

Cours d'optimisation
ENSAI Rennes

Jocelyne Erhel

11 décembre 2019

Table des matières

1	Problèmes d'optimisation	4
1.1	Un peu de topologie	4
1.1.1	Ouvert et fermé	4
1.1.2	Fonction continue à plusieurs variables	5
1.2	Minimum local ou global	6
1.2.1	Contraintes d'égalité et d'inégalité	6
1.3	Condition suffisante d'existence	8
1.4	Optimisation convexe	9
1.4.1	Ensemble convexe	9
1.4.2	Fonction convexe	9
1.4.3	Propriétés d'une fonction convexe	10
2	Fonctions à une variable	11
2.1	Dérivation	11
2.2	Convexité et dérivabilité	12
2.3	Minimisation sans contrainte	13
2.3.1	Conditions d'optimalité d'ordre 1	13
2.3.2	Conditions d'optimalité d'ordre 2	14
3	Algèbre linéaire	16
3.1	Vecteurs	16
3.1.1	Formes linéaires	16
3.2	Matrices	17
3.2.1	Applications linéaires	18
3.2.2	Formes quadratiques	18
3.3	Matrices symétriques	19
3.3.1	Matrices symétriques définies ou semi-définies	19

4	Calcul différentiel	22
4.1	Fonctions de classe C^1	22
4.2	Fonctions de classe C^2	23
4.2.1	Forme linéaire et forme quadratique	24
4.3	Fonction vectorielle de classe C^1	25
4.3.1	Application linéaire	26
4.4	Convexité et différentiation	27
4.4.1	Forme quadratique convexe	28
5	Optimisation sans contrainte	29
5.1	Condition d'optimalité d'ordre 1	29
5.1.1	Forme linéaire	30
5.1.2	Forme quadratique	30
5.2	Condition d'optimalité d'ordre 2	31
5.2.1	Synthèse	33
5.3	Point selle	33
6	Optimisation avec contraintes d'égalité	35
6.1	Condition de Qualification des contraintes CQC	35
6.2	Lagrangien	36
6.3	Condition d'optimalité d'ordre 1	37
6.4	Condition d'optimalité d'ordre 2	39
6.5	Sensibilité d'une contrainte	39
6.6	Fonction quadratique et contraintes linéaires d'égalité	40
7	Optimisation avec contraintes d'inégalité	42
7.1	Condition de Qualification des contraintes CQC	42
7.2	Lagrangien	43
7.3	Condition d'optimalité d'ordre 1	43
7.4	Point selle du Lagrangien	45
7.4.1	Optimisation convexe	46
7.4.2	Dualité	46
8	Optimisation avec contraintes mixtes d'égalité et d'inégalité	48
8.1	Condition de Qualification des contraintes CQC	48
8.2	Lagrangien	49
8.3	Condition d'optimalité d'ordre 1	50

9	Méthodes numériques	51
9.1	Méthodes itératives	51
9.1.1	Critères d'arrêt	51
9.1.2	Direction de descente	52
9.2	Méthode de gradient	52
9.2.1	Méthode de gradient à pas fixe	53
9.2.2	Méthode de gradient à pas variable	53
9.2.3	Recherche linéaire	54
9.3	Méthode de Newton	54
9.3.1	Approximation de f à l'ordre 2	56
9.3.2	Convergence globale	56
9.3.3	Algorithme de quasi-Newton	57
9.3.4	Algorithme de Newton inexact	57
9.3.5	Minimisation avec contraintes d'égalité	58
10	Bibliographie	59

Chapitre 1

Problèmes d'optimisation

1.1 Un peu de topologie

Soit n un entier non nul. L'ensemble \mathbf{R}^n est un espace vectoriel normé de dimension n . Un vecteur x de \mathbf{R}^n a n coordonnées et est noté

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{pmatrix} = (x_i)_{1 \leq i \leq n}.$$

Le produit scalaire de deux vecteurs x et y est un scalaire défini par

$$\langle x, y \rangle = \sum_{i=1}^n x_i y_i.$$

La norme euclidienne du vecteur x est définie par

$$\|x\|^2 = \langle x, x \rangle = \sum_{i=1}^n x_i^2.$$

1.1.1 Ouvert et fermé

Une boule ouverte de centre x et de rayon $r > 0$ est définie par

$$B(x, r) = \{y \in \mathbf{R}^n, \|y - x\| < r\}.$$

Une boule fermée de centre x et de rayon $r > 0$ est définie par

$$\overline{B}(x, r) = \{y \in \mathbf{R}^n, \|y - x\| \leq r\}.$$

Un ouvert non vide Ω de \mathbf{R}^n est tel que

$$\forall x \in \Omega, \exists r > 0, B(x, r) \subset \Omega.$$

Un fermé \mathbf{K} de \mathbf{R}^n est tel que son ensemble complémentaire est un ouvert. L'ensemble \mathbf{R}^n est à la fois ouvert et fermé, ainsi que l'ensemble vide.

Les intervalles ouverts de \mathbf{R} sont des ensembles ouverts, les intervalles fermés de \mathbf{R} sont des ensembles fermés.

Exemple 1.1.1.

$$K_1 = \{x \in \mathbf{R}^n, x_i > 0, i = 1, \dots, n\}.$$

L'ensemble K_1 est un ouvert de \mathbf{R}^n .

$$K_2 = \{x \in \mathbf{R}^n, x_i \geq 0, i = 1, \dots, n\}.$$

L'ensemble K_2 est un fermé de \mathbf{R}^n .

dessins en cours

1.1.2 Fonction continue à plusieurs variables

Soit Ω un ouvert de \mathbf{R}^n et f une fonction scalaire à plusieurs variables de Ω dans \mathbf{R} . On note $f(x)$ ou $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ la valeur de f en x .

La fonction f est continue en x si et seulement si

$$\lim_{\|y\| \rightarrow 0} f(x + y) = f(x).$$

Soit F une fonction vectorielle à plusieurs variables de Ω dans \mathbf{R}^p . On note $F(x) = (F_i(x))_{1 \leq i \leq p}$ le vecteur valeur de F en x , où F_i est une fonction scalaire à plusieurs variables. La fonction F est continue en x si et seulement si F_i est continue pour tout $i = 1, \dots, p$.

1.2 Minimum local ou global

Soit Ω un ouvert de \mathbf{R}^n et f une fonction scalaire à plusieurs variables de Ω dans \mathbf{R} . Soit \mathbf{K} un sous-ensemble non vide de Ω . Un problème de minimisation consiste à trouver un point x^* dans \mathbf{K} tel que la valeur $f(x^*)$ soit minimale dans \mathbf{K} . L'ensemble \mathbf{K} est appelé ensemble admissible et la fonction f est l'objectif ou le coût.

Définition 1.2.1. *Le point $x^* \in \mathbf{K}$ est un point de minimum global dans \mathbf{K} , et la valeur $f(x^*)$ est le minimum global de f dans \mathbf{K} , si et seulement si*

$$\forall x \in \mathbf{K}, f(x) \geq f(x^*).$$

Définition 1.2.2. *Le point $x^* \in \mathbf{K}$ est un point de minimum local dans \mathbf{K} , et la valeur $f(x^*)$ est un minimum local de f dans \mathbf{K} si et seulement s'il existe une boule ouverte $B(x^*, r)$ telle que*

$$\forall x \in B \cap \mathbf{K}, f(x) \geq f(x^*).$$

Dans ce cours, on s'intéresse au problème de minimisation :

$$\min_{x \in \mathbf{K}} f(x) \tag{1.1}$$

Un problème de minimisation, local ou global, peut n'avoir aucune solution, une solution unique, plusieurs solutions. S'il existe un point de minimum global, sa valeur est unique. Par contre, il peut y avoir plusieurs valeurs de minima locaux.

Si la fonction g admet un maximum local en x^* , alors la fonction $f = -g$ admet un minimum local en x^* . Donc la recherche d'un maximum peut se faire en cherchant le minimum de la fonction opposée.

Dans la suite du cours, on étudie l'existence et l'unicité de solutions. Le cas convexe est important car les résultats sont plus nombreux.

On étudie ensuite les conditions nécessaires d'existence dans le cas différentiable. Celles-ci permettent de construire des algorithmes de calcul.

dessins en cours

1.2.1 Contraintes d'égalité et d'inégalité

Si $\mathbf{K} = \Omega$, il s'agit d'un problème d'optimisation sans contrainte. L'ensemble admissible est donc un ouvert.

Sinon, l'ensemble K représente des contraintes. Dans ce cours, on considère des contraintes d'égalité ou d'inégalité large.

Soit $g_i, i = 1, \dots, p$ et $q_j, j = 1, \dots, m$ des fonctions de Ω dans \mathbf{R} . Les contraintes d'égalité sont définies par $g_i(x) = 0, i = 1, \dots, p$ et les contraintes d'inégalité par $q_j(x) \leq 0, j = 1, \dots, m$.

Définition 1.2.3. *L'ensemble admissible pour les contraintes d'égalité et d'inégalité, noté \mathbf{K} , est l'ensemble des points qui respectent les contraintes :*

$$\mathbf{K} = \{x \in \Omega, g_i(x) = 0, i = 1, \dots, p, q_j(x) \leq 0, j = 1, \dots, m\}.$$

Si $q_j(x) = 0$, la contrainte j est active en x . Sinon, elle est inactive.

Dans ce cours, les contraintes seront en général des fonctions continues. Lorsque f est définie dans l'espace entier, l'ensemble admissible avec des contraintes d'égalité ou d'inégalité continues est un fermé.

Théorème 1.2.1. *Si $\Omega = \mathbf{R}^n$, si \mathbf{K} est non vide et si les fonctions g_i et q_j sont continues, alors \mathbf{K} est un ensemble fermé.*

Voici quelques exemples d'ensembles admissibles avec des contraintes continues.

Exemple 1.2.1.

$$K = \{x \in \mathbf{R}^n, \|x - a\| \leq r\}.$$

L'ensemble admissible est une boule fermée et bornée, il y a une contrainte d'inégalité : $q(x) = \|x - a\| - r$.

Exemple 1.2.2.

$$K = \{x \in \mathbf{R}^n, b^T x = 0\},$$

où $b \in \mathbf{R}^n$. L'ensemble admissible est un hyperplan fermé non borné, il y a une contrainte d'égalité : $g(x) = b^T x$.

Exemple 1.2.3.

$$K = \{x \in \mathbf{R}^n, x_i \geq 0, i = 1, \dots, n\}.$$

L'ensemble admissible est un fermé non borné, il y a n contraintes d'inégalité $q_i(x) = -x_i$. il y a n contraintes d'égalité : $g_i(x) = -x_i$.

1.3 Condition suffisante d'existence

Dans le cas d'un problème d'optimisation avec contraintes (plus précisément K fermé), il existe une solution sous certaines hypothèses sur l'ensemble admissible ou la fonction coût.

Théorème 1.3.1. *Si \mathbf{K} est non vide, fermé et borné, et si f est continue, alors il existe au moins un point de minimum global dans \mathbf{K} , et aussi un point de maximum global.*

Exemple 1.3.1.

$$K = \{x \in \mathbf{R}^n, \|x\| \leq 1\}.$$

L'ensemble admissible est une boule fermée, donc est non vide, fermé et borné.

$$f(x) = -\|x\|^2.$$

La fonction f est continue, donc il existe un point de minimum global.

On peut le vérifier directement. En effet $\forall x \in K, f(x) \geq -1$ et $\forall x \in K, \|x\| = 1 \Rightarrow f(x) = -1$. Donc tous les points de la sphère sont des points de minimum global.

dessin en cours

Définition 1.3.1. *Soit f une fonction définie dans un ensemble \mathbf{K} non borné. Elle est coercive si et seulement si*

$$\lim_{\|x\| \rightarrow \infty} f(x) = +\infty$$

Théorème 1.3.2. *Si \mathbf{K} est non vide, fermé et non borné, et si f est continue et coercive dans \mathbf{K} , alors il existe au moins un point de minimum global dans \mathbf{K} .*

Exemple 1.3.2. *L'ensemble admissible est $K = \mathbf{R}^n$ et $f(x) = \|x\|^2$. L'ensemble K est non vide, fermé et non borné, la fonction f est continue et coercive, donc il existe un point de minimum global.*

On peut le vérifier directement. En effet $\forall x \in \mathbf{R}^n, x \neq 0, f(x) > 0$ et $f(0) = 0$. Donc le point 0 est l'unique point de minimum global.

dessin en cours

Exemple 1.3.3. *Soit $f(x) = \sum_{i=1}^n (e^{x_i} - b_i x_i)$ de \mathbf{R}^n dans \mathbf{R} , avec $b_i > 0, i = 1, \dots, n$. Alors f est continue et coercive, donc il existe au moins un point de minimum global.*

Dans la suite du cours, on verra des conditions nécessaires d'existence, dans les cas où existent des "dérivées" d'ordre 1 ou 2. C'est de l'optimisation différentiable.

1.4 Optimisation convexe

Lorsque l'ensemble admissible est convexe et que la fonction est convexe, le problème d'optimisation est nettement plus simple.

1.4.1 Ensemble convexe

Définition 1.4.1. *Un sous-ensemble \mathbf{K} de \mathbf{R}^n est convexe si et seulement si*

$$\forall x, y \in \mathbf{K}, \forall t \in [0, 1], tx + (1 - t)y \in \mathbf{K}.$$

Exemple 1.4.1. *Une boule ouverte $B(x, r)$, une boule fermée $\overline{B}(x, r)$ sont des ensembles convexes.*

Il est facile de caractériser les ensembles convexes dans \mathbf{R} .

Théorème 1.4.1. *Les sous-ensembles convexes de \mathbf{R} sont les intervalles de \mathbf{R} .*

Un pavé K de \mathbf{R}^n est un produit d'intervalles : soit I_1, I_2, \dots, I_n des intervalles de \mathbf{R} . Le pavé K associé est défini par

$$K = \{(x_1, x_2, \dots, x_n), x_1 \in I_1, x_2 \in I_2, \dots, x_n \in I_n\}.$$

Théorème 1.4.2. *Les pavés de \mathbf{R}^n sont des ensembles convexes.*

1.4.2 Fonction convexe

Une fonction peut être convexe, strictement convexe, ou fortement convexe.

