



Faculté des Sciences Exactes et Informatique
Département de Mathématiques

N° d'ordre :

N° de série :

Mémoire de fin d'études

Présenté pour l'obtention du diplôme de

Master

Spécialité : Mathématiques

Option : EDP et Applications

Thème

**Etude théorique et numérique des méthodes
d'optimisation**

Présente par :

Bouadem Soumia

Devant le jury :

Président	Maarouf Sara	M.C.A. Université de Jijel
Encadreur	Menniche Linda	M.C.A. Université de Jijel
Examineur	Zerroug Hassina	M.C.B. Université de Jijel

Promotion : 2022/2023

Remerciements

Tout d'abord et avant tout, je remercie **ALLAH** qui m'a donné **la force, la volonté, la santé, la patience, et le courage** pour accomplir ce modeste travail.

Je tiens à exprimer ma reconnaissance et gratitude à mon encadreur Mme **"Menniche Linda"**, pour avoir accepté de diriger ce travail ainsi que pour ses conseils avec beaucoup de patience et d'encouragements.

Je remercie les membres du jury qui ont accepté de juger mon travail.

Mme **Maarouf Sara**, qui me fait l'honneur de présider ce jury.

Mme **Zerroug Hassina**, pour avoir accepté d'examiner ce travail.

Je remercie aussi en particulier tous les enseignants du spécialité EDP.

Un grand merci pour **"Ma famille"** essentiellement **"Ma père"** pour leurs encouragement, pour mes amis qui nous a supporté tous les difficultés et soutient moral tous au long de notre travail.

Je tiens à remercier tous ceux qui se sont impliqués dans ce travail, directement ou indirectement.

Dédicace

Je dédie ce mémoire

À

Mes chères parents,

Mes chères sœurs,

Mes chères frères,

*Tous mes amis et mes collègues de la
promotion 2022-2023*

B.Soumia.

TABLE DES MATIÈRES

Introduction	1
1 Préliminaires et notions fondamentales	3
1.1 Différentiabilité	3
1.1.1 Dérivée partielle	3
1.1.2 Gradient	4
1.1.3 Matrice Hessienne	5
1.1.4 Dérivée directionnelle	6
1.1.5 Direction de descente	8
1.2 Formules de Taylor	8
1.3 Convexité	9
1.3.1 Ensembles convexes	9
1.3.2 Fonctions convexes	9
1.3.3 Caractérisation des fonctions convexes	10
1.4 Extremums d'une fonction	13
1.5 Points critiques	13

1.6	Résultat d'existence et d'unicité	15
1.7	Condition d'optimalité	16
1.7.1	Condition nécessaire d'optimalité	16
1.7.2	Condition suffisante d'optimalité	17
1.7.3	Condition nécessaire et suffisante	18
2	Méthodes de résolution	19
2.1	Méthode de Newton	20
2.1.1	Algorithme de Newton	21
2.2	Méthode du gradient	23
2.2.1	Algorithme du gradient	26
2.2.2	Méthode du gradient à pas fixe	26
2.2.3	Méthode du gradient à pas optimal	26
2.3	Méthode du gradient conjugué	27
2.3.1	Cas quadratique	27
2.3.2	Algorithme du gradient conjugué	29
2.3.3	Cas quelconque	32
2.3.4	Algorithme de la méthode du gradient conjugué pour les fonctions quelconques	35
2.4	Variante de la méthodes du gradient conjugué "Fletcher-Reeves"	35
2.4.1	Algorithme de la méthode de Flecher-Reeves	36
2.4.2	Algorithme de wolfe	37
2.5	Méthode de relaxation	42
2.5.1	Algorithme de relaxation	43

3 Étude numérique des méthodes d'optimisation sans contraintes	44
3.1 Exemples	44
Bibliographie	47

NOTATIONS GÉNÉRALES

$\langle \cdot, \cdot \rangle$: Produit scalaire dans \mathbb{R}^n .
$\ \cdot\ $: Norme Euclidienne défini par $\ x\ = (\sum_{i=1}^n x_i^2)^{\frac{1}{2}}$.
$B(x^*, r)$: Boule ouverte de centre x^* et de rayon r .
∇f	: Gradient de f .
c-à-d	: C'est à dire.
i.e.,	: Identiquement.
min	: Minimum.
ssi	: si et seulement si.

L'optimisation est une branche des mathématiques appliquées et de la recherche opérationnelle. Elle possède ses origines depuis des siècles lorsque le philosophe Grec Pythagore formule son célèbre théorème, où dans un triangle rectangle, le carré de longueur de l'hypoténuse est égale à la somme des carrés des longueurs des deux autres cotés, ce théorème a été utilisé en suite par le célèbre mathématicien Grec Euclide dans le calcul et la minimisation des distances.

L'optimisation intervient pratiquement dans tout les domaines surtout l'industrie. Les mathématiques tel que l'analyse numérique, en statistique pour l'estimation du maximum de vraisemblance d'une distribution, ...

