 3.10: (Déplacement en zig-zag)

Si $x^{k+1} = x^k - \sigma_k \nabla f(x^k)$ où σ_k est tel que

$$f(x^k - \sigma_k \nabla f(x^k)) = \min_{\sigma \geq 0} \{f(x^k - \sigma \nabla f(x^k))\},$$

$$\text{alors } \nabla f(x^{k+1})^T \nabla f(x^k) = 0.$$

Preuve. Si $\nabla f(x^k) = 0$, alors la preuve est complétée.

Si $\nabla f(x^k) \neq 0$, considérons la fonction $\varphi: \{\sigma \in \mathbb{R}^1: \sigma \geq 0\} \rightarrow \mathbb{R}^1$

$$\varphi(\sigma) = f(x^k - \sigma \nabla f(x^k)). \quad \boxed{\varphi(\sigma) = f(g(\sigma)) \quad \text{avec} \quad g(\sigma) = x^k - \sigma \nabla f(x^k)}$$

Par dérivation en chaîne,

$$\varphi'(\sigma) = -\nabla f(x^k)^T \nabla f(x^k - \sigma \nabla f(x^k)).$$

Par dérivation en chaîne,

$$\varphi'(\sigma) = -\nabla f(x^k)^T \nabla f(x^k - \sigma \nabla f(x^k)).$$

Puisque σ_k est un minimum local de $\varphi(\sigma)$, alors par le

lemme 3.3 $\varphi'(\sigma_k) = 0$,

et alors

$$0 = \varphi'(\sigma_k) = -\nabla f(x^k)^T \nabla f(x^k - \sigma_k \nabla f(x^k)) = -\nabla f(x^k)^T \nabla f(x^{k+1}).$$

□

Notes:

- i) L'ordre de convergence de la méthode du gradient est linéaire.
- ii) Au début de son application, la méthode permet de faire diminuer la valeur de la fonction économique relativement rapidement, mais son efficacité à ce chapitre diminue au cours des itérations.
- iii) La méthode du gradient est la méthode la plus rapide marginalement ("steepest descent method") :

$$\nabla f(x)^T d = \|\nabla f(x)\| \|d\| \cos \theta$$

où θ est l'angle entre d et $\nabla f(x)$. Ainsi, parmi les directions d de norme 1 ($\|d\|=1$), celle minimisant $\nabla f(x)^T d$ a un angle de 180° car $\cos(180^\circ) = -1$. Ainsi, cette direction d correspond à

$$-\frac{\nabla f(x)}{\|\nabla f(x)\|}.$$

Méthode de Newton

Méthode de deuxième ordre supposant que $f \in C^2$ et utilisant l'information au niveau du Hessien de f .

Extension directe de la méthode pour les fonctions à une seule variable.

Méthode de Newton

Processus itératif pour construire une suite de points $\{x^k\}$ en partant d'un point x^0 dans le voisinage d'une solution optimale x^* . Pour obtenir x^{k+1} , considérons l'approximation quadratique de f

$$Q_k(x) = f(x^k) + \nabla f(x^k)^T (x - x^k) + \frac{1}{2} (x - x^k)^T \nabla^2 f(x^k) (x - x^k).$$

Par le Théorème de Taylor, il existe un z entre x et x^k tel que

$$f(x) = f(x^k) + \nabla f(x^k)^T (x - x^k) + \frac{1}{2} (x - x^k)^T \nabla^2 f(z) (x - x^k)$$

Méthode de Newton

Processus itératif pour construire une suite de points $\{x^k\}$ en partant d'un point x^0 dans le voisinage d'une solution optimale x^* . Pour obtenir x^{k+1} , considérons l'approximation quadratique de f

$$Q_k(x) = f(x^k) + \nabla f(x^k)^T (x - x^k) + \frac{1}{2} (x - x^k)^T \nabla^2 f(x^k) (x - x^k).$$

$$\nabla Q_k(x) = \nabla f(x^k) + \nabla^2 f(x^k)(x - x^k)$$

x^{k+1} est le point où le gradient de l'approximation $Q_k(x)$ s'annule:

$$0 = \nabla Q_k(x^{k+1}) = \nabla f(x^k) + \nabla^2 f(x^k)(x^{k+1} - x^k) \quad \Leftrightarrow$$

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

ordre de convergence: au moins égal à 2 si x^0 est choisi suffisamment près de x^* où $\nabla f(x^*) = 0$.