Définition 1.4.2. *Soit $\mathbf{K} \subset \Omega$ un sous-ensemble convexe de Ω .*

La fonction f est convexe dans \mathbf{K} si et seulement si

$$\forall x, y \in \mathbf{K}, \forall t \in [0, 1], f(tx + (1 - t)y) \leq tf(x) + (1 - t)f(y).$$

La fonction f est strictement convexe dans \mathbf{K} si et seulement si

$$\forall x, y \in \mathbf{K}, x \neq y, \forall t \in]0, 1[, f(tx + (1 - t)y) < tf(x) + (1 - t)f(y).$$

La fonction f est fortement convexe dans \mathbf{K} si et seulement s'il existe $\alpha > 0$ tel que

$$\forall x, y \in \mathbf{K}, \forall t \in [0, 1], f(tx + (1-t)y) \leq tf(x) + (1-t)f(y) - \alpha t(1-t)\|y-x\|^2.$$

Toute fonction fortement convexe est strictement convexe et toute fonction strictement convexe est convexe.

Une fonction constante dans K est convexe dans K mais n'est pas strictement convexe.

La convexité locale est utile en optimisation.

Définition 1.4.3. *Soit Ω un ouvert de \mathbf{R}^n et f une fonction de Ω dans \mathbf{R} et $x^* \in \Omega$. La fonction f est localement convexe au voisinage de x^* si et seulement si f est convexe dans une boule ouverte $B(x^*, r)$ incluse dans Ω .*

dessins en cours

1.4.3 Propriétés d'une fonction convexe

En optimisation convexe, il est inutile de distinguer minimum local et minimum global.

Théorème 1.4.3. *Si \mathbf{K} est un convexe non vide de Ω et si f est une fonction convexe dans \mathbf{K} , alors tout point de minimum local est aussi point de minimum global dans \mathbf{K} .*

La convexité stricte garantit l'unicité d'une solution.

Théorème 1.4.4. *Si \mathbf{K} est un convexe non vide de Ω et f est une fonction strictement convexe dans \mathbf{K} , alors s'il existe un point de minimum dans \mathbf{K} , il est unique.*

La convexité forte garantit l'existence d'une solution lorsque l'ensemble admissible est fermé.

Théorème 1.4.5. *Si \mathbf{K} est un convexe non vide fermé de Ω et f est une fonction fortement convexe dans \mathbf{K} , alors il existe un unique point de minimum dans \mathbf{K} .*

dessins en cours

Chapitre 2

Fonctions à une variable

Dans ce chapitre, on étudie les problèmes d'optimisation pour les fonctions à une variable, en utilisant les dérivées première et seconde. Le cas des fonctions convexes permet d'affiner les résultats.

Dans tout le chapitre, Ω est un intervalle ouvert non vide de \mathbf{R} et f est une fonction de Ω dans \mathbf{R} .

2.1 Dérivation

Définition 2.1.1. *La fonction f est de classe $C^1(\Omega)$ si et seulement si f est dérivable et sa fonction dérivée f' est continue dans Ω .*

Définition 2.1.2. *La fonction f est de classe $C^2(\Omega)$ si et seulement si f' est de classe C^1 dans Ω . Autrement dit, f est deux fois dérivable et sa fonction dérivée seconde f'' est continue dans Ω .*

La formule de Taylor à l'ordre 2 permet d'approcher la fonction f par une fonction quadratique :

Théorème 2.1.1. *Soit f une fonction de classe $C^2(\Omega)$, soit $x \in \Omega$ et h tel que $x + h \in \Omega$. Alors*

$$f(x + h) = f(x) + hf'(x) + \frac{1}{2}h^2f''(x) + h^2\epsilon(h),$$

avec $\lim_{h \rightarrow 0} \epsilon(h) = 0$.

2.2 Convexité et dérivabilité

Si la fonction f est de classe $C^1(\Omega)$, la convexité se traduit par une fonction dérivée croissante.

Théorème 2.2.1. *Soit f une fonction de classe $C^1(\Omega)$. Alors f est (strictement) convexe dans Ω si et seulement si f' est (strictement) croissante dans Ω .*

Exemple 2.2.1. *Soit $\Omega = \mathbf{R}$ et $f(x) = x$. Alors f est de classe $C^1(\mathbf{R})$ et $\forall x \in \mathbf{R}$, $f'(x) = 1$ donc f' est constante, f est convexe dans \mathbf{R} mais n'est pas strictement convexe dans \mathbf{R} .*

Si la fonction f est de classe C^2 , la convexité se traduit par une fonction dérivée seconde positive.

Théorème 2.2.2. *Soit Ω un intervalle ouvert de \mathbf{R} et f une fonction de classe $C^2(\Omega)$. Alors f est convexe dans Ω si et seulement si $\forall x \in \Omega$, $f''(x) \geq 0$.*

Exemple 2.2.2. *Soit $\Omega = \mathbf{R}$ et $f(x) = x^3$. Alors f est de classe $C^2(\mathbf{R})$ et $f''(x) = 6x$. Donc f'' n'est pas positive dans \mathbf{R} et f n'est pas convexe dans \mathbf{R} . On peut le montrer à partir de la définition, avec x positif et y négatif. Par contre, f est convexe dans \mathbf{R}^+ .*

La stricte convexité est plus compliquée.

Théorème 2.2.3. *Soit f une fonction de classe $C^2(\Omega)$. Si $\forall x \in \Omega$, $f''(x) > 0$, alors f est strictement convexe dans Ω .*

Exemple 2.2.3. *Soit $\Omega = \mathbf{R}$ et $f(x) = e^x$. Alors f est de classe $C^2(\mathbf{R})$ et $\forall x \in \mathbf{R}$, $f''(x) = e^x > 0$ donc f est strictement convexe.*

Exemple 2.2.4. *Soit $\Omega =]0, +\infty[$ et $f(x) = -\log(x)$, où \log désigne le Logarithme Népérien. Alors f est de classe $C^2(\Omega)$ et $\forall x \in \Omega$, $f'(x) = -\frac{1}{x}$, $f''(x) = \frac{1}{x^2} > 0$ donc f est strictement convexe.*

Il existe des fonctions strictement convexes dont la dérivée est nulle en certains points.

Exemple 2.2.5. *Soit $\Omega = \mathbf{R}$ et $f(x) = x^4$. Alors f est de classe $C^2(\mathbf{R})$ et $\forall x \in \mathbf{R}$, $f''(x) = 12x^2 \geq 0$ donc f est convexe dans \mathbf{R} . La dérivée f' est strictement croissante dans \mathbf{R} ($f'(x) = 4x^3$) donc f est strictement convexe dans \mathbf{R} , bien que $f''(0) = 0$.*

Voici maintenant un résultat de convexité locale.

Théorème 2.2.4. *Si f est de classe $C^2(\Omega)$ et si $f''(x^*) > 0$ alors f est localement convexe au voisinage de x^* .*

Enfin, la convexité forte est équivalente à une propriété de la dérivée seconde.

Théorème 2.2.5. *Soit f une fonction de classe $C^2(\Omega)$. La fonction f est fortement convexe dans Ω si et seulement si*

$$\exists \alpha > 0, \forall x \in \Omega, f'''(x) \geq \alpha.$$

Exemple 2.2.6. *Soit $\Omega = \mathbf{R}$ et $f(x) = x^2$. Alors f est de classe $C^2(\mathbf{R})$ et $\forall x \in \mathbf{R}, f''(x) = 2 \geq 2 > 0$ donc f est fortement convexe dans Ω .*

Exemple 2.2.7. *Soit $\Omega = \mathbf{R}$ et $f(x) = e^x$. Alors $\lim_{x \rightarrow -\infty} f''(x) = 0$ donc f n'est pas fortement convexe dans Ω .*

Exemple 2.2.8. *Soit $\Omega =]0, +\infty[$ et $f(x) = -\log(x)$. Alors $\lim_{x \rightarrow +\infty} f''(x) = 0$ donc f n'est pas fortement convexe dans Ω .*

2.3 Minimisation sans contrainte

Grâce aux dérivées, nous pouvons définir des conditions nécessaires pour caractériser un point de minimum local.

2.3.1 Conditions d'optimalité d'ordre 1

Définition 2.3.1. *Soit f une fonction de classe $C^1(\Omega)$ et x^* un point de Ω . Le point x^* est un point critique dans Ω si et seulement si $f'(x^*) = 0$.*

Théorème 2.3.1. *Soit f une fonction de classe $C^1(\Omega)$ et x^* un point de Ω . Si x^* est un point de minimum ou maximum local dans Ω alors c'est un point critique : $f'(x^*) = 0$.*

Donc s'il n'existe pas de point critique, il n'existe pas de minimum ou maximum local.

Exemple 2.3.1. *Les fonctions $x, e^x, \log(x)$ n'ont pas de point critique dans leur domaine de définition, donc elles n'ont pas de point de minimum ou maximum local.*

Il peut exister des points critiques qui ne sont pas des points de minimum ou maximum.

Exemple 2.3.2. La fonction $f(x) = x^3$ a un point critique, $x^* = 0$, dans \mathbf{R} . Mais x^* n'est ni un point de minimum ni un point de maximum.

Cependant, tous les points critiques d'une fonction convexe sont des points de minimum.

Théorème 2.3.2. Soit f une fonction de classe $C^1(\Omega)$ et convexe dans Ω . Alors un point x^* de Ω est un point de minimum (global) dans Ω si et seulement si c'est un point critique : $f'(x^*) = 0$. Si de plus f est strictement convexe dans Ω , alors s'il existe un point critique, il est unique. Si de plus f est fortement convexe dans Ω , alors il existe un unique point critique.

Exemple 2.3.3. Soit $\Omega = \mathbf{R}$ et $f(x) = x^4$. Alors f est de classe $C^1(\mathbf{R})$ et f est convexe dans \mathbf{R} . Il existe un unique point critique $x^* = 0$. Puisque f est convexe, c'est l'unique point de minimum et il est global.

Exemple 2.3.4. Soit $\Omega = \mathbf{R}$ et $f(x) = x^2$. Alors f est de classe $C^1(\mathbf{R})$ et f est fortement convexe dans \mathbf{R} donc il existe un unique point de minimum, donc un unique point critique. C'est le point $x^* = 0$.

2.3.2 Conditions d'optimalité d'ordre 2

Théorème 2.3.3. Soit f une fonction de classe $C^2(\Omega)$ et x^* un point de Ω . Si x^* est un point de minimum local dans Ω alors c'est un point critique et $f''(x^*) \geq 0$.

La propriété réciproque n'est pas toujours vraie. Des conditions suffisantes plus fortes existent cependant.

Théorème 2.3.4. Si x^* est un point critique et si f de classe $C^2(\Omega)$ est localement convexe au voisinage de x^* , alors c'est un point de minimum local dans Ω .

Théorème 2.3.5. Soit f une fonction de classe $C^2(\Omega)$ et x^* un point de Ω . Si x^* est un point critique (donc $f'(x^*) = 0$) et si $f''(x^*) > 0$, alors c'est un point de minimum local dans Ω .

Démonstration. La formule de Taylor à l'ordre 2 s'écrit ici

$$f(x^* + h) = f(x^*) + \frac{1}{2}h^2 f''(x^*) + h^2 \epsilon(h),$$

avec $\lim_{h \rightarrow 0} \epsilon(h) = 0$. Comme $f''(x^*) > 0$, on en déduit que pour h assez petit, $f(x^* + h) \geq f(x^*)$. \square

Exemple 2.3.5. Soit $\Omega = \mathbf{R}$ et $f(x) = x^3 - 3x + 1$.

Puisque $\lim_{x \rightarrow -\infty} f(x) = -\infty$ et $\lim_{x \rightarrow +\infty} f(x) = +\infty$, il n'existe ni minimum global ni maximum global.

La fonction f est de classe $C^2(\mathbf{R})$ et $f'(x) = 3(x^2 - 1)$ et $f''(x) = 6x$, donc f n'est pas convexe dans \mathbf{R} . Il existe deux points critiques 1 et -1 . Puisque $f''(1) > 0$, 1 est un point de minimum local. Puisque $f''(-1) < 0$, -1 est un point de maximum local (c'est un point de minimum local de $-f$).

Exemple 2.3.6. Soit $\Omega =]0, 2\pi[$ et $f(x) = \sin(x)$. La fonction f est de classe $C^2(\Omega)$ et $f'(x) = \cos(x)$ et $f''(x) = -\sin(x)$, donc f n'est pas convexe dans Ω . Il existe deux points critiques $\pi/2$ et $3\pi/2$. Puisque $f''(3\pi/2) > 0$, $3\pi/2$ est un point de minimum local. Puisque $f''(\pi/2) < 0$, $\pi/2$ est un point de maximum local (c'est un point de minimum local de $-f$).

dessins en cours

Chapitre 3

Algèbre linéaire

Avant d'étudier les problèmes d'optimisation à plusieurs variables, il est utile de rappeler quelques notions d'algèbre linéaire, et d'introduire des fonctions linéaires ou quadratiques.

3.1 Vecteurs

Soit n un entier non nul. L'ensemble \mathbf{R}^n est un espace vectoriel de dimension n .

Deux vecteurs x et y sont orthogonaux si et seulement si $\langle x, y \rangle = 0$.

Un système $(v_j), j = 1, \dots, m$ de $m \leq n$ vecteurs est orthonormé si et seulement si $\langle v_i, v_j \rangle = 0, i \neq j$ et $\langle v_i, v_i \rangle = 1$.

Un système $(v_j), j = 1, \dots, m$ de $m \leq n$ vecteurs est libre si et seulement si les vecteurs v_j sont linéairement indépendants, autrement dit toute combinaison linéaire des vecteurs a des coefficients nuls :

$$\sum_{j=1}^m a_j v_j = 0 \Rightarrow a_j = 0, j = 1, \dots, m.$$

Un système orthonormé est libre.

3.1.1 Formes linéaires

Les formes linéaires sont un cas particulier important pour les résolutions numériques.