Dans le cadre de ce mémoire nous, considérons le problème de minimisation non linéaire, sans contraintes, de la forme suivante

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x). \quad (1)$$

Où $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, tel que f est non linéaire.

Il existe plusieurs méthodes numériques pour résoudre le problème (1), on cite par exemple la méthode de **Newton** [1], la méthode du **gradient** [2], la méthode du **gradient conjugué** [7] et ces variantes comme la variante de **Fletcher-Reeves** [5], la variante de **Dai Yuan** [6], ...

Dans ce travail, nous intéressons à l'étude des problèmes d'optimisation non linéaire sans contraintes. Pour ce faire, nous avons opté le plan de travail suivant

*Le premier chapitre traite les notions de bases nécessaire pour l'optimisation sans contraintes, tel que la convexité, les conditions d'optimalité,...

*Dans le deuxième chapitre, nous allons étudier en détail les méthodes de résolutions des problèmes d'optimisations sans contraintes.

*On termine se manuscrit par des simulations numériques, sur des fonctions test bien connues.

CHAPITRE 1

PRÉLIMINAIRES ET NOTIONS FONDAMENTALES

L'objectif de ce chapitre est de rappeler quelques notions de base qui seront utilisées par la suite comme différentiabilité, formule de Taylor et convexité, et l'outil de problème d'optimisation sans contraintes comme résultat d'existence et unicité et condition d'optimalité. Pour les preuves et les propositions et les théorèmes énoncés dans ce chapitre, le lecteur peut consulter par exemple [9, 7].

Rappel de calcul différentiel

1.1 Différentiabilité

1.1.1 Dérivée partielle

Définition 1.1.1. Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction continue. La fonction notée $\frac{\partial f(x)}{\partial x_i}$, $\forall i = 1, \dots, n$ est appelée *i^{ème} dérivée partielle* de f avec est définie comme suit

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(x_1, \dots, x_i + t, \dots, x_n) - f(x_1, \dots, x_i, \dots, x_n)}{t}.$$

Exemple 1.1.1. Soit $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^2$ défini par

$$f(x) = \begin{pmatrix} x_1^3 + x_2^4 + x_3^2 \\ 5x_1^2 + 2x_2^3 + x_3 \end{pmatrix}.$$

On pose

$f_1(x) = x_1^3 + x_2^4 + x_3^2$, $f_2(x) = 5x_1^2 + 2x_2^3 + x_3$, alors on a

$$\frac{\partial f_1}{\partial x_1} = 3x_1^2, \quad \frac{\partial f_1}{\partial x_2} = 4x_2^3, \quad \frac{\partial f_1}{\partial x_3} = 2x_3,$$

$$\frac{\partial f_2}{\partial x_1} = 10x_1, \quad \frac{\partial f_2}{\partial x_2} = 6x_2^2, \quad \frac{\partial f_2}{\partial x_3} = 1.$$

1.1.2 Gradient

Définition 1.1.2. Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Si les dérivées partielles $\frac{\partial f}{\partial x_i}$ existent pour tout i en tout point $x \in \mathbb{R}^n$, le gradient est définie comme suit

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

Exemple 1.1.2. Soit $f(x_1, x_2, x_3) = e^{x_1} + x_1^2 x_3 - x_1 x_2 x_3$, le gradient de f au point $(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$ est donné par

$$\nabla f(x_1, x_2, x_3) = \begin{pmatrix} e^{x_1} + 2x_1 x_3 - x_2 x_3 \\ -x_1 x_3 \\ x_1^2 - x_1 x_2 \end{pmatrix}.$$

Remarque 1.1.1.

- $\frac{\partial f}{\partial x_i}(x) = \frac{\partial f}{\partial e_i}(x)$, $\forall x \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$. (Ω est un ouvert de \mathbb{R}^n).
- $\frac{\partial f}{\partial h}(x) = \langle \nabla f(x), h \rangle$, $\forall x \in \Omega, \forall h \in \mathbb{R}^n$.

Proposition 1.1.1. Pour tout $x \in \mathbb{R}^n$, le gradient $\nabla f(x)$ est l'unique vecteur tel que pour tout $h \in \mathbb{R}^n$, on a

$$\nabla f(x)^T h = \langle \nabla f(x), h \rangle.$$

Proposition 1.1.2. (Gradient de la composée) Soient $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $U \subset \mathbb{R}$ deux ouverts et $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$, $g : U \rightarrow \mathbb{R}$.