Note: le Hessien $\nabla^2 f(x^k)$ doit être une matrice non-singulière.

Supposons que la matrice A est symétrique

$$\begin{aligned}
 \varphi(x - x^k) &= \frac{1}{2} (x - x^k)^T A (x - x^k) = \frac{1}{2} x^T A x - x^{kT} A x + \frac{1}{2} x^{kT} A x^k \\
 &= \frac{1}{2} (x_1 - x_1^k, x_2 - x_2^k)^T \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_1 - x_1^k \\ x_2 - x_2^k \end{pmatrix} \\
 &= \frac{1}{2} (x_1, x_2)^T \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} - (x_1^k, x_2^k)^T \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} (x_1^k, x_2^k)^T \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_1^k \\ x_2^k \end{pmatrix} \\
 &= \left\{ \frac{1}{2} a_{11} x_1^2 + a_{12} x_1 x_2 + \frac{1}{2} a_{22} x_2^2 \right\} - (x_1^k, x_2^k)^T \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} (x_1^k, x_2^k)^T \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_1^k \\ x_2^k \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \nabla \varphi(x - x^k) &= \begin{bmatrix} a_{11} x_1 + a_{12} x_2 \\ a_{12} x_1 + a_{22} x_2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_1^k \\ x_2^k \end{pmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} - \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_1^k \\ x_2^k \end{pmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_1 - x_1^k \\ x_2 - x_2^k \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

Méthode de Newton

Processus itératif pour construire une suite de points $\{x^k\}$ en partant d'un point x^0 dans le voisinage d'une solution optimale x^* . Pour obtenir x^{k+1} , considérons l'approximation quadratique de f

$$Q_k(x) = f(x^k) + \nabla f(x^k)^T (x - x^k) + \frac{1}{2} (x - x^k)^T \nabla^2 f(x^k) (x - x^k).$$

x^{k+1} est le point où le gradient de l'approximation $Q_k(x)$ s'annule:

$$0 = \nabla Q_k(x^{k+1}) = \nabla f(x^k) + \nabla^2 f(x^k)(x^{k+1} - x^k) \quad \Leftrightarrow$$

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

ordre de convergence: au moins égal à 2 si x^0 est choisi suffisamment près de x^* où $\nabla f(x^*) = 0$.

Méthode de Newton avec pas optimal

Pour contrer la difficulté de choisir x^0 dans le voisinage de x^* où $\nabla f(x^*) = 0$.

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

Méthode itérative où la direction d^k au point x^k est la suivante:

$$d^k = - \left[\nabla^2 f(x^k) \right]^{-1} \nabla f(x^k).$$

d^k est bien une direction de descente si le Hessien $\nabla^2 f(x^k)$ est une matrice positive définie et si $\nabla f(x^k) \neq 0$:

$$\nabla f(x^k)^T d^k = - \nabla f(x^k)^T \left[\nabla^2 f(x^k) \right]^{-1} \nabla f(x^k) < 0.$$

Méthode de Newton avec pas optimal

Pour contrer la difficulté de choisir x^0 dans le voisinage de x^* où $\nabla f(x^*) = 0$.

Méthode itérative où la direction d^k au point x^k est la suivante:

$$d^k = -\left[\nabla^2 f(x^k)\right]^{-1} \nabla f(x^k).$$

Pas optimal σ_k défini comme suit:

$$f(x^{k+1}) = f\left(x^k - \sigma_k \left[\nabla^2 f(x^k)\right]^{-1} \nabla f(x^k)\right) =$$
$$\text{Min}_{\sigma \geq 0} \left\{ f\left(x^k - \sigma \left[\nabla^2 f(x^k)\right]^{-1} \nabla f(x^k)\right) \right\}.$$

ordre de convergence: au moins égal à 2

Méthode de Newton modifiée avec pas optimal

Pour contrer la difficulté de choisir x^0 dans le voisinage de x^* où $\nabla f(x^*) = 0$.

Si le Hessien $\nabla^2 f(x^k)$ n'est pas une matrice positive définie, considérons la direction d^k suivante au point x^k :

$$d^k = -\left[\varepsilon_k I + \nabla^2 f(x^k)\right]^{-1} \nabla f(x^k)$$

où I est la matrice identité et où $\varepsilon_k \geq 0$ est la plus petite valeur assurant que la matrice $\left[\varepsilon_k I + \nabla^2 f(x^k)\right]$ a toute ses valeurs propres positives (i.e., est définie positive).

ordre de convergence: au moins égal à 2