Définition 3.1.1. Soit Ω un ouvert de \mathbf{R}^n . Une forme linéaire est une application linéaire de Ω dans \mathbf{R} , définie par un vecteur $b \in \mathbf{R}^n$:

$$l(x) = b^T x.$$

3.2 Matrices

Une matrice A de $\mathbf{R}^{p \times n}$ a pn coefficients, p lignes et n colonnes et est notée

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdot & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdot & a_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{p1} & a_{p2} & \cdot & a_{pn} \end{pmatrix} = (a_{ij})_{1 \leq i \leq p, 1 \leq j \leq n}.$$

La matrice A est carrée d'ordre n si $p = n$.

Le produit matrice vecteur est défini pour tout $x \in \mathbf{R}^n$ par

$$y = Ax \in \mathbf{R}^p \text{ avec } y_i = \sum_{j=1}^n a_{ij}x_j, i = 1, \dots, p.$$

La matrice A^T , transposée de A , est obtenue en permutant les lignes et les colonnes, donc $A^T = (a_{ji}) \in \mathbf{R}^{n \times p}$.

Le produit scalaire s'écrit $\langle x, y \rangle = x^T y$ et la norme $\|x\|^2 = x^T x$.

On définit le noyau $\text{Ker}(A)$ et l'image $\text{Im}(A)$ d'une matrice par

$$\text{Ker}(A) = \{x \in \mathbf{R}^n, Ax = 0\} \text{ et } \text{Im}(A) = \{y \in \mathbf{R}^p, \exists x \in \mathbf{R}^n, Ax = y\}.$$

On a la propriété suivante : $\text{Ker}(A^T) = \{0\} \Leftrightarrow \text{Im}(A) = \mathbf{R}^p$.

Soit (v_j) un système de m vecteurs de \mathbf{R}^n , avec $m \leq n$. Soit $V = (v_1, v_2, \dots, v_m) \in \mathbf{R}^{n \times m}$ la matrice dont les colonnes sont les vecteurs v_j . Alors $Va = \sum_{j=1}^m a_j v_j$. Donc le système (v_j) est libre si et seulement si $\text{Ker}(V) = \{0\}$.

Une matrice carrée A est inversible si et seulement s'il existe une matrice carrée notée A^{-1} telle que

$$AA^{-1} = A^{-1}A = I,$$

où I est la matrice identité. Une matrice non inversible est singulière.

Une matrice carrée A est inversible si et seulement si $\text{Ker}(A) = \{0\}$ si et seulement si $\text{Im}(A) = \mathbf{R}^n$.

Une matrice V dont les n vecteurs colonnes forment un système orthonormé est inversible et $V^T = V^{-1}$.

Une matrice carrée A d'ordre n a n valeurs propres complexes. Une matrice carrée A est inversible si et seulement si aucune valeur propre n'est nulle.

3.2.1 Applications linéaires

Les applications linéaires sont un cas particulier important de fonctions vectorielles.

Définition 3.2.1. Soit Ω un ouvert de \mathbf{R}^n . Une application linéaire L de Ω dans \mathbf{R}^p est une fonction vectorielle définie par une matrice $A \in \mathbf{R}^{n \times p}$:

$$L(x) = Ax.$$

3.2.2 Formes quadratiques

Les formes quadratiques sont un cas particulier important de fonctions à plusieurs variables à valeurs dans \mathbf{R} .

Définition 3.2.2. Une forme quadratique q est une fonction polynomiale de degré 2, de Ω dans \mathbf{R} , définie par une matrice carrée $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$:

$$q(x) = \frac{1}{2}x^T Ax = \frac{1}{2} \langle x, Ax \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} x_i x_j.$$

Les algorithmes numériques utilisent des fonctions qui sont la somme d'une fonction constante, d'une forme linéaire et d'une forme quadratique, définies par un nombre α , un vecteur b et une matrice carrée A :

$$f(x) = \alpha + b^T x + \frac{1}{2}x^T Ax.$$

Nous verrons plus loin que ce type de fonction est le début de la formule de Taylor à l'ordre 2.

3.3 Matrices symétriques

Les matrices symétriques sont fréquentes dans les problèmes d'optimisation. Nous verrons plus loin que la matrice hessienne (l'équivalent d'une dérivée seconde) d'une fonction à plusieurs variables est symétrique.

Une matrice carrée A est symétrique si et seulement si $A = A^T$. Si une matrice carrée A est symétrique et inversible, la matrice inverse est carrée et symétrique.

Toute matrice symétrique a n valeurs propres réelles $\lambda_i, i = 1, \dots, n$ et est diagonalisable dans une base orthonormée de vecteurs propres.

Théorème 3.3.1. *Soit A une matrice symétrique. il existe une base $V = (v_i)$ de n vecteurs propres orthonormés telle que $AV = VD$, où D est la matrice diagonale avec les valeurs propres réelles de A sur la diagonale. On a donc $V^T AV = D$ et $A = VDV^T$.*

La somme des valeurs propres est la trace de la matrice, qui est la somme des coefficients diagonaux; le produit des valeurs propres est le déterminant de la matrice.

Théorème 3.3.2. *Soit A une matrice symétrique d'ordre n et $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ ses valeurs propres. Soit $tr(A) = \sum_{i=1}^n a_{ii}$ la trace de A et $det(A)$ le déterminant de A . Alors*

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i = tr(A), \prod_{i=1}^n \lambda_i = det(A).$$

3.3.1 Matrices symétriques définies ou semi-définies

Définition 3.3.1. *Une matrice $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$ est symétrique semi-définie positive si et seulement si elle est symétrique et*

$$\forall x \in \mathbf{R}^n, x^T Ax \geq 0.$$

Une matrice A est symétrique définie positive si et seulement si elle est symétrique et

$$\forall x \in \mathbf{R}^n, x \neq 0, x^T Ax > 0.$$

Les résultats ci-dessous relient les valeurs propres aux définitions de matrice (semi-) définie positive.

Théorème 3.3.3. *Soit A une matrice symétrique et $\lambda_i, i = 1, \dots, n$ ses valeurs propres. Soit λ_1 la plus petite valeur propre. Alors*

$$\forall x \in \mathbf{R}^n, x^T A x \geq \lambda_1 \|x\|^2.$$

Démonstration. Soit $a = V^{-1}x$ alors $x = Va$ et

$$\|x\|^2 = x^T x = (Va)^T Va = a^T (V^T V) a = a^T a = \|a\|^2 = \sum_{i=1}^n a_i^2.$$

De plus

$$x^T A x = a^T V^T A V a = a^T D a = \sum_{i=1}^n \lambda_i a_i^2,$$

d'où le résultat. □

Théorème 3.3.4. *Soit A une matrice symétrique et λ_1 la plus petite valeur propre. La matrice A est symétrique semi-définie positive si et seulement si*

$$\lambda_1 \geq 0.$$

La matrice A est symétrique définie positive si et seulement si

$$\lambda_1 > 0.$$

Démonstration. Il suffit d'appliquer le théorème précédent. □

Théorème 3.3.5. *Une matrice carrée A symétrique définie positive est inversible et son inverse est symétrique définie positive.*

Démonstration. Puisque A est symétrique définie positive, toutes les valeurs propres sont non nulles, donc A est inversible et son inverse est symétrique. De même, D est inversible, et D^{-1} est diagonale avec les inverses des valeurs propres sur la diagonale. On a $D = V^T A V$ donc $D^{-1} = (V^T A V)^{-1} = V^{-1} A^{-1} (V^T)^{-1} = V^T A^{-1} V$. Les valeurs propres de A^{-1} sont celles de D^{-1} c'est-à-dire les inverses des valeurs propres de A , donc elles sont strictement positives et A^{-1} est symétrique définie positive. □

Considérons maintenant le cas $n = 2$. Il est facile de déterminer le signe des valeurs propres d'une matrice symétrique 2×2 . En effet, Soit $A =$

$\begin{pmatrix} a_1 & b \\ b & a_2 \end{pmatrix}$ une matrice carrée symétrique d'ordre 2 et λ_1, λ_2 ses deux valeurs propres. Alors

$$\lambda_1 + \lambda_2 = a_1 + a_2 = \text{tr}(A), \quad \lambda_1 \lambda_2 = a_1 a_2 - b^2 = \det(A).$$

Donc les signes de $\text{tr}(A)$ et de $\det(A)$ donnent les signes des deux valeurs propres.

Exemple 3.3.1. Soit $A = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 3 \end{pmatrix}$. Alors $\lambda_1 + \lambda_2 = 5 > 0$ et $\lambda_1 \lambda_2 = 5 > 0$ donc $\lambda_2 \geq \lambda_1 > 0$ et la matrice A est symétrique définie positive.

Attention, cette technique n'est valable que pour $n = 2$.

Chapitre 4

Calcul différentiel

Dans ce chapitre, on traite des fonctions à plusieurs variables. Comme pour les fonctions à une variable, on étudie les problèmes d'optimisation en utilisant le calcul différentiel. On introduit l'équivalent des dérivées première et seconde, à savoir le gradient ou la matrice jacobienne, et la matrice hessienne.

Dans tout le chapitre, Ω est un ouvert non vide de \mathbf{R}^n et f est une fonction à plusieurs variables de Ω dans \mathbf{R} .

4.1 Fonctions de classe C^1

Il est possible de généraliser la notion de fonction dérivable à celle de fonction différentiable. Dans ce cours, nous n'étudions que les fonctions de classe $C^1(\Omega)$, qui sont différentiables, la réciproque étant fautive. Pour cela, nous commençons par définir des fonctions et dérivées partielles.

Définition 4.1.1. Soit $x = (x_i) \in \mathbf{R}^n$. La fonction partielle à une variable ϕ_i est définie dans un intervalle contenant x_i par

$$\phi_i(t) = f(x_1, \dots, x_{i-1}, t, x_{i+1}, \dots, x_n).$$

Si ϕ_i est dérivable en x_i , on définit la i^{me} dérivée partielle de f en x par

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}(x) = \phi_i'(x_i).$$

Définition 4.1.2. La fonction f est de classe $C^1(\Omega)$ si et seulement si les dérivées partielles $\frac{\partial f}{\partial x_i}$ existent et sont continues dans Ω .

Les dérivées partielles forment un vecteur que l'on appelle le gradient de la fonction.

Définition 4.1.3. Soit f une fonction de classe $C^1(\Omega)$. Le vecteur gradient de f est une fonction continue de Ω dans \mathbf{R}^n définie par

$$\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_i}(x) \right)_{1 \leq i \leq n}$$

La formule de Taylor à l'ordre 1 permet d'approcher la fonction f par une fonction linéaire :

Théorème 4.1.1. Soit f une fonction de classe $C^1(\Omega)$, soit deux vecteurs $x \in \Omega$ et $x + y \in \Omega$. Alors

$$\begin{aligned} f(x + y) &= f(x) + \nabla f(x)^T y + \|y\| \epsilon(\|y\|), \\ &= f(x) + \sum_{i=1}^n y_i \frac{\partial f}{\partial x_i}(x) + \|y\| \epsilon(\|y\|), \end{aligned}$$

avec $\lim_{h \rightarrow 0} \epsilon(h) = 0$.

4.2 Fonctions de classe C^2

On peut continuer le processus et définir des dérivées partielles secondes grâce à la matrice jacobienne du gradient. Voir le paragraphe 4.3.

Définition 4.2.1. Si la fonction dérivée partielle $\frac{\partial f}{\partial x_j}$ admet des dérivées partielles, alors la fonction f admet des dérivées partielles secondes, définies par :

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial f}{\partial x_j} \right)(x).$$

Définition 4.2.2. La fonction f est de classe $C^2(\Omega)$ si et seulement si les dérivées partielles secondes $\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}$ existent et sont continues.

Les dérivées partielles secondes en x forment une matrice dans $\mathbf{R}^{n \times n}$, que l'on appelle la matrice hessienne de f en x . Elle est symétrique si la fonction est de classe $C^2(\Omega)$, c'est le théorème de Schwarz.

Théorème 4.2.1. Soit f une fonction de classe $C^2(\Omega)$. La matrice hessienne de f est une fonction continue de Ω dans $\mathbf{R}^{n \times n}$ définie par

$$H_f(x) = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x) \right)_{1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq n}.$$

La matrice $H_f(x)$ est symétrique :

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x) = \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}(x).$$

La formule de Taylor à l'ordre 2 permet d'approcher la fonction f par une fonction quadratique :

Théorème 4.2.2. Soit f une fonction de classe $C^2(\Omega)$, soit deux vecteurs $x \in \Omega$ et $y \in \Omega$. Alors

$$\begin{aligned} f(x+y) &= f(x) + \nabla f(x)^T y + \frac{1}{2} y^T H_f(x) y + \|y\|^2 \epsilon(\|y\|), \\ &= f(x) + \sum_{i=1}^n y_i \frac{\partial f}{\partial x_i}(x) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n y_i y_j \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x) + \|y\|^2 \epsilon(\|y\|), \end{aligned}$$

avec $\lim_{h \rightarrow 0} \epsilon(h) = 0$.

Exemple 4.2.1. Soit $f(x) = \|x\|^2$ de \mathbf{R}^n dans \mathbf{R} .

Alors f est de classe $C^2(\mathbf{R}^n)$, son gradient vaut $\nabla f(x) = 2x$ et sa matrice hessienne vaut $H_f(x) = 2I$.

Exemple 4.2.2. Soit $f(x) = \sum_{i=1}^n (e^{x_i} - b_i x_i)$ de \mathbf{R}^n dans \mathbf{R} .

Alors f est de classe $C^2(\mathbf{R}^n)$, son gradient est défini par $\nabla f(x)_i = e^{x_i} - b_i$ et sa matrice hessienne est diagonale avec $H_f(x)_{ii} = e^{x_i}$.

4.2.1 Forme linéaire et forme quadratique

Il est utile de connaître le gradient et la matrice hessienne d'une forme linéaire.

Théorème 4.2.3. Soit l une forme linéaire définie par un vecteur $b : l(x) = b^T x$. Alors l est de classe C^2 , de gradient $\nabla l(x) = b$ et de matrice hessienne $H_l(x) = 0$.