Supposons que f , g sont de classe C^1 , alors $g \circ f$ est aussi de classe C^1 et est définie de

\mathbb{R}^n dans \mathbb{R} . En plus

$$\nabla(g \circ f)(x) = g'(f(x))\nabla f(x), \quad \forall x \in \Omega.$$

Exemple 1.1.3. $f(x_1, x_2) = 2x_1x_2^2$, $g(x) = \frac{3}{2}x^2 + 2$.

$$\begin{aligned} \nabla(g \circ f)(x) &= 6(x_1x_2^2) \begin{pmatrix} 2x_2^2 \\ 4x_1x_2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 12x_1x_2^4 \\ 24x_1^2x_2^3 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

1.1.3 Matrice Hessienne

Définition 1.1.3. Soit $f : \Omega \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction réelle de classe C^2 . Pour tout $x \in \Omega$, et $i, j \in 1, 2, \dots, n$, on note

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

La dérivée partielle à l'ordre n donnée par

$$(\nabla^2(f(x)))_{ij} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x), \quad \forall i, j = 1, 2, \dots, n.$$

$\nabla^2 f(x)$ s'appelle la matrice Hessienne de f en x , qui s'écrit aussi

$$\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{pmatrix}.$$

Proposition 1.1.3. Nous avons

$$\nabla^2 f(x)h = \nabla \langle \nabla f(x), h \rangle, \quad \forall x \in \Omega, \quad \forall h \in \mathbb{R}^n,$$

où le premier gradient dans le membre de droite de l'égalité est considéré par rapport à la variable x .

Démonstration.

On a $\frac{\partial}{\partial x_i} \langle \nabla f(x), h \rangle = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\sum_{j=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_j}(x) h_j \right) = \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x) h_j = \langle \nabla^2 f(x) h, h \rangle$. ■

Quelque rappels sur les matrices carrées réelles

Soit $n \in \mathbb{N}$ et $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ une matrice carrée réelle.

1. Soit C l'ensemble des nombres complexes. On rappelle que $\lambda \in C$ est une **valeur propre** de A s'il existe $x \in C^n$ avec $x \neq 0$ telle que $Ax = \lambda x$, on appelle x **vecteur propre** de A associé à la valeur propre λ .
2. On dit que la matrice A est **semi-définie positive** (respectivement A est **définie positive**) si $\langle Ax, x \rangle \geq 0$, $\forall x \in \mathbb{R}^n$ (respectivement $\langle Ax, x \rangle > 0$, $\forall x \in \mathbb{R}^n$ avec $x \neq 0$).
3. Rappelons que si A est **symétrique** alors toutes les valeurs propres de A sont réelles, en plus il existe n vecteurs propres de A appartenant à \mathbb{R}^n formant une base orthonormée de \mathbb{R}^n .
4. Supposons que la matrice A est symétrique, alors

$$\langle Ah, h \rangle \geq \lambda_{\min} \|h\|^2, \forall h \in \mathbb{R}^n,$$

où $\lambda_{\min} \in \mathbb{R}$ est la plus petite valeur propre de A .

Remarquons que l'inégalité précédente devient égalité si h est un vecteur propre associé à la valeur propre λ_{\min} .

5. Supposons que A est symétrique, alors A est semi-définie positive si et seulement si $\lambda_{\min} \geq 0$ et A est définie positive si et seulement si $\lambda_{\min} > 0$.

1.1.4 Dérivée directionnelle

Définition 1.1.4. Soit f une application de \mathbb{R}^n à valeurs dans \mathbb{R} . La dérivée directionnelle de f en x dans la direction $h \in \mathbb{R}^n$, est

$$\frac{\partial f(x)}{\partial h} = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(x + th) - f(x)}{t}.$$

De plus, lorsque le gradient existe, la dérivée directionnelle est le produit scalaire entre le gradient de f et la direction h c-à-d

$$\frac{\partial f}{\partial h}(x) = \langle h, \nabla f(x) \rangle.$$

Remarque 1.1.2. Pour tout $x \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$ et $h \in \mathbb{R}^n$, on note

$$\frac{\partial f}{\partial h}(x) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} [f(x + th) - f(x)] = g'(0).$$

(c'est la dérivée directionnelle de f en x de direction h), où on a noté

$$g(t) = f(x + th).$$

Exemple 1.1.4. Soit $f(x_1, x_2, x_3) = 5x_1x_3 - x_1^3x_2 + 2x_1x_2x_3$ et soit

$$h = \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \\ h_3 \end{pmatrix}.$$

La dérivée directionnelle de f dans la direction h est

$$\langle (h_1 \ h_2 \ h_3) \nabla f(x_1, x_2, x_3) \rangle = h_1(5x_3 - 3x_1^2x_2 + 2x_2x_3) + h_2(-x_1^3 + 2x_1x_3) + h_3(5x_1 + 2x_1x_2),$$

où $\nabla f(x_1, x_2, x_3)$ est donnée par

$$\nabla f(x_1, x_2, x_3) = \begin{pmatrix} 5x_3 - 3x_1^2x_2 + 2x_2x_3 \\ -x_1^3 + 2x_1x_3 \\ 5x_1 + 2x_1x_2 \end{pmatrix}.$$

Définition 1.1.5. (*Fonction différentiable*) Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction continue.

Pour tout $h \in \mathbb{R}^n$, la dérivée directionnelle de f dans la direction h existe, alors la fonction f est dite différentiable.

1.1.5 Direction de descente

Définition 1.1.6. Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction continue.

Soit $x \in \mathbb{R}^n$, on dit que $d \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ est une direction de descente au point x s'il existe $\delta > 0$ tel que

$$f(x + td) \leq f(x), \quad \forall t \in]0, \delta[.$$

Soit $x \in \mathbb{R}^n$, on dit que $d \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ est une direction de descente stricte au point x s'il existe $\delta > 0$ tel que

$$f(x + td) < f(x), \quad \forall t \in]0, \delta[.$$

Définition 1.1.7. Soit d un vecteur non nul de \mathbb{R}^n . On dit que d est une direction de descente de f en $x \in \mathbb{R}^n$ si $d^T \nabla f(x) < 0$.

1.2 Formules de Taylor

Proposition 1.2.1. Soit Ω un ouvert de \mathbb{R}^n , $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, $a \in \Omega$ et $h \in \mathbb{R}^n$, tel que $[a, a+h] \subset \Omega$, alors

1. Si $f \in C^1(\Omega)$, on a les formules suivantes

i) Formule de Taylor à l'ordre 1 avec reste intégral

$$f(a+h) = f(a) + \int_0^1 \langle \nabla f(a+th), h \rangle dt.$$

ii) Formule de Taylor-Maclaurin à l'ordre 1

il existe $\theta \in [0, 1]$ tel que $f(a+h) = f(a) + \langle \nabla f(a+\theta h), h \rangle$.

iii) Formule de Taylor-Young à l'ordre 1

$$f(a+h) = f(a) + \langle \nabla f(a), h \rangle + o(\|h\|).$$

2. Si $f \in C^2(\Omega)$, alors on a

i) Formule de Taylor à l'ordre 2 avec reste intégral

$$f(a+h) = f(a) + \langle \nabla f(a), h \rangle + \int_0^1 (1-t) \langle \nabla^2 f(a+th)h, h \rangle dt.$$

ii) Formule de Taylor-Maclaurin à l'ordre 2

il existe $\theta \in [0, 1]$ tel que

$$f(a+h) = f(a) + \langle \nabla f(a), h \rangle + \frac{1}{2} \langle \nabla^2 f(a+\theta h)h, h \rangle.$$

iii) Formule de Taylor-Young à l'ordre 2

$$f(a+h) = f(a) + \langle \nabla f(a), h \rangle + \frac{1}{2} \langle \nabla^2 f(a)h, h \rangle + o(\|h\|^2).$$

1.3 Convexité

1.3.1 Ensembles convexes

Définition 1.3.1. Un ensemble $C \subset \mathbb{R}^n$ est dit convexe si pour tout couple $(x, y) \in C^2$ et $\forall t \in [0, 1]$ on a

$$tx + (1-t)y \in C.$$

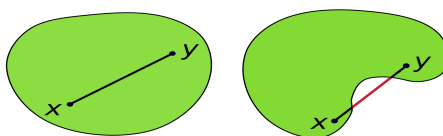


FIGURE 1.1 – exemple de convexité

Exemple 1.3.1. Tout disque, ainsi un cube plein, une boule sont convexes.

1.3.2 Fonctions convexes

Définition 1.3.2. Soit $C \subset \mathbb{R}^n$ un ensemble convexe, et $f : C \rightarrow \mathbb{R}^n$ une fonction. On dit que

- f est convexe si

$$\forall x, y \in C, \forall t \in [0, 1] \quad f(tx + (1-t)y) \leq tf(x) + (1-t)f(y).$$

- f est fonction strictement convexe si

$$\forall x, y \in C, x \neq y, \forall t \in [0, 1] \quad f(tx + (1-t)y) < tf(x) + (1-t)f(y).$$

- f est concave si $-f$ est convexe, c-à-d

$$\forall x, y \in C, \forall t \in [0, 1] \quad f(tx + (1-t)y) \geq tf(x) + (1-t)f(y).$$

1.3.3 Caractérisation des fonctions convexes

Proposition 1.3.1. Soient $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ ouvert, $C \subset \Omega$ avec C convexe et $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction de classe C^1 .

- Si $f \in C^1(C)$, alors on a les équivalences suivantes

1. f est convexe sur C

2.

$$f(y) \geq f(x) + \langle \nabla f(x), y - x \rangle, \quad \forall x, y \in C.$$

3. ∇f est monotone sur C , c'est à dire

$$\langle \nabla f(y) - \nabla f(x), y - x \rangle \geq 0, \quad \forall x, y \in C.$$

- Si $f \in C^2(C)$, alors f est convexe sur C si et seulement si

$$\langle \nabla^2 f(x)(y - x), y - x \rangle \geq 0, \quad \forall x, y \in C. \quad (1.1)$$

Démonstration. 1 \implies 2) Supposons que f est convexe sur C , la définition de la convexité peut s'écrire

$$f(x + t(y - x)) - f(x) \leq t[f(y) - f(x)], \quad \forall x, y \in C, \forall t \in [0, 1].$$

En fixant x, y et en divisant par t

$$\frac{f(x + t(y - x)) - f(x)}{t} \leq f(y) - f(x), \quad \forall t \in]0, 1[.$$