Démonstration. $l(x) = \sum_{j=1}^n b_j x_j$ donc $\frac{\partial l}{\partial x_i}(x) = b_i$ et $\frac{\partial^2 l}{\partial x_i \partial x_j}(x) = 0$. \square

Il est utile de connaître le gradient et la matrice hessienne d'une forme quadratique.

Théorème 4.2.4. *Soit q une forme quadratique définie par une matrice carrée A : $q(x) = \frac{1}{2}x^T A x$. Alors q est de classe C^2 , de gradient $\nabla q(x) = \frac{1}{2}(A + A^T)x$ et de matrice hessienne $H_q(x) = \frac{1}{2}(A + A^T)$.*

Si A est symétrique, alors $\nabla q(x) = Ax$ et $H_q(x) = A$.

Démonstration. $q(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} x_i x_j$ donc

$$\frac{\partial q}{\partial x_k}(x) = = \frac{1}{2} \left(\sum_{j=1, j \neq k}^n a_{kj} x_j + \sum_{i=1, i \neq k}^n a_{ik} x_i + 2a_{kk} x_k \right), \quad (4.1)$$

$$= \frac{1}{2} \left(\sum_{j=1}^n a_{kj} x_j + \sum_{i=1}^n a_{ik} x_i \right), \quad (4.2)$$

$$= \frac{1}{2} ((Ax)_k + (A^T x)_k) \quad (4.3)$$

d'où $\nabla q(x) = \frac{1}{2}(A + A^T)x$.

Pour la matrice hessienne, voir plus loin la matrice jacobienne d'une application linéaire. \square

4.3 Fonction vectorielle de classe C^1

Soit F une fonction vectorielle à plusieurs variables de Ω dans \mathbf{R}^p . On note $F(x) = (F_i(x))_{1 \leq i \leq p}$ le vecteur valeur de F en x . La fonction F est de classe $C^1(\Omega)$ si et seulement si F_i est de classe $C^1(\Omega)$, pour tout $i = 1, \dots, p$.

Les dérivées partielles de chaque fonction F_i sont regroupées dans une matrice rectangulaire appelée matrice jacobienne de F .

Définition 4.3.1. *Soit F une fonction vectorielle de classe $C^1(\Omega)$. La matrice jacobienne de F en x est une matrice à p lignes et n colonnes définie par*

$$J_F(x) = \left(\frac{\partial F_i}{\partial x_j}(x) \right), i = 1, \dots, p, j = 1, \dots, n.$$

La formule de Taylor à l'ordre 1 permet d'approcher F par une fonction affine.

Théorème 4.3.1. Soit F une fonction de classe $C^1(\Omega)$, soit deux vecteurs $x \in \Omega$ et $x + y \in \Omega$. Alors

$$\|F(x + y) - F(x) - J_F(x)y\| = \|y\|\epsilon(\|y\|),$$

avec $\lim_{h \rightarrow 0} \epsilon(h) = 0$.

Le théorème suivant fait le lien entre gradient, matrice jacobienne et matrice hessienne.

Théorème 4.3.2. Si f est de classe $C^2(\Omega)$ à valeurs dans \mathbf{R} , de gradient $\nabla f(x)$ et de matrice hessienne $H_f(x)$ en tout point x , alors la matrice jacobienne de f est la transposée de son vecteur gradient et le gradient ∇f est une fonction vectorielle de classe $C^1(\Omega)$ à valeurs dans \mathbf{R}^n . La matrice jacobienne du gradient est la matrice hessienne de f :

$$J_f(x) = \nabla f(x)^T$$

$$J_{\nabla f}(x) = H_f(x) = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x) \right)_{1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq n}$$

Démonstration.

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

Soit F la fonction vectorielle définie de Ω dans \mathbf{R}^n par $F(x) = \nabla f(x)$. Alors $F_i(x) = \frac{\partial f}{\partial x_i}(x)$ et $\frac{\partial F_i}{\partial x_j}(x) = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x)$. \square

La matrice jacobienne d'une fonction composée est le produit des matrices jacobiniennes.

Théorème 4.3.3. Soit F une fonction de classe $C^1(\Omega)$ à valeurs dans \mathbf{R}^p , soit G une fonction de classe $C^1(\mathbf{R}^p)$ à valeurs dans \mathbf{R}^q , alors $G \circ F$ est une fonction de classe $C^1(\Omega)$ à valeurs dans \mathbf{R}^q , et la matrice jacobienne de $G \circ F$ vaut

$$J_{G \circ F}(x) = J_G(F(x))J_F(x).$$

4.3.1 Application linéaire

Il est utile de connaître la matrice jacobienne d'une application linéaire.

Théorème 4.3.4. Soit L une application linéaire définie par une matrice $A : L(x) = Ax$. Alors L est de classe C^1 , de matrice jacobienne $J_L(x) = A$.

Démonstration. $L_i(x) = \sum_{j=1}^n a_{ij}x_j$ donc $\frac{\partial L_i}{\partial x_j}(x) = a_{ij}$ et $J_L(x) = A$. \square

4.4 Convexité et différentiation

Soit $K \subset \Omega$ un sous-ensemble non vide de Ω . La convexité est équivalente à une propriété du gradient, lorsque f est de classe $C^1(\Omega)$ et K est convexe.

Théorème 4.4.1. *Si K est convexe et si f est de classe $C^1(\Omega)$, de gradient ∇f , alors*

— *f est convexe dans \mathbf{K} si et seulement si*

$$\forall x, y \in \mathbf{K}, f(y) - f(x) \geq \nabla f(x)^T(y - x).$$

— *f est strictement convexe dans \mathbf{K} si et seulement si*

$$\forall x, y \in \mathbf{K}, x \neq y, f(y) - f(x) > \nabla f(x)^T(y - x).$$

— *f est fortement convexe dans \mathbf{K} si et seulement si*

$$\exists \alpha > 0, \forall x, y \in \mathbf{K}, f(y) - f(x) \geq \nabla f(x)^T(y - x) + \frac{\alpha}{2} \|y - x\|^2.$$

Lorsque f est de classe C^2 , la convexité se traduit par une propriété de la matrice hessienne.

Théorème 4.4.2. *Si K est convexe et si f est de classe $C^2(\Omega)$, de matrice hessienne $H_f(x)$ en tout point x , avec $\lambda_1(x)$ la plus petite valeur propre de $H_f(x)$, alors :*

— *f est convexe dans \mathbf{K} si et seulement si $\forall x \in \mathbf{K}, H_f(x)$ est symétrique semi-définie positive,*

$$f \text{ est convexe dans } \mathbf{K} \Leftrightarrow \forall x \in \mathbf{K}, \lambda_1(x) \geq 0.$$

— *Si $\forall x \in \mathbf{K}, H_f(x)$ est symétrique définie positive, alors f est strictement convexe dans Ω ,*

$$\forall x \in \mathbf{K}, \lambda_1(x) > 0 \Rightarrow f \text{ est strictement convexe dans } \mathbf{K}.$$

— *Cas fortement convexe :*

$$f \text{ est fortement convexe dans } \mathbf{K} \Leftrightarrow \exists \alpha > 0, \forall x \in \mathbf{K}, \lambda_1(x) \geq \alpha.$$

4.4.1 Forme quadratique convexe

Dans le cas d'une forme quadratique avec une matrice symétrique, on peut caractériser la convexité.

Théorème 4.4.3. *Soit q une forme quadratique définie dans \mathbf{R}^n par une matrice symétrique $A : q(x) = \frac{1}{2}x^T Ax$. Soit \mathbf{K} un ensemble convexe non vide de \mathbf{R}^n .*

Alors q est fortement convexe dans \mathbf{K} si et seulement si q est strictement convexe dans \mathbf{K} si et seulement si A est symétrique définie positive.

Démonstration. $\forall x \in \mathbf{K}, H_q(x) = A$. Soit λ_1 la plus petite valeur propre de A (indépendante de x). On en déduit que q est fortement/strictement convexe si et seulement si $\lambda_1 > 0$ donc si et seulement si A est symétrique définie positive. \square

Exemple 4.4.1. *Soit $f(x) = \frac{1}{2}\|x\|^2$, alors f est une forme quadratique définie par la matrice I . Elle est de classe $C^2(\mathbf{R}^n)$, de gradient $\nabla f(x) = x$ et de matrice hessienne $H_f(x) = I$. Elle est fortement convexe dans \mathbf{R}^n car I est symétrique définie positive.*

Exemple 4.4.2. *Soit $f(x) = f(x_1, x_2) = \frac{1}{2}(x_1^2 - x_2^2)$, de \mathbf{R}^2 à valeurs dans \mathbf{R} . La fonction f est une forme quadratique définie par la matrice symétrique $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$. En effet, $f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax$. La fonction f est de classe $C^2(\mathbf{R}^2)$, de gradient $\nabla f(x) = \begin{pmatrix} x_1 \\ -x_2 \end{pmatrix}$ et de matrice hessienne $H_f(x) = A$. Elle n'est pas convexe dans \mathbf{R}^2 car A n'est pas symétrique semi-définie positive.*

Chapitre 5

Optimisation sans contrainte

L'optimisation sans contrainte signifie que la recherche du minimum se fait dans un ouvert Ω non vide où est définie la fonction à plusieurs variables. S'il existe un point de minimum local, il satisfait certaines conditions, liées au gradient et à la matrice hessienne.

Dans tout le chapitre, Ω est un ouvert non vide de \mathbf{R}^n et f une fonction de Ω dans \mathbf{R} .

5.1 Condition d'optimalité d'ordre 1

Soit f une fonction de classe $C^1(\Omega)$ et x^* un point de Ω . Pour les fonctions à une variable, un point de minimum local a une dérivée nulle. Cette propriété se généralise aux fonctions à plusieurs variables, c'est le gradient qui est nul.

Définition 5.1.1. *Le point $x^* \in \Omega$ est un point critique dans Ω si et seulement s'il est solution de l'équation d'Euler*

$$x \in \Omega, \nabla f(x) = 0.$$

Théorème 5.1.1. *Si $x^* \in \Omega$ est un point de minimum local dans Ω alors c'est un point critique : $\nabla f(x^*) = 0$.*

La propriété réciproque n'est pas vraie en général. Elle l'est pour des fonctions convexes. Le résultat suivant généralise le théorème établi pour les fonctions à une variable.

Théorème 5.1.2. *Soit Ω un ouvert convexe non vide de \mathbf{R}^n et f une fonction de classe $C^1(\Omega)$ et convexe dans Ω . Alors $x^* \in \Omega$ est un point de minimum (global) dans Ω si et seulement si c'est un point critique. Si de plus f est strictement convexe dans Ω , alors s'il existe un point critique, il est unique. Si de plus f est fortement convexe dans Ω , alors il existe un unique point critique.*

L'équation d'Euler est un système de n équations à n inconnues, qui est en général non linéaire, sauf pour des formes linéaires ou quadratiques.

5.1.1 Forme linéaire

Soit $f(x) = b^T x$, avec b donné, définie dans \mathbf{R}^n . La fonction f est convexe. Le gradient de f vaut $\nabla f(x) = b$.

- Si $b \neq 0$, il n'existe pas de point critique donc pas de minimum.
- Si $b = 0$, tout point est critique et est un point de minimum global ($f(x) = 0$).

5.1.2 Forme quadratique

Considérons la somme d'une fonction constante, d'une forme linéaire et d'une forme quadratique :

$$f(x) = \alpha + b^T x + \frac{1}{2} x^T A x,$$

définie dans \mathbf{R}^n , avec $\alpha \in \mathbf{R}$, $b \in \mathbf{R}^n$, $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$, A symétrique.

Le gradient de f vaut $\nabla f(x) = Ax + b$ en tout point x et l'équation d'Euler s'écrit $Ax + b = 0$. Donc, si A est inversible, il existe un unique point critique

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

- Si A est symétrique définie positive, f est fortement convexe dans \mathbf{R}^n et x^* est l'unique point de minimum global.
- Si A est inversible non définie, x^* est un point selle (ou point col), il n'existe pas de minimum. Voir le paragraphe 5.3.

Si A n'est pas inversible, soit il n'existe aucun point critique, soit il en existe un sous-espace vectoriel.

- Si A n'est pas inversible et si $b \notin \text{Im}(A)$, il n'existe pas de point critique, donc pas de minimum.

- Si A n'est pas inversible et si $b \in \text{Im}(A)$, l'ensemble des points critiques est $\{x_0 + y, y \in \ker(A)\}$ avec $Ax_0 = -b$.
- Si A n'est pas inversible et si $b \in \text{Im}(A)$ et si A est symétrique semi-définie positive, f est convexe et tous les points critiques sont des points de minimum global.
- Si A n'est pas inversible et si $b \in \text{Im}(A)$ et si A n'est pas semi-définie, on ne peut pas conclure.

Exemple 5.1.1. Soit $f(x) = \frac{1}{2}\|x\|^2$, alors f est une forme quadratique définie par la matrice I . Elle est de classe $C^2(\mathbf{R}^n)$, de gradient $\nabla f(x) = x$ et de matrice hessienne $H_f(x) = I$. Elle est fortement convexe dans \mathbf{R}^n car I est symétrique définie positive. Il existe un unique point de minimum global et c'est l'unique point critique $x^* = 0$.

Exemple 5.1.2. Soit $f(x) = f(x_1, x_2) = \frac{1}{2}(x_1^2 - x_2^2)$, de \mathbf{R}^2 à valeurs dans \mathbf{R} .

La fonction f est une forme quadratique définie par la matrice symétrique

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Elle est de classe $C^2(\mathbf{R}^2)$, de gradient $\nabla f(x) = \begin{pmatrix} x_1 \\ -x_2 \end{pmatrix}$ et de matrice hessienne $H_f(x) = A$, qui est inversible et non définie :

$$\lambda_1 = -1 \text{ et } \lambda_2 = +1.$$

Le point $x^* = 0$ est l'unique point critique et est un point selle.
dessin en cours

5.2 Condition d'optimalité d'ordre 2

Théorème 5.2.1. Soit Ω un ouvert de \mathbf{R}^n et f une fonction de classe $C^2(\Omega)$ et x^* un point de Ω . Si x^* est un point de minimum local dans Ω alors c'est un point critique et $H_f(x^*)$ est semi-définie positive.

La propriété réciproque n'est pas vraie en général. Par contre, si la fonction est localement convexe, le point minimise localement la fonction.

Théorème 5.2.2. *Si x^* est un point critique et si f est de classe $C^2(\Omega)$ et localement convexe au voisinage de x^* , alors c'est un point de minimum local dans Ω .*

Une autre condition suffisante est que la matrice hessienne soit symétrique définie positive au point critique.

Théorème 5.2.3. *Si x^* est un point critique et si f est de classe $C^2(\Omega)$ avec $H_f(x^*)$ symétrique définie positive, alors c'est un point de minimum local dans Ω .*

Démonstration. Soit x^* un point critique donc tel que $\nabla f(x^*) = 0$. Appliquons la formule de Taylor au voisinage de ce point :

$$f(x^* + y) = f(x^*) + \frac{1}{2}y^T H_f(x^*)y + \|y\|^2 \epsilon(\|y\|).$$

Puisque $H_f(x^*)$ est symétrique définie positive, $\forall y \neq 0, y^T H_f(x^*)y > 0$. Donc, pour $\|y\|$ assez petit, $f(x^* + y) \geq f(x^*)$. \square

Exemple 5.2.1. *Soit $f(x) = \sum_{i=1}^n (e^{x_i} - b_i x_i)$ de \mathbf{R}^n dans \mathbf{R} . Alors f est de classe $C^2(\mathbf{R}^n)$, le gradient est défini par*

$$\nabla f(x)_i = e^{x_i} - b_i$$

et sa matrice hessienne est diagonale avec

$$H_f(x)_{ii} = e^{x_i}.$$

Puisque f est convexe, tout point critique est point de minimum global. Puisque f est strictement convexe, s'il existe un point critique, il est unique. Puisque f n'est pas fortement convexe, on ne peut pas utiliser la convexité pour démontrer l'existence d'un point critique.

— *Si $b_i > 0, i = 1, \dots, n$ alors il existe un unique point critique :*

$$\nabla f(x)_i = 0 \Leftrightarrow x_i = \log(b_i).$$

c'est l'unique point de minimum global dans \mathbf{R}^n .

— *Si $\exists i, b_i \leq 0$, alors il n'existe pas de point critique, donc pas de minimum.*

5.2.1 Synthèse

Soit Ω un ouvert convexe de \mathbf{R}^n et f une fonction de classe $C^2(\Omega)$. Soit x^* un point critique donc $x^* \in \Omega$ et $\nabla f(x^*) = 0$.

- si $H_f(x^*)$ est symétrique définie positive alors x^* est un point de minimum local.
- si $\forall y \in B(x^*, r) \subset \Omega$, $H_f(y)$ est symétrique semi-définie positive alors f est localement convexe et x^* est un point de minimum local.
- si $\forall y \in \Omega$, $H_f(y)$ est symétrique semi-définie positive alors f est convexe dans Ω et x^* est un point de minimum global dans Ω .
- si $\forall y \in \Omega$, $H_f(y)$ est symétrique définie positive alors f est strictement convexe dans Ω et x^* est l'unique point de minimum global dans Ω .

5.3 Point selle

Définition 5.3.1. Soit Ω un ouvert de \mathbf{R}^n et f une fonction de classe $C^2(\Omega)$ et x^* un point de Ω . Si x^* est un point critique et si $H_f(x^*)$ est inversible mais non définie (positive ou négative), alors x^* est un point selle.

Au voisinage d'un point selle, la valeur de $f(x^*)$ est minimale pour un sous-espace et maximale pour un autre sous-espace.

Ecrivons la formule de Taylor au voisinage d'un point critique x^* :

$$f(x^* + y) = f(x^*) + \frac{1}{2}y^T H_f(x^*)y + \|y\|^2 \epsilon(\|y\|).$$

Puisque $H_f(x^*)$ est symétrique, elle est diagonalisable : $H_f(x^*) = VD^*V^T$, où V est une base orthonormée et D^* est une matrice diagonale dont les coefficients sont les valeurs propres λ_i^* de $H_f(x^*)$. Puisque $H_f(x^*)$ est inversible, $\forall i, \lambda_i^* \neq 0$.

Donc $y^T H_f(x^*)y = (V^T y)^T D^* (V^T y) = zD^*z$, où $z = V^T y$. On a $\|z\| = \|y\|$ car $VV^T = I$. Séparons les valeurs strictement positives et strictement négatives. Alors $y^T H_f(x^*)y = \sum_{\lambda_i^* > 0} \lambda_i^* z_i^2 + \sum_{\lambda_i^* < 0} \lambda_i^* z_i^2$. Donc si $z_i = 0$ quand $\lambda_i^* < 0$ alors $f(x^* + y) \geq f(x^*)$. De même, si $z_i = 0$ quand $\lambda_i^* > 0$ alors $f(x^* + y) \leq f(x^*)$.

Exemple 5.3.1. Soit f la fonction de classe $C^2(\mathbf{R}^2)$ définie par

$$f(x) = f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 + x_2^3.$$

Son gradient vaut

$$\nabla f(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 + 3x_2^2 \end{pmatrix}$$

et sa matrice hessienne vaut

$$H_f(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 6x_2 + 2 \end{pmatrix}.$$

Il existe deux points critiques : $x^* = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ et $y^* = \begin{pmatrix} 0 \\ -2/3 \end{pmatrix}$.

On a $H_f(0, 0) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$, donc $H_f(0, 0)$ est définie positive et x^* est un point de minimum local.

Par contre, $H_f(0, -2/3) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix}$, donc $H_f(0, -2/3)$ est inversible non définie, et y^* est un point selle.

Exemple 5.3.2. Soit f la fonction de classe $C^2(\mathbf{R}^2)$ définie par

$$f(x, y) = \sin(x) + \cos(y).$$

Son gradient vaut

$$\nabla f(x, y) = \begin{pmatrix} \cos(x) \\ -\sin(y) \end{pmatrix}$$

et sa matrice hessienne vaut

$$H_f(x, y) = \begin{pmatrix} -\sin(x) & 0 \\ 0 & -\cos(y) \end{pmatrix}.$$

Il existe une infinité de points critiques :

$$\begin{pmatrix} x^* \\ y^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \pi/2 + k_x\pi \\ k_y\pi \end{pmatrix}.$$

En ces points critiques, la matrice hessienne vaut $H_f(x^*, y^*) = \begin{pmatrix} \pm 1 & 0 \\ 0 & \pm 1 \end{pmatrix}$,

et la valeur de f appartient à $\{-2, 0, +2\}$.

Les points critiques $(-\pi/2 + 2k_x\pi, \pi + 2k_y\pi)$ sont des points de minimum, les points critiques $(\pi/2 + 2k_x\pi, 2k_y\pi)$ sont des points de maximum, et les autres points critiques sont des points selles.

Chapitre 6

Optimisation avec contraintes d'égalité

Dans ce chapitre, $\Omega \subset \mathbf{R}^n$ est un ouvert non vide et f est une fonction de Ω dans \mathbf{R} . L'objectif est de trouver un point de minimum, qui respecte des contraintes d'égalité, définies par une fonction vectorielle $g = (g_i), i = 1, \dots, p$ de Ω dans \mathbf{R}^p .

L'ensemble admissible \mathbf{K} est

$$\mathbf{K} = \{x \in \Omega, g_i(x) = 0, i = 1, \dots, p\}.$$

Si $\Omega = \mathbf{R}^n$ et si g est continue, l'ensemble K est un fermé. S'il est non vide, on peut utiliser les théorèmes d'existence du chapitre 1.

Pour résoudre le problème d'optimisation locale ou globale, nous commençons par définir une condition de qualification des contraintes, puis un Lagrangien et enfin une condition d'optimalité d'ordre 1.

6.1 Condition de Qualification des contraintes CQC

Il existe plusieurs conditions de qualification des contraintes, nous donnons ici une CQC d'indépendance linéaire.

Définition 6.1.1. *On suppose que la fonction g est de classe $C^1(\Omega)$. Soit $x \in \mathbf{K}$. Les contraintes sont qualifiées en x si et seulement si les vecteurs $\nabla g_i(x)$ forment un système libre.*

Si $p = 1$, la CQC se réduit à $\nabla g(x) \neq 0$.

Exemple 6.1.1. $p = 1$ et $g(x) = \|x\|^2 - 1$, donc $\nabla g(x) = 2x$. Tout x non nul vérifie la CQC.

Théorème 6.1.1. On suppose que la fonction g est de classe $C^1(\Omega)$. Soit $x \in \mathbf{K}$ et $J_g(x)$ la matrice jacobienne de g en x . Les contraintes sont qualifiées en x si et seulement si le noyau de $J_g(x)^T$ est nul :

$$x \text{ vérifie la CQC} \Leftrightarrow \text{Ker}(J_g(x))^T = \{0\}.$$

Démonstration. $J_g(x)^T = (\nabla g_1(x), \dots, \nabla g_p(x))$ donc $(\nabla g_1(x), \dots, \nabla g_p(x))$ est un système libre si et seulement si $\text{Ker}(J_g(x))^T = \{0\}$. \square

6.2 Lagrangien

Le Lagrangien de f associé aux contraintes d'égalité g est une fonction de x et de p variables $\Lambda = (\lambda_i), i = 1, \dots, p$.

Définition 6.2.1.

$$\mathcal{L}(x, \lambda_1, \dots, \lambda_p) = f(x) + \sum_{i=1}^p \lambda_i g_i(x) = f(x) + g(x)^T \Lambda.$$

On peut définir les dérivées partielles du Lagrangien à partir de celles de f et g .

Théorème 6.2.1. Si les fonctions f et g sont de classe $C^1(\Omega)$, alors le Lagrangien est de classe $C^1(\Omega \times \mathbf{R}^p)$.

Les dérivées partielles par rapport à x sont

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_k}(x, \lambda_1, \dots, \lambda_p) = \frac{\partial f}{\partial x_k}(x) + \sum_{i=1}^p \lambda_i \frac{\partial g_i}{\partial x_k}(x).$$

Les dérivées partielles par rapport à Λ sont

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda_i}(x, \lambda_1, \dots, \lambda_p) = g_i(x).$$

On peut regrouper les dérivées partielles dans des vecteurs gradients :

$$\begin{cases} \nabla_x \mathcal{L}(x, \Lambda) = \nabla f(x) + J_g(x)^T \Lambda = \nabla f(x) + \sum_{i=1}^p \lambda_i \nabla g_i(x), \\ \nabla_\Lambda \mathcal{L}(x, \Lambda) = g(x), \end{cases}$$

où $J_g(x) = \left(\frac{\partial g_i}{\partial x_k}(x) \right)_{i,k}$ est la matrice jacobienne de g .

6.3 Condition d'optimalité d'ordre 1

La notion de point critique s'étend au cas de l'optimisation avec contraintes d'égalité.

Définition 6.3.1. Soit $(x, \Lambda) \in \Omega \times \mathbf{R}^p$. Le point x est un point critique associé à un vecteur de multiplicateurs de Lagrange Λ si et seulement si (x, Λ) est un point critique du Lagrangien, qui vérifie l'équation d'Euler-Lagrange :

$$\begin{cases} \nabla_x \mathcal{L}(x, \Lambda) = 0, \\ g(x) = 0. \end{cases} \quad (6.1)$$

L'équation d'Euler-Lagrange est un système non linéaire de $(n + p)$ équations à $(n + p)$ inconnues.

Un point qui vérifie la CQC et qui est un minimum local est un point critique.

Théorème 6.3.1. Soit $x^* \in \mathbf{K}$ un point de l'ensemble admissible qui vérifie la CQC. Si x^* est un point de minimum local, alors il existe des multiplicateurs de Lagrange Λ^* tels que x^* est un point critique associé.

Exemple 6.3.1. Soit $\Omega = \mathbf{R}^2$ et $f(x) = x_1^2 - x_2$ et $g(x) = \|x\|^2 - 1$ et $K = \{x, g(x) = 0\}$. On veut résoudre le problème

$$\min_{x \in K} f(x)$$

L'ensemble admissible K est non vide, fermé et borné; la fonction f est continue, donc il existe au moins un point de minimum global et un point de maximum global.

La CQC est vérifiée en tout $x \neq 0$.

Les équations d'Euler-Lagrange sont

$$\begin{cases} 2x_1 + 2\lambda x_1 = 0, \\ -1 + 2\lambda x_2 = 0, \\ x_1^2 + x_2^2 = 1. \end{cases}$$

Il existe donc 4 points critiques : $(0, \pm 1)$ avec $\lambda = \pm 1/2$ et $(\pm\sqrt{3}/2, -1/2)$ avec $\lambda = -1$.

Tous ces points vérifient la CQC. On peut vérifier que

— Le point $(0, 1)$ est l'unique point de minimum global dans K .

- Les points $(\pm\sqrt{3}/2, -1/2)$ sont les points de maximum global dans K .
- Le point $(0, -1)$ est un point de minimum local dans K .

Il peut exister un point critique qui vérifie la CQC et qui n'est pas un point de minimum local.

Il peut exister un point de minimum local qui ne vérifie pas la CQC ; ou qui ne vérifie ni la CQC ni l'équation d'Euler-Lagrange.

Exemple 6.3.2. Soit $\Omega = \mathbf{R}^2$ et $f(x) = x_1 + x_2^2$ et $g(x) = x_1^3 - x_2^2$ et $K = \{x, g(x) = 0\}$. On veut résoudre le problème

$$\min_{x \in K} f(x)$$

La CQC est vérifiée en tout $x \neq 0$.

Les équations d'Euler-Lagrange sont

$$\begin{cases} 1 + 3\lambda x_1^2 = 0, \\ 2x_2 - 2\lambda x_2 = 0, \\ x_1^3 - x_2^2 = 0. \end{cases}$$

Ce système n'a pas de solution, il n'existe pas de point critique. Donc aucun point non nul n'est point de minimum. Seul le point 0, qui est dans K mais qui ne vérifie pas la CQC, est donc candidat.