En faisant tendre t vers 0

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(x + t(y - x)) - f(x)}{t} \leq f(y) - f(x).$$

D'après la Définition 1.1.4.

$$\frac{\partial f(x)}{\partial(y - x)} \leq f(y) - f(x).$$

On obtient 2.

$$f(y) \geq f(x) + \langle \nabla f(x), y - x \rangle, \quad \forall x, y \in C.$$

2 \implies 3) De 2., on a

$$f(y) \geq f(x) + \langle \nabla f(x), y - x \rangle, \quad \forall x, y \in C.$$

Et on a aussi, (en inversant x et y)

$$f(x) \geq f(y) + \langle \nabla f(y), x - y \rangle, \quad \forall x, y \in C.$$

En faisant la somme de ces inégalités, on obtient 3

$$\langle \nabla f(y) - \nabla f(x), y - x \rangle \geq 0, \quad \forall x, y \in C.$$

3 \implies 1) Soient $x, y \in C$ fixé. On introduit la fonction $g : [0, 1] \longrightarrow \mathbb{R}$ défini par

$$g(t) = f(ty + (1 - t)x).$$

Il est facile de voir que g est de classe C^1 , et on a

$$g'(t) = \langle \nabla f(ty + (1 - t)x), y - x \rangle, \quad \forall t \in [0, 1].$$

Soient $t_1, t_2 \in [0, 1]$ avec $t_1 < t_2$. Alors

$$g'(t_2) - g'(t_1) = \langle \nabla f(x + t_2(y - x)) - \nabla f(x + t_1(y - x)), y - x \rangle$$

$$= \langle \nabla f(x + t_2(y - x)) - \nabla f(x + t_1(y - x)), (t_2 - t_1)(y - x) \rangle > \frac{1}{t_2 - t_1}.$$

Par hypothèse 3., le dernier terme de l'égalité précédente est positif, ce qui montre que la fonction g' est une fonction croissante. On déduit alors que g est une fonction convexe

sur $[0,1]$, ce qui nous donne pour tout $t \in [0, 1]$

$$g(t \cdot 1 + (1 - t) \cdot 0) \leq tg(1) + (1 - t)g(0), \quad \forall t \in [0, 1].$$

C-à-d

$$f(ty + (1 - t)x) \leq tf(y) + (1 - t)f(x).$$

Donc f est convexe.

• On suppose ici que $f \in C^2(C)$.

\implies) Supposons que f est convexe et montrons (1.1).

Soit $h \in \mathbb{R}$ fixé, notons $g : \Omega \mapsto \mathbb{R}$ la fonction donnée par $g(x) = \langle \nabla f(x), h \rangle$, $\forall x \in \Omega$.

Nous avons en utilisant aussi la proposition 1.1.3

$$\langle \nabla^2 f(x)h, h \rangle = \langle \nabla g(x), h \rangle = \frac{\partial g}{\partial h} = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\langle \nabla f(x + th), h \rangle - \langle \nabla f(x), h \rangle}{t},$$

ce qui nous donne

$$\langle \nabla^2 f(x)h, h \rangle = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\langle \nabla f(x + th) - \nabla f(x), th \rangle}{t^2}.$$

Considérons maintenant $x, y \in C$ arbitraires et $h = y - x$.

Comme $x + t(y - x) \in C \quad \forall t \in [0, 1]$, de l'égalité précédente on déduit à l'aide de la monotonie de ∇f que $\langle \nabla^2 f(x)h, h \rangle \geq 0$, donc (1.1) est vérifiée.

\impliedby) Supposons maintenant que (1.1) est satisfaite et montrons que f est convexe. Soient $x, y \in C$ fixés arbitraires, et considérons la fonction $g_1 : \Omega \mapsto \mathbb{R}$ donnée par $g_1(z) = \langle \nabla f(z), x - y \rangle$, $\forall z \in \Omega$. Alors

$$\langle \nabla f(x) - \nabla f(y), x - y \rangle = g_1(x) - g_1(y) = \langle \nabla g_1(y + \theta(x - y)), x - y \rangle,$$

avec $\theta \in]0, 1[$ (on a utilisé la formule de Taylor-Maclaurin à l'ordre 1).

D'autre part, nous avons

$$\nabla g_1(z) = \nabla^2 f(z)(x - y),$$

ceci nous permet de déduire, en utilisant aussi (1.1)

$$\langle \nabla f(x) - \nabla f(y), x - y \rangle = \langle \nabla^2 f(y + \theta(x - y))(x - y), x - y \rangle \geq 0.$$

Ceci nous donne la monotonie de ∇f d'où la convexité de f . ■

1.4 Extremums d'une fonction

Définition 1.4.1. *soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, on dit que f admet*