On a $f(0) = 0$. Or $g(x) = 0 \Rightarrow x_1 \geq 0 \Rightarrow f(x) \geq 0$, donc 0 est l'unique solution du problème de minimisation dans K .

Exemple 6.3.3. Soit $\Omega = \mathbf{R}^n$ et $f(x) = x^T A x$, avec A symétrique et $K = \{x, g(x) = 0\}$, où $g(x) = \|x\|^2 - 1$. On veut résoudre le problème

$$\min_{x \in K} f(x).$$

La CQC est vérifiée en tout $x \neq 0$ donc dans K .

Les équations d'Euler-Lagrange s'écrivent

$$2(Ax + \lambda x) = 0, \|x\| = 1,$$

et sont équivalentes à $Ax = \alpha x, \|x\| = 1$, où α est une valeur propre de A . Donc les points critiques sont les vecteurs propres de norme 1 et les multiplicateurs de Lagrange sont les opposés des valeurs propres associées. Si x est un vecteur propre de norme 1 avec la valeur propre α , alors $Ax = \alpha x$ et $f(x) = \alpha$.

On a $\forall x, \|x\| = 1, \alpha_1 \leq f(x) \leq \alpha_n$, où α_1 est la plus petite valeur propre et α_n est la plus grande valeur propre. Donc f est minimale en tout vecteur propre de norme 1 (donc dans K) associé à la plus petite valeur propre ; f est maximale en tout vecteur propre de norme 1 associé à la plus grande valeur propre.

6.4 Condition d'optimalité d'ordre 2

Définition 6.4.1. On suppose que f et g sont de classe $C^2(\Omega)$, avec les matrices hessiennes H_f et $H_{g_i}, i = 1, \dots, p$. Soit \mathcal{L} le Lagrangien associé à f et g . On note $\nabla_x^2 \mathcal{L}(x, \Lambda)$ la matrice des dérivées secondes du Lagrangien par rapport à x .

$$\nabla_x^2 \mathcal{L}(x, \Lambda) = H_f(x) + \sum_{i=1}^p \lambda_i H_{g_i}(x)$$

Théorème 6.4.1. On suppose que f et g sont de classe $C^2(\Omega)$. Si $x^* \in K$ est un point critique associé aux multiplicateurs de Lagrange Λ^* (solutions de l'équation d'Euler-Lagrange) et si $\nabla_x^2 \mathcal{L}(x^*, \Lambda^*)$ est symétrique définie positive, alors x^* est un minimum local dans K .

6.5 Sensibilité d'une contrainte

On suppose que les fonctions f et g sont de classe $C^1(\Omega)$.

On suppose que le problème $\min_{x \in K} f(x)$ a une unique solution globale x^* avec les multiplicateurs de Lagrange Λ^* .

Soit $\epsilon > 0$ et $K(\epsilon)$ l'ensemble admissible associé aux contraintes $g_j, j \neq i$ et $\bar{g}_i(x) = g_i(x) + \epsilon$. On suppose que le problème $\min_{x \in K(\epsilon)} f(x)$ a une unique solution globale $x^*(\epsilon)$.

Soit ϕ la fonction définie par $\phi(\epsilon) = f(x^*(\epsilon))$: c'est la valeur minimale de f dans l'ensemble $K(\epsilon)$.

On peut démontrer que ϕ est dérivable en 0 et que $\phi'(0) = \lambda_i^*$.

En économie, le multiplicateur λ_i^* est souvent appelé coût marginal. Il est intéressant de calculer non seulement la valeur minimale et le point de minimum, mais aussi les coûts marginaux.

6.6 Fonction quadratique et contraintes linéaires d'égalité

Soit $f(x) = \alpha + b^T x + \frac{1}{2}x^T A x$, définie dans \mathbb{R}^n avec le nombre $\alpha \in \mathbb{R}$, le vecteur $b \in \mathbb{R}^n$ et la matrice carrée $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

Soit $g(x) = Bx + c$, définie dans \mathbb{R}^n avec le vecteur $c \in \mathbb{R}^p$ et la matrice rectangulaire $B \in \mathbb{R}^{p \times n}$.

Soit $K = \{x \in \mathbb{R}^n, g(x) = 0\}$.

On veut résoudre le problème $\min_{x \in K} f(x)$.

Théorème 6.6.1. *Si $\text{Ker}(B^T) = \{0\}$ alors K est non vide, fermé et convexe et la CQC est vérifiée en tout x .*

Démonstration. Puisque $\text{Ker}(B^T) = \{0\}$, l'image de B vaut $\text{Im}(B) = \mathbb{R}^p$ donc l'ensemble admissible K est non vide. La fonction g est continue donc K est fermé; g est affine donc K est convexe.

La matrice jacobienne de g en tout point x vaut $J_g(x) = B$. On en déduit que $\text{Ker}(J_g(x)^T) = \{0\}$ et que la CQC est vérifiée en tout point x . \square

Théorème 6.6.2. *Si $\text{Ker}(B^T) = \{0\}$ et si A est symétrique définie positive, alors il existe un unique point de minimum global qui est l'unique point critique.*

Démonstration. La fonction f est fortement convexe dans \mathbb{R}^n , l'ensemble admissible K est non vide, fermé et convexe, donc il existe un unique point de minimum global dans K . Puisque tout point vérifie la CQC, c'est l'unique point critique. \square

Avec les hypothèses ci-dessus sur A et B , les équations d'Euler-Lagrange ont donc une solution unique. Cet unique point critique vérifie la CQC et est l'unique point de minimum global.

On a $\nabla f(x) = b + Ax$ donc les équations d'Euler-Lagrange s'écrivent

$$\begin{cases} Ax + B^T \Lambda = -b, \\ Bx + c = 0. \end{cases}$$

C'est un système linéaire avec la matrice symétrique, non définie positive, $\begin{pmatrix} A & B^T \\ B & 0 \end{pmatrix}$.

Il est équivalent au système

$$\begin{cases} x = A^{-1}(-b - B^T \Lambda), \\ BA^{-1}B^T \Lambda = c - BA^{-1}b. \end{cases}$$

Théorème 6.6.3. *Si $\text{Ker}(B^T) = \{0\}$ et si A est symétrique définie positive, alors la matrice $BA^{-1}B^T$ est inversible.*

Démonstration. Puisque les équations d'Euler-Lagrange ont une solution unique, l'équation $BA^{-1}B^T \Lambda = c - BA^{-1}b$ a une solution unique, donc la matrice $BA^{-1}B^T$ est inversible.

On peut aussi démontrer directement que cette matrice est inversible. Soit $x \in \text{Ker}(BA^{-1}B^T)$. Alors $BA^{-1}B^T x = 0$ donc $x^T BA^{-1}B^T x = 0$. De façon équivalente, $(B^T x)A^{-1}(B^T x) = 0$ d'où $B^T x = 0$ car A est symétrique définie positive. Or $\text{Ker}(B^T) = \{0\}$, donc $x = 0$. Donc la matrice carrée $BA^{-1}B^T$ a un noyau nul et est inversible. \square

Chapitre 7

Optimisation avec contraintes d'inégalité

Dans ce chapitre, $\Omega \subset \mathbf{R}^n$ est un ouvert non vide et f est une fonction de Ω dans \mathbf{R} . L'objectif de ce chapitre est de trouver un point de minimum, qui respecte des contraintes d'inégalité, définies par la fonction vectorielle $q = (q_j), j = 1, \dots, m$ de Ω dans \mathbf{R}^m .

L'ensemble admissible \mathbf{K} est

$$\mathbf{K} = \{x \in \Omega, q_j(x) \leq 0, j = 1, \dots, m\}.$$

Dans tout le chapitre, on suppose que K est non vide.

Si $\Omega = \mathbf{R}^n$ et si q est continue, l'ensemble K est fermé. S'il est non vide, on peut appliquer des théorèmes d'existence vus au chapitre 1.

Pour résoudre le problème d'optimisation locale ou globale, nous commençons par définir une condition de qualification des contraintes, puis un Lagrangien et enfin une condition d'optimalité d'ordre 1.

7.1 Condition de Qualification des contraintes CQC

On donne ici une CQC d'indépendance linéaire. Il existe d'autres CQC, plus complexes à définir.

Définition 7.1.1. *On suppose que q est de classe $C^1(\Omega)$.*

Soit $x \in \mathbf{K}$ tel que $1 \leq k \leq m$ contraintes d'inégalité sont actives en x , numérotées de 1 à k :

$$q_1(x) = \dots = q_k(x) = 0.$$

Si les gradients $\nabla q_1(x), \dots, \nabla q_k(x)$ forment un système libre, alors les contraintes sont qualifiées en x .

Soit $x \in \mathbf{K}$ tel qu'aucune contrainte d'inégalité n'est active en x . Alors les contraintes sont qualifiées en x .

7.2 Lagrangien

Le Lagrangien de f associé aux contraintes q est une fonction de x et de m variables $M = (\mu_j), j = 1, \dots, m$.

Définition 7.2.1.

$$\mathcal{L}(x, \mu_1, \dots, \mu_m) = f(x) + \sum_{j=1}^m \mu_j q_j(x).$$

On peut aussi écrire

$$\mathcal{L}(x, M) = f(x) + M^T q(x).$$

On peut définir les dérivées partielles du Lagrangien à partir de celles de f et q .

Théorème 7.2.1. *Si la fonction coût f et les contraintes q sont de classe $C^1(\Omega)$, alors le Lagrangien est de classe $C^1(\Omega \times \mathbf{R}^m)$. Les dérivées partielles de \mathcal{L} , qu'on peut regrouper dans des vecteurs gradients relatifs à x et à M , sont :*

$$\begin{cases} \nabla_x \mathcal{L}(x, M) = \nabla f(x) + J_q(x)^T M = \nabla f(x) + \sum_{j=1}^m \mu_j \nabla q_j(x), \\ \nabla_M \mathcal{L}(x, M) = q(x). \end{cases} \quad (7.1)$$

7.3 Condition d'optimalité d'ordre 1

La notion de point critique s'étend au cas de l'optimisation avec contraintes d'inégalité. Ici, ce n'est pas un point critique du Lagrangien car le gradient par rapport à M vérifie seulement $q(x) \leq 0$. Par contre, il existe une condition liant les contraintes d'inégalité et les multiplicateurs.

Définition 7.3.1. Soit $(x, M) \in \Omega \times \mathbf{R}^m$. Le point x est un point critique associé à un vecteur de multiplicateurs M si et seulement si (x, M) vérifie l'équation KKT de Karush Kuhn Tucker :

$$\begin{cases} \nabla_x \mathcal{L}(x, M) = 0, \\ \mu_j q_j(x) = 0, \\ q_j(x) \leq 0, j = 1, \dots, m, \\ \mu_j \geq 0. \end{cases} \quad (7.2)$$

L'équation KKT est un système de $(n + m)$ équations non linéaires à $(n + m)$ inconnues, avec $2m$ inéquations. Les trois dernières équations forment un problème de complémentarité non linéaire.

Un point qui vérifie la CQC et qui est un minimum local est un point critique.

Théorème 7.3.1. Soit $x^* \in \mathbf{K}$ un point de l'ensemble admissible qui vérifie la CQC. Si x^* est un point de minimum local, alors il existe des multiplicateurs M^* tels que x^* est un point critique associé.

Il peut exister un point de minimum local qui ne vérifie pas la CQC ; ou qui ne vérifie ni la CQC ni l'équation KKT. Il peut exister un point critique qui n'est pas un point de minimum local.

Un multiplicateur μ_j^* associé à une contrainte inactive j est nul. Si un point de minimum local n'a aucune contrainte active et s'il satisfait la CQC, alors il vérifie l'équation d'Euler. En effet, le vecteur des multiplicateurs M est nul.

Exemple 7.3.1. Soit $f(x) = x^2$ dans \mathbf{R} et $K = \{x \in \mathbf{R}, -1 \leq x \leq 1\}$. Au point $x^* = 0$, on a $f(x^*) = 0$, donc c'est le minimum global dans K . Les contraintes sont inactives au point $x^* : -1 < x^* < 1$ et la dérivée est nulle : $f'(x^*) = 0$.

Si une contrainte est active en un point de minimum local, ce point ne vérifie en général pas l'équation d'Euler.

Exemple 7.3.2. Soit $f(x) = e^x$ dans \mathbf{R} et $K = \{x \in \mathbf{R}, x \geq 0\}$ donc $q(x) = -x$. Soit $x^* = 0$, alors $f(x^*) = 1$ est le minimum global dans K . La contrainte est active : $q(x^*) = 0$ et la dérivée est non nulle : $f'(x^*) \neq 0$.

Si x^* est un point de maximum local, alors il vérifie des équations KKT avec $\mu_j \leq 0$.

Exemple 7.3.3. On veut résoudre le problème $\max_{x \in K} x^T Ax$, où A est une matrice carrée symétrique définie positive et $K = \{x \in \mathbf{R}^n, \|x\| \leq 1\}$. On cherche les points de minimum global et de maximum global.

Soit $f(x) = x^T Ax$ et $q(x) = \|x\|^2 - 1$.

L'ensemble admissible K est non vide, fermé et convexe et la fonction f est fortement convexe dans K donc il existe au moins un point de minimum global. Or $\forall x \neq 0, f(x) > 0$ et $f(0) = 0$ donc 0 est l'unique point de minimum global. Ce n'est pas un point de maximum global.

L'ensemble admissible K est non vide, fermé et borné et la fonction f est continue donc il existe au moins un point de maximum global.

On a $\nabla q(x) = 2x$ donc la CQC est vérifiée en tout point non nul et n'est pas vérifiée en 0 .

Le Lagrangien vaut $\mathcal{L}(x, \mu) = f(x) + \mu q(x)$, les équations KKT pour un maximum local s'écrivent

$$\begin{cases} 2Ax + 2\mu x = 0, \\ \mu(\|x\|^2 - 1) = 0, \\ \|x\| \leq 1, \\ \mu \leq 0. \end{cases}$$

Le vecteur 0 avec le multiplicateur 0 est solution des équations KKT.