1. *Un minimum global au point $x^* \in \mathbb{R}^n$ si*

$$\forall x \in \mathbb{R}^n, f(x^*) \leq f(x).$$

2. *Un maximum global au point $x^* \in \mathbb{R}^n$ si*

$$\forall x \in \mathbb{R}^n, f(x^*) \geq f(x).$$

3. *Un minimum global strict au point x^* si*

$$\forall x \in \mathbb{R}^n, f(x^*) < f(x), \text{ avec } x \neq x^*.$$

4. *Un maximum global strict au point x^* si*

$$\forall x \in \mathbb{R}^n, f(x^*) > f(x), \text{ avec } x \neq x^*.$$

5. *Un minimum local au point $x^* \in \mathbb{R}^n$ s'il existe $r > 0$ tel que*

$$\forall x \in B(x^*, r), f(x^*) \leq f(x).$$

6. *Un maximum local au point $x^* \in \mathbb{R}^n$ s'il existe $r > 0$ tel que*

$$\forall x \in B(x^*, r), f(x^*) \geq f(x).$$

1.5 Points critiques

Définition 1.5.1. *Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction différentiable. Tout vecteur $x \in \mathbb{R}^n$ tel que $\nabla f(x) = 0$ est appelé point critique de f .*

Proposition 1.5.1. *Soit $f : C \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction convexe, C un convexe de \mathbb{R}^n . Alors*

1. *Tout minimum local de f sur C est un minimum global.*
2. *Si f est strictement convexe, il y'a au plus un point de minimum global.*

Démonstration. 1. Supposons que f est convexe, soit x^* un point de min local de f sur C , c-à-d : $\forall x \in B(x^*, r), \exists r < 0, f(x^*) \leq f(x)$.

Supposons que x^* n'est pas un point de min global de f sur C , c-à-d

$$\exists y \in C : f(y) < f(x^*)$$

Soit : $y_t = ty + (1 - t)x^* \in C, 0 < t < 1$.

$y_t \in B(x^*, r)$ si $\|y_t - x^*\| < r \iff t < \frac{r}{\|y - x^*\|}$. On choisit t tel que

$$0 < t < \frac{r}{\|y - x^*\|}.$$

On a alors

$$f(x^*) \leq f(y_t) = f(ty + (1 - t)x^*).$$

Comme f est convexe

$$f(x^*) \leq tf(y) + (1 - t)f(x^*),$$

d'où

$$t(f(y) - f(x^*)) \geq 0.$$

Donc

$$f(y) \geq f(x^*),$$

contradiction avec l'hypothèse et par conséquent x^* est un point de min global de f .

2. Supposons que f est strictement convexe.

Soient x_1, x_2 deux points de min de f , alors

$$\min_{x \in C} f(x) = f(x_1) = f(x_2).$$

On a

$$f\left(\frac{x_1 + x_2}{2}\right) \geq f(x_1),$$

mais de la convexité de f

$$\begin{aligned} f\left(\frac{x_1 + x_2}{2}\right) &\leq \frac{1}{2}f(x_1) + \frac{1}{2}f(x_2) \\ &= f(x_1). \end{aligned}$$

Contradiction donc $x_1 = x_2$. ■

1.6 Résultat d'existence et d'unicité

Avant de décrire les résultats d'existence et d'unicité, on donne les définitions suivantes.

Définition 1.6.1. (*Fonction coercive*) Une fonction $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ est appelée coercive si

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

Définition 1.6.2. (*Fonction elliptique*) Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, avec $f \in C^1$. On dit que f est une fonction elliptique de constante $\alpha > 0$ si

$$\forall x, y \in \mathbb{R}^n : \langle \nabla f(x) - \nabla f(y), x - y \rangle \geq \alpha \|x - y\|^2.$$

Théorème 1.6.1. (*Existence*) Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction continue et coercive, alors il existe $x^* \in \mathbb{R}^n$ tel que

$$f(x^*) \leq f(x), \quad \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

Théorème 1.6.2. (*Unicité*) Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction strictement convexe, alors il existe au plus $x^* \in \mathbb{R}^n$ tel que : $f(x^*) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$.

Démonstration. Supposons qu'il existe $x_1^*, x_2^* \in \mathbb{R}^n$ tels que $f(x_1^*) = f(x_2^*) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$. Supposons que $x_1^* \neq x_2^*$, et comme f est strictement convexe, on a

$$f\left(\frac{1}{2}x_1^* + \frac{1}{2}x_2^*\right) < \frac{1}{2}f(x_1^*) + \frac{1}{2}f(x_2^*) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x).$$

Ce qui est impossible, donc $x_1^* = x_2^*$. ■

Théorème 1.6.3. (*Existence et unicité*) Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, vérifiant

1. f continue.
2. f coercive.
3. f strictement convexe.

Alors, il existe un unique $x^* \in \mathbb{R}^n$, tel que $f(x^*) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$.

Théorème 1.6.4. Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ de classe C^1 . Supposons qu'il existe $\alpha > 0$ tel que

$$\forall x, y \in \mathbb{R}^n : \langle \nabla f(x) - \nabla f(y), x - y \rangle \geq \alpha \|x - y\|^2.$$

Alors f est strictement convexe et coercive, en particulier le problème admet une solution unique.