Un vecteur $x \neq 0$ est solution si et seulement si $\mu < 0$ et $\|x\| = 1$ et $Ax = -\mu x$. Dans ce cas, $f(x) = -\mu$. Les points critiques sont donc le vecteur nul et les vecteurs propres de norme 1 associés à une valeur propre de A strictement positive (le multiplicateur est l'opposé de la valeur propre).

Tout point de maximum local est non nul (0 n'est pas un point de maximum), donc il vérifie la CQC et est un point critique. Tout point de maximum local est donc un vecteur propre de norme 1.

Soit $\alpha_n > 0$ la plus grande valeur propre de A .

On a $\forall x \in K, f(x) \leq \alpha_n \|x\| \leq \alpha_n$, donc α_n est la valeur maximale globale de f . Donc les points de maximum global sont les vecteurs propres de norme 1 associés à α_n .

7.4 Point selle du Lagrangien

On suppose ici que $\Omega = \mathbf{R}^n$ et que $K = \{x \in \mathbf{R}^n, q(x) \leq 0\}$. On cherche à minimiser f dans K . Le Lagrangien associé à f et q est noté $\mathcal{L}(x, M)$ et est défini dans $\mathbf{R}^n \times \mathbf{R}_+^m$. On caractérise un point de minimum local par la notion de point selle du Lagrangien.

Définition 7.4.1. Soit $(x^*, M^*) \in \mathbf{R}^n \times \mathbf{R}_+^m$. C'est un point selle du Lagrangien si et seulement si

$$\forall x \in \mathbf{R}^n, \forall M \in \mathbf{R}_+^m, \mathcal{L}(x^*, M) \leq \mathcal{L}(x^*, M^*) \leq \mathcal{L}(x, M^*).$$

Un point selle du Lagrangien est un point de minimum local de f dans K , si K est d'intérieur non vide.

Théorème 7.4.1. Si q est continue et s'il existe un point y où toutes les contraintes sont inactives ($q_j(y) < 0, j = 1, \dots, m$), alors l'ensemble admissible K est d'intérieur non vide.

Théorème 7.4.2. On suppose que K est d'intérieur non vide, que f et q sont de classe $C^1(\mathbf{R}^n)$.

Si un point (x^*, M^*) est un point selle du Lagrangien, alors x^* est un point de minimum local dans K et (x^*, M^*) est solution des équations KKT.

7.4.1 Optimisation convexe

On suppose toujours que $\Omega = \mathbf{R}^n$ et que $K = \{x \in \mathbf{R}^n, q(x) \leq 0\}$.

Théorème 7.4.3. Si les fonctions vectorielles q_j sont convexes dans \mathbf{R}^n , alors l'ensemble admissible K est convexe.

Dans le cas convexe, il y a équivalence entre point selle du Lagrangien et solution de KKT.

Théorème 7.4.4. On suppose que K est d'intérieur non vide, que f et q sont de classe $C^1(\mathbf{R}^n)$ et sont convexes dans \mathbf{R}^n .

Un point $(x^*, M^*) \in \mathbf{R}^n \times \mathbf{R}_+^m$ est un point selle du Lagrangien si et seulement si (x^*, M^*) est solution de KKT.

7.4.2 Dualité

Un point selle est solution d'un problème de maximisation avec contrainte de positivité, dont la fonction objectif est la valeur minimale d'un problème de minimisation sans contrainte. La notation $M \geq 0$ signifie $M \in \mathbf{R}_+^m$, autrement dit $\mu_j \geq 0, j = 1, \dots, m$.

Théorème 7.4.5. *On suppose que K est d'intérieur non vide, que f et q sont de classe $C^1(\mathbf{R}^n)$. On suppose que pour tout M dans \mathbf{R}_+^m , le problème $\min_x \mathcal{L}(x, M)$ a une solution unique.*

Un point selle vérifie

$$\mathcal{L}(x^*, M^*) = \max_{M \geq 0} (\min_x \mathcal{L}(x, M)).$$

Démonstration. Un point selle vérifie

$$\min_x \mathcal{L}(x, M) \leq \mathcal{L}(x^*, M) \leq \mathcal{L}(x^*, M^*) \text{ et } \mathcal{L}(x^*, M^*) \leq \min_x \mathcal{L}(x, M^*).$$

d'où le résultat. □

Définition 7.4.2. *Le problème de minimisation sans contrainte $\min_x \mathcal{L}(x, M)$ est le problème primal. Soit $\Phi(M)$ la valeur minimale. Le problème de maximisation avec contrainte de positivité $\max_{M \geq 0} \Phi(M)$ est le problème dual.*

Certains algorithmes de résolution utilisent cette dualité de problèmes associés au Lagrangien pour calculer une approximation d'un point selle du Lagrangien.

Chapitre 8

Optimisation avec contraintes mixtes d'égalité et d'inégalité

Dans ce chapitre, $\Omega \subset \mathbf{R}^n$ est un ouvert non vide et f est une fonction de Ω dans \mathbf{R} . L'objectif de ce chapitre est de trouver un point de minimum, qui respecte des contraintes d'égalité définies par la fonction vectorielle $g = (g_i), i = 1, \dots, p$ et des contraintes d'inégalité, définies par la fonction vectorielle $q = (q_j), j = 1, \dots, m$ de Ω dans \mathbf{R}^m .

L'ensemble admissible \mathbf{K} est

$$\mathbf{K} = \{x \in \Omega, g_i(x) = 0, i = 1, \dots, p, q_j(x) \leq 0, j = 1, \dots, m\}.$$

Si $\Omega = \mathbf{R}^n$ et si g et q sont continues, l'ensemble K est fermé. S'il est non vide, on peut appliquer des théorèmes d'existence vus au chapitre 1.

Pour résoudre le problème d'optimisation locale ou globale, nous commençons par définir une condition de qualification des contraintes, puis un Lagrangien et enfin une condition d'optimalité d'ordre 1.

8.1 Condition de Qualification des contraintes CQC

On donne ici une CQC d'indépendance linéaire. Il existe d'autres CQC, plus complexes à définir.

Définition 8.1.1. *On suppose que g et q sont de classe $C^1(\Omega)$.*

Soit $x \in \mathbf{K}$ tel que $1 \leq k \leq m$ contraintes d'inégalité sont actives en x , numérotées de 1 à k :

$$q_1(x) = \dots = q_k(x) = 0.$$

Si les gradients $\nabla g_1(x), \dots, \nabla g_p(x), \nabla q_1(x), \dots, \nabla q_k(x)$ forment un système libre, alors les contraintes sont qualifiées en x .

Soit $x \in \mathbf{K}$ tel qu'aucune contrainte d'inégalité n'est active en x . Si les gradients $\nabla g_1(x), \dots, \nabla g_p(x)$ forment un système libre, alors les contraintes sont qualifiées en x .

8.2 Lagrangien

Le Lagrangien de f associé aux contraintes g et q est une fonction de x , de p variables $\Lambda = (\lambda_i), i = 1, \dots, p$ et de m variables $M = (\mu_j), j = 1, \dots, m$.

Définition 8.2.1.

$$\mathcal{L}(x, \lambda_1, \dots, \lambda_p, \mu_1, \dots, \mu_m) = f(x) + \sum_{i=1}^p \lambda_i g_i(x) + \sum_{j=1}^m \mu_j q_j(x).$$

On peut aussi écrire

$$\mathcal{L}(x, \Lambda, M) = f(x) + \Lambda^T g(x) + M^T q(x).$$

On peut définir les dérivées partielles du Lagrangien à partir de celles de f, g, q .

Théorème 8.2.1. Si la fonction coût f et les contraintes g et q sont de classe $C^1(\Omega)$, alors le Lagrangien est de classe $C^1(\Omega \times \mathbf{R}^p \times \mathbf{R}^m)$. Les dérivées partielles du Lagrangien, qu'on peut regrouper dans des vecteurs gradients relatifs à x , à Λ et à M , sont :

$$\begin{cases} \nabla_x \mathcal{L}(x, \Lambda, M) = \nabla f(x) + J_g(x)^T \Lambda + J_q(x)^T M, \\ \nabla_\Lambda \mathcal{L}(x, \Lambda, M) = g(x), \\ \nabla_M \mathcal{L}(x, \Lambda, M) = q(x). \end{cases} \quad (8.1)$$

8.3 Condition d'optimalité d'ordre 1

La notion de point critique s'étend au cas de l'optimisation avec contraintes d'égalité et d'inégalité.

Définition 8.3.1. Soit $(x, \Lambda, M) \in \Omega \times \mathbf{R}^p \times \mathbf{R}^m$. Le point x est un point critique associé à un vecteur de multiplicateurs (Λ, M) si et seulement si (x, Λ, M) vérifie l'équation KKT de Karush Kuhn Tucker :

$$\begin{cases} \nabla_x \mathcal{L}(x, \Lambda, M) = 0, \\ g_i(x) = 0, i = 1, \dots, p, \\ \mu_j q_j(x) = 0, \\ q_j(x) \leq 0, j = 1, \dots, m, \\ \mu_j \geq 0. \end{cases} \quad (8.2)$$

L'équation KKT générale regroupe ainsi toutes les conditions d'optimalité d'ordre 1. C'est un système de $(n+p+m)$ équations non linéaires à $(n+p+m)$ inconnues, avec $2m$ inéquations. Les trois dernières équations forment un problème de complémentarité non linéaire.

Un point qui vérifie la CQC et qui est un minimum local est un point critique.

Théorème 8.3.1. Soit $x^* \in \mathbf{K}$ un point de l'ensemble admissible qui vérifie la CQC. Si x^* est un point de minimum local, alors il existe des multiplicateurs (Λ^*, M^*) tels que x^* est un point critique associé.

Il peut exister un point de minimum local qui ne vérifie pas la CQC ; ou qui ne vérifie ni la CQC ni l'équation KKT. Il peut exister un point critique qui n'est pas un point de minimum local.

Un multiplicateur μ_j^* associé à une contrainte inactive j est nul. Si un point de minimum local n'a aucune contrainte active et s'il satisfait la CQC, alors il vérifie l'équation d'Euler-Lagrange. En effet, le vecteur des multiplicateurs M est nul. Si une contrainte est active en un point de minimum local, ce point ne vérifie en général pas l'équation d'Euler-Lagrange.

Chapitre 9

Méthodes numériques

Dans tout ce chapitre, $\Omega = \mathbf{R}^n$. On s'intéresse aux problèmes de minimisation sans contrainte.

On suppose que f est au moins de classe $C^1(\mathbf{R}^n)$.

9.1 Méthodes itératives

De façon générale, une méthode numérique vise à calculer un point critique. Si f est convexe, ce point critique est un point de minimum global. Sinon, il faut vérifier la propriété du point obtenu : minimum ou maximum local, ou global, ou point selle, ou autre.

De façon générale, dès que f est non linéaire, un problème de minimisation se résout par une méthode itérative.

On se donne un vecteur initial x_0 et on construit x_{k+1} à partir de x_k de la façon suivante :

$$x_{k+1} = x_k + d_k,$$

où il faut choisir d_k de façon à ce que la suite x_k converge vers un point critique. Dans ce cas, le gradient $\nabla f(x_k)$ converge vers 0.

Réciproquement, le gradient $\nabla f(x_k)$ peut converger vers 0 sans que la suite x_k converge vers un point critique.

9.1.1 Critères d'arrêt

Si $\nabla f(x_k) = 0$, alors x_k est un point critique et l'algorithme s'arrête.

En pratique, il faut arrêter l'algorithme dès que $\|\nabla f(x_k)\|$ est petit. Le premier critère d'arrêt est donc $\|\nabla f(x_k)\| \leq \eta$, où $\eta > 0$ est un seuil fixé à l'avance. Alors x_k est "presque" un point critique mais rien ne garantit que la suite x_k a convergé ni que x_k est "presque" un point de minimum ou maximum.

Afin de garantir l'arrêt de l'algorithme, il est prudent d'imposer un nombre maximal d'itérations. C'est le deuxième critère d'arrêt. Si l'algorithme s'arrête sur ce critère, il n'a en général pas convergé.

9.1.2 Direction de descente

La plupart des méthodes choisissent une direction de descente d_k . Puisque l'algorithme s'arrête dès que $\|\nabla f(x_k)\| \leq \eta$, on suppose ici que $\nabla f(x_k) \neq 0$.

Définition 9.1.1. *Soit x tel que $\nabla f(x) \neq 0$. Le vecteur d est une direction de descente au point x si et seulement si $\nabla f(x)^T d < 0$.*

Des directions de descente d_k garantissent une suite strictement décroissante des valeurs $f(x_k)$. Si la suite est minorée, elle converge.

Théorème 9.1.1. *Si $\nabla f(x_k) \neq 0$ et si le vecteur d_k est une direction de descente en x_k , alors, pour $\|d_k\| > 0$ assez petit, $f(x_{k+1}) < f(x_k)$.*

Démonstration. On écrit la formule de Taylor à l'ordre 1 :

$$f(x_{k+1}) = f(x_k) + \nabla f(x_k)^T d_k + \|d_k\| \epsilon(\|d_k\|).$$

Puisque $\nabla f(x_k)^T d_k < 0$, pour $\|d_k\|$ assez petit, $\nabla f(x_k)^T d_k + \|d_k\| \epsilon(\|d_k\|) < 0$ et $f(x_{k+1}) < f(x_k)$. \square

9.2 Méthode de gradient

Supposons que $\nabla f(x_k) \neq 0$.

Dans une méthode de gradient, on cherche une direction de descente d telle que $|\nabla f(x_k)^T d|$ soit le plus grand possible. On dit aussi méthode de la plus grande pente.

On a $|\nabla f(x_k)^T d| \leq \|\nabla f(x_k)\| \|d\|$ et il y a égalité si et seulement si $d = \alpha \nabla f(x_k)$.

Le paramètre α doit être strictement négatif pour que d soit une direction de descente. On choisit alors $d_k = -t_k \nabla f(x_k)$ avec $t_k > 0$.

Définition 9.2.1. Une méthode de gradient est définie par un paramètre $t_k > 0$, une valeur initiale x_0 et la récurrence

$$x_{k+1} = x_k - t_k \nabla f(x_k)$$

tant que $\nabla f(x_k) \neq 0$.