1.7 Condition d'optimalité

1.7.1 Condition nécessaire d'optimalité

Théorème 1.7.1. Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ et soit x^* un point de min local de f i.e., $\exists r > 0$, $f(x^*) \leq f(x)$, $\forall x \in B(x^*, r)$.

1. Condition du premier ordre

- Si f est de classe C^1 sur un voisinage $B(x^*, r')$, $0 < r' < r$ de x^* , alors $\nabla f(x^*) = 0$.

2. Condition du deuxième ordre

- Si f est de classe C^2 sur un voisinage $B(x^*, r')$, $0 < r' < r$ de x^* , alors la hessienne $\nabla^2 f(x^*)$ est semi-définie positive .

Démonstration.

Condition du premier ordre

Supposons par contradiction $\nabla f(x^*) \neq 0$. Définissons le vecteur $P = -\nabla f(x^*)$ et notons $P^T \nabla f(x^*) = -\|\nabla f(x^*)\|^2 < 0$. Comme ∇f est continue près de x^* , il existe un scalaire $T > 0$ tel que

$$P^T \nabla f(x^* + tP) < 0, \quad \forall t \in [0, T].$$

On a pour $\bar{t} \in]0, T]$ et d'après le développement de Taylor à l'ordre 1

$$f(x^* + \bar{t}P) = f(x^*) + \bar{t}P^T \nabla f(x^* + tP), \quad \forall t \in [0, \bar{t}].$$

Donc $f(x^* + \bar{t}P) < f(x^*)$, pour tout $\bar{t} \in [0, T]$.

Nous avons trouvé une direction le long de laquelle f décroît, donc x^* n'est pas un minimum local et on a une contradiction.

Condition du deuxième ordre

Nous avons par la condition du premier ordre que $\nabla f(x^*) = 0$. Par l'absurde, supposons

que $\nabla f(x^*)^2$ n'est pas semi-définie positive. On peut alors choisir un vecteur P tel que

$$P^T \nabla^2 f(x^* + tP) P < 0, \quad \forall t \in [0, T].$$

En faisant un développement en série de Taylor autour de x^* , pour tout $\bar{t} \in [0, t]$ et $\forall t \in [0, \bar{t}]$

$$f(x^* + \bar{t}P) = f(x^*) + \bar{t}P^T \nabla f(x^*) + \frac{1}{2} \bar{t}^2 P^T \nabla^2 f(x^* + tP) P < f(x^*).$$

Nous avons trouvé une direction à partir de x^* de long de la quelle f est décroissante, et donc encore fois, x^* n'est pas un minimum local. ■

1.7.2 Condition suffisante d'optimalité

Théorème 1.7.2. Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, et soit $x^* \in \mathbb{R}^n$.

Supposons que f est de classe C^1 sur un voisinage $B(x^*, r)$ de x^* et que $\nabla f(x^*) = 0$.

Si de plus, on a l'une des conditions suivantes

- a) $\nabla^2 f(x^*)$ est définie positive.
- b) $\nabla^2 f(x^*)$ est semi-définie positive pour tout $x \in B(x^*, r)$,
alors x^* est un min local de f .

Démonstration. Comme la hessienne est continue est définie positive en x^* , on peut choisir un rayon $r > 0$ de sorte que $\nabla^2 f(x)$ reste définie positive pour tout x de la boule ouverte $B(z, r)$. En prenant tout vecteur P non nul avec $\|p\| < r$, nous avons $x^* + P \in B(z, r)$, et ainsi

$$\begin{aligned} f(x^* + P) &= f(x^*) + P^T \nabla f(x^*) + \frac{1}{2} P^T \nabla^2 f(z) P \\ &= f(x^*) + \frac{1}{2} P^T \nabla^2 f(z) P, \end{aligned}$$

où $z = x^* + tP$ pour un certain $t \in [0, 1]$, puisque $z \in B(z, r)$ on a $P^T \nabla^2 f(z) P \geq 0$, et donc $f(x^* + P) \geq f(x^*)$. Donc le résultat (x^* est un min local de f). ■

1.7.3 Condition nécessaire et suffisante

Théorème 1.7.3. Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction convexe de classe C^1 . Soit $\hat{x} \in \mathbb{R}^n$, alors x^* est un point de min globale de f ssi $\nabla f(x^*) = 0$.

Démonstration. Comme f est convexe, on a

$$f(x) \geq f(x^*) + (x - x^*)^T \nabla f(x^*), \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

• x^* est un minimum global de f sur \mathbb{R}^n , d'où

$$f(x) \geq f(x^*), \forall x \in \mathbb{R}^n$$

ce qui donne

$$(x - x^*)^T \nabla f(x^*) = 0, \forall x \in \mathbb{R}^n$$

alors

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

• $\nabla f(x^*) = 0$ alors $f(x) \geq f(x^*), \forall x \in \mathbb{R}^n$ donc x^* est un minimum global de f . ■

CHAPITRE 2

MÉTHODES DE RÉOLUTION

Ce chapitre est consacré à l'étude théorique des méthodes d'optimisation sans contraintes tels que les méthodes de Newton, du gradient, du gradient conjugué ainsi que la variante de Fletcher-Reeves.