Il existe plusieurs variantes suivant le choix de t_k . Ce choix doit garantir la convergence de l'algorithme.

9.2.1 Méthode de gradient à pas fixe

Ici, $t_k = t$, où $t > 0$ est constant. Si la fonction f vérifie certaines hypothèses, il existe un unique point de minimum x^* et la suite x_k converge vers x^* dès que t est assez petit.

Théorème 9.2.1. On suppose que f est de classe $C^2(\mathbf{R}^n)$ et que f est fortement convexe. Donc il existe un unique point x^* de minimum global qui est l'unique point critique. Alors la suite x_k converge vers x^* pour t assez petit et pour tout x_0 .

Soit $\lambda_1(x) \leq \dots \leq \lambda_n(x)$ les valeurs propres de la matrice hessienne $H_f(x)$.

S'il existe $\alpha > 0$ et $\beta > 0$ tels que

$$\forall x \in \mathbf{R}^n, \alpha \leq \lambda_1(x) \leq \dots \leq \lambda_n(x) \leq \beta,$$

alors l'algorithme converge pour $0 < t < \frac{2\alpha}{\beta^2}$.

La convergence de la méthode du gradient à pas fixe est linéaire. Il existe $r \in [0, 1[$ tel que

$$\|x_{k+1} - x^*\| \leq r \|x_k - x^*\|.$$

En pratique, cette convergence peut être lente et il faut faire beaucoup d'itérations. On peut accélérer la convergence en choisissant un pas variable.

9.2.2 Méthode de gradient à pas variable

Ici, on choisit t_k de façon à minimiser la valeur $f(x_{k+1})$. Soit ϕ la fonction de \mathbf{R}^{+*} dans \mathbf{R} définie par

$$\phi(t) = f(x_k - t \nabla f(x_k)),$$

On cherche t tel que $\phi(t)$ est minimal.

Théorème 9.2.2. *Si f est de classe C^2 et est fortement convexe, alors il existe $t_k > 0$ tel que $\phi(t_k)$ est minimal. La méthode de gradient avec ce choix de t_k , pour tout x_0 , définit une suite x_k qui converge vers l'unique point de minimum global.*

La convergence est en général plus rapide qu'avec un pas fixe mais reste linéaire. La méthode de Newton converge en général beaucoup plus vite.

9.2.3 Recherche linéaire

Soit d une direction de descente en x (donc $d^T \nabla f(x) < 0$) et ϕ la fonction définie dans \mathbf{R} par $\phi(t) = f(x + td)$.

La fonction ϕ est de classe C^1 et $\phi'(t) = d^T \nabla f(x + td)$.

Donc $\phi(0) = f(x)$ et $\phi'(0) = d^T \nabla f(x) < 0$.

La recherche linéaire consiste à résoudre le problème de minimisation de ϕ dans \mathbf{R}_+^* . On peut calculer un point critique de ϕ dans $]0, +\infty[$ donc résoudre l'équation $\phi'(t) = 0$.

On peut aussi calculer une approximation de la solution qui doit satisfaire deux conditions, dits critères de Wolfe :

Soit c_1 un nombre tel que $0 < c_1 < 1$. Le premier critère, appelé condition de Goldstein-Armijo, garantit que la décroissance de ϕ est suffisante :

$$\phi(t) \leq \phi(0) - c_1 t |\phi'(0)|.$$

Soit c_2 un nombre tel que $c_1 < c_2 < 1$. Le deuxième critère, appelé condition de courbure, garantit que la dérivée de ϕ en t est assez grande :

$$\phi'(t) \geq c_2 \phi'(0).$$

9.3 Méthode de Newton

On suppose que f est une fonction de classe $C^2(\mathbf{R}^n)$. Dans la méthode de Newton, on utilise la récurrence

$$x_{k+1} = x_k + d_k,$$

où il faut choisir d_k .

On veut résoudre l'équation $\nabla f(x) = 0$. On utilise la méthode de Newton qui résout l'équation $F(x) = 0$, où F est une fonction de \mathbf{R}^n dans \mathbf{R}^n de classe $C^1(\mathbf{R}^n)$.

Si $n = 1$ la méthode de Newton s'appelle aussi la méthode de la tangente et s'écrit :

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

tant que $F'(x_k) \neq 0$.

Pour n quelconque, on linéarise F en utilisant la formule de Taylor à l'ordre 1 et la matrice jacobienne $J_F(x)$:

$$F(x_{k+1}) = F(x_k) + J_F(x_k)y_k + \dots$$

On veut résoudre l'équation $F(x_k) + J_F(x_k)d_k = 0$. Si la matrice jacobienne $J_F(x_k)$ est inversible, il existe une solution unique, qu'on choisit. On obtient

$$x_{k+1} = x_k - J_F(x_k)^{-1}F(x_k).$$

La méthode itérative échoue si la matrice jacobienne $J_F(x_k)$ est singulière.

Pour résoudre l'équation $\nabla f(x) = 0$, on utilise donc la matrice jacobienne de la fonction gradient, c'est-à-dire la matrice hessienne de f .

Définition 9.3.1. *La méthode de Newton est définie par une valeur initiale x_0 et par la récurrence*

$$x_{k+1} = x_k - H_f(x_k)^{-1}\nabla f(x_k),$$

tant que la matrice hessienne $H_f(x_k)$ est inversible et tant que $\nabla f(x_k) \neq 0$.

Sous certaines hypothèses, la suite x_k converge.

Théorème 9.3.1. *On suppose que f est de classe C^3 , qu'il existe un point critique x^* (donc $\nabla f(x^*) = 0$) tel que $H_f(x^*)$ est inversible. Si la valeur initiale x_0 est suffisamment proche de x^* , alors les matrices $H_f(x_k)$ sont inversibles et la suite x_k est bien définie. De plus, elle converge vers x^* .*

La méthode de Newton converge vers un point critique. Il faut vérifier si celui-ci est un un point de minimum local, par exemple en utilisant la convexité.

Il est intéressant en pratique d'utiliser des directions de descente pour diminuer la valeur de $f(x_k)$ à chaque itération.

Théorème 9.3.2. *Si $\nabla f(x_k) \neq 0$ et si $H_f(x_k)$ est symétrique définie positive, alors $d_k = -H_f(x_k)^{-1}\nabla f(x_k)$ est une direction de descente.*

Démonstration. $\nabla f(x_k)^T d_k = -\nabla f(x_k)^T H_f(x_k)^{-1} \nabla f(x_k) < 0$ puisque $H_f(x_k)$ est symétrique définie positive et $\nabla f(x_k) \neq 0$. \square

La convergence de la méthode de Newton est quadratique, donc très rapide. Il existe $r > 0$ tel que

$$\|x_{k+1} - x^*\| \leq r \|x_k - x^*\|^2.$$

9.3.1 Approximation de f à l'ordre 2

Écrivons la formule de Taylor à l'ordre 2, aux points x_k et $x_k + d$:

$$f(x_k + d) = g(d) + \|d_k\|^2 \epsilon(\|d_k\|),$$

où $g(d) = f(x_k) + \nabla f(x_k)^T d + \frac{1}{2} d^T H_f(x_k) d$. La fonction g est une approximation de f à l'ordre 2.

La méthode de Newton calcule le point critique de la fonction g : en effet, g est une fonction quadratique dans \mathbf{R}^n donc $\nabla g(d) = \nabla f(x_k) + H_f(x_k) d$ et $H_g(d) = H_f(x_k)$. Donc si $H_f(x_k)$ est inversible, g a un unique point critique, $d_k = -H_f(x_k)^{-1} \nabla f(x_k)$. Si $H_f(x_k)$ est symétrique définie positive, g est fortement convexe dans \mathbf{R}^n et ce point critique est l'unique point de minimum global de g .

9.3.2 Convergence globale

La convergence de Newton est dite locale parce qu'elle est prouvée si le point de départ est proche de la solution. Pour garantir une convergence pour tout point de départ, dite convergence globale, on introduit un scalaire t_k . On définit les itérations par

$$x_{k+1} = x_k + t_k d_k,$$

où d_k est défini par la méthode de Newton et où il faut choisir t_k .

Ici, on choisit t_k de façon à minimiser la valeur $f(x_{k+1})$. Soit ϕ la fonction de \mathbf{R}^{+*} dans \mathbf{R} définie par

$$\phi(t) = f(x_k + t d_k),$$

on cherche t tel que $\phi(t)$ est minimal. Comme pour le gradient à pas optimal, c'est une recherche linéaire.

9.3.3 Algorithme de quasi-Newton

Il est parfois coûteux ou difficile de calculer la matrice hessienne $H_f(x_k)$ puis de résoudre le système linéaire $H_f(x_k)d = -\nabla f(x_k)$, pour calculer la solution d_k puis x_{k+1} .

Plusieurs variantes de la méthode de Newton, dites de quasi-Newton, utilisent une approximation B_k de $H_f(x_k)$, où B_k est une matrice inversible.

Définition 9.3.2. *Une méthode de quasi-Newton est définie par une valeur initiale x_0 , une suite de matrices inversibles B_k et par la récurrence*

$$d_k = -B_k^{-1}\nabla f(x_k), x_{k+1} = x_k + d_k,$$

tant que $\nabla f(x_k) \neq 0$.

Lorsqu'un algorithme de quasi-Newton converge, il requiert nettement plus d'itérations que la méthode de Newton. Souvent, la vitesse de convergence devient linéaire au lieu d'être quadratique. Néanmoins, le calcul de chaque itération est plus rapide donc le temps global peut être plus petit qu'avec la méthode de Newton.

Si $H_f(x_0)$ est symétrique définie positive, une première variante est de choisir $B_k = H_f(x_0)$.

Une autre approximation, très largement utilisée, est celle dite BFGS, du nom de ses auteurs Broyden, Fletcher, Goldfarb, Shanno.

L'algorithme part d'une approximation B_0 , par exemple $B_0 = I$. Puis il construit B_{k+1} à partir de B_k en ajoutant deux matrices de rang 1 :

$$B_{k+1} = B_k + \alpha_k u_k u_k^T + \beta_k (B_k v_k)(B_k v_k)^T,$$

où les vecteurs sont définis par $u_k = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)$ et $v_k = x_{k+1} - x_k$. Les scalaires sont définis par $\alpha_k = \frac{1}{u_k^T v_k}$ et $\beta_k = \frac{1}{v_k^T B_k v_k}$.

Si B_0 est symétrique définie positive, alors B_k est symétrique définie positive et d_k est une direction de descente tant que le gradient $\nabla f(x_k)$ est non nul.

Il est possible de calculer d_k de façon approchée en utilisant une approximation de B_k^{-1} .

9.3.4 Algorithme de Newton inexact

Lorsqu'une méthode itérative est utilisée pour résoudre le système linéaire, alors le vecteur d_k est une approximation de la direction de Newton.

On parle de méthode de Newton inexacte.

L'algorithme utilise deux critères d'arrêt qui sont liés, l'un pour la méthode itérative linéaire, l'autre pour la méthode de Newton.

La convergence de l'algorithme de Newton inexact est plus lente, souvent linéaire. Il faut gagner du temps dans chaque itération pour diminuer le temps de calcul global.

9.3.5 Minimisation avec contraintes d'égalité

On veut minimiser f dans \mathbf{R}^n sous la contrainte $g(x) = 0$.

On cherche un point critique solution de l'équation d'Euler-Lagrange.

Soit F la fonction définie par

$$F(x, \Lambda) = \begin{pmatrix} \nabla_x \mathcal{L}(x, \Lambda) \\ g(x) \end{pmatrix}$$

où $\nabla_x \mathcal{L}(x, \Lambda) = \nabla f(x) + J_g(x)^T \Lambda$.

L'équation d'Euler-Lagrange s'écrit $F(x, \Lambda) = 0$. La matrice jacobienne de la fonction F vaut

$$J_F(x, \Lambda) = \begin{pmatrix} H_f(x) + \sum_{i=1}^p \lambda_i H_{g_i}(x) & J_g(x)^T \\ J_g(x) & 0 \end{pmatrix}$$

On utilise ensuite la méthode de Newton ou une méthode de quasi-Newton. Par exemple, on peut approcher $J_F(x, \Lambda)$ par

$$B(x) = \begin{pmatrix} H_f(x) & J_g(x)^T \\ J_g(x) & 0 \end{pmatrix}$$

Si $H_f(x)$ est symétrique définie positive et si $\text{Ker}(J_g(x)^T) = 0$, alors la matrice $B(x)$ est inversible. Avec ce choix de $B(x)$, la méthode de quasi-Newton s'écrit

$$\begin{pmatrix} x_{k+1} \\ \Lambda_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_k \\ \Lambda_k \end{pmatrix} - B(x_k)^{-1} \begin{pmatrix} \nabla_x \mathcal{L}(x_k, \Lambda_k) \\ g(x_k) \end{pmatrix}$$

Chapitre 10

Bibliographie

Voici quelques références bibliographiques qui peuvent être utiles.

Bibliographie

- [1] G. Allaire. *Analyse numérique et optimisation, Éditions de l'École Polytechnique (2e édition)*. Ellipses, 2012.
- [2] G. Allaire. Approximation numérique et optimisation - une introduction à la modélisation mathématique et à la simulation numérique. Cours, Ecole Polytechnique, 2015. <http://www.cmap.polytechnique.fr/~allaire/>.
- [3] J.-F. Bonnans, J.-C. Gilbert, C. Lemaréchal, and C. A Sagastizábal. *Numerical optimization : theoretical and practical aspects (2nd édition)*. Springer, 2006.
- [4] I. S. Ciuperca. Cours optimisation. Cours, Université de Lyon, 2013. <http://math.univ-lyon1.fr/~ciuperca/optim-M1-sitn/cours-optim-M1-sitn.pdf>.
- [5] T. Deheuvelds. Optimisation et méthodes numériques. Cours, ENSAI, 2016.
- [6] C. T. Kelley. *Solving nonlinear equations with Newton's method*. Fundamentals of Algorithms. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, 2003.
- [7] P. Laurent-Gengoux. Optimisation. Cours, Ecole Centrale Paris, 2007. <http://perso.ecp.fr/~laurent/Modif/Documents/CoursOptim.pdf>.