Toutes ces méthodes sont basées sur la méthode dite Méthode de descente.

Principe générale des méthodes de descente

La méthode de descente ou méthode des directions de descente est une famille d'algorithmes d'optimisation différentiable (l'optimisation des fonctions à variables réelles différentiables), destinée à minimiser une fonction réelle différentiable définie sur \mathbb{R}^n .

Généralement, les méthodes de descente qui ont été proposé pour résoudre le problème $\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$, consistent à construire une suite $\{x_k\}_{k \geq 0}$ qui converge vers le minimum local x^* vérifiant la ou les conditions d'optimalité. Il convient de souligner que la plupart de ces algorithmes fonctionnent selon le schéma suivant

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

où ρ_k est le pas de déplacement et d_k est la direction de descente.

La méthode de descente est itératif et procède donc par améliorations successives. Au point courant, un déplacement est effectué le long d'une direction de descente d_k , de manière à faire décroître la fonction.

Le déplacement ρ_k le long de cette direction est déterminé par la technique de recherche linéaire.

Les méthodes de descente diffèrent par le choix de d_k et ρ_k .

1. Pour calculer d_k il existent plusieurs méthodes telles que Méthode du gradient, Méthode du gradient conjugué,...
2. Le pas ρ_k peut se déterminer de différentes façon à préciser par exemple la méthode de recherche linéaire exacte où inexacte comme la méthode d'Armijo Goldstein et Wolfe.

Algorithme de la méthode de descente

Étape 1 :(Initialisation) : $k = 0$, $x_0 \in \mathbb{R}^n$ et ϵ la précision donnée.

Étape 2 :(Itération) : Calculer

- La direction de descente d_k ,
- Un pas $\rho_k > 0$ assez petit tel que la fonction f décroît suffisamment,
- $x_{k+1} = x_k + \rho_k d_k$.

Étape 3 :(Critère d'arrêt) Si : $\|\nabla f(x_k)\| < \epsilon$. Stop

$$x^* = x_{k+1}.$$

Sinon : $k = k + 1$ et retourner à l'étape 2.

2.1 Méthode de Newton

La méthode de Newton en optimisation est une application directe de l'algorithme de Newton pour la résolution d'équation du type : $f(x) = 0$. En optimisation sans contraintes, l'algorithme de Newton cherche les solutions de l'équation

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

autrement dit, les points critiques de la fonction f .

Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction deux fois différentiable, en utilisant le développement de Taylor d'ordre 2 de la fonction f au voisinage de x_k , on obtient

$$f(x) = f(x_k) + \nabla f(x)^T (x - x_k) + \frac{1}{2} (x - x_k)^T \nabla^2 f(x_k) (x - x_k) + o(\|x - x_k\|^2).$$

On pose

$$q(x) = f(x_k) + \nabla f(x_k)^T(x - x_k) + \frac{1}{2}(x - x_k)^T \nabla^2 f(x_k)(x - x_k),$$

$$\nabla q(x) = \nabla f(x_k) + \nabla^2 f(x_k)(x - x_k).$$

Supposons que x_{k+1} est un point de minimum de q , alors $\nabla q(x_{k+1}) = 0$,
c-à-d.

$$\nabla f(x_k) + \nabla^2 f(x_k)(x_{k+1} - x_k) = 0,$$

d'où

$$\nabla^2 f(x_k)(x_{k+1} - x_k) = -\nabla f(x_k),$$

ce qui donne

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

donc

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

avec

$$d_k = -[\nabla^2 f(x_k)]^{-1} \nabla f(x_k),$$

alors

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

2.1.1 Algorithme de Newton

Étape 1 : (Initialisation) : $k = 0$ et choisi x_0 .

Étape 2 : (Itération) : $x_{k+1} = x_k - [\nabla^2 f(x_k)]^{-1} \nabla f(x_k)$.

Étape 3 : (Critère d'arrêt) : Si : $\|\nabla f(x_{k+1})\| < \epsilon$. Stop

$$x^* = x_{k+1}.$$

Sinon : $k = k + 1$, aller à l'étape 02.

Exemple 2.1.1. Soit f la fonction définie sur \mathbb{R}^2 par

$$f(y, z) = (y - 2)^4 + (y - 2)^2 z^2 + (y + 1)^2,$$

$$\nabla f(y, z) = \begin{pmatrix} 4(y - 2)^3 + 2(y - 2)x_2^2 + 2(y + 1) \\ 2(y - 2)^2 z \end{pmatrix},$$

$$\nabla^2 f(y, z) = \begin{pmatrix} 12(y-2)^2 + 2z^2 + 2 & 4(y-2)z \\ 4(y-2)z & 2(y-2)^2 \end{pmatrix},$$

et

$$x_0 = (1, 1)^t.$$

En appliquant l'algorithme de Newton, on trouve

- $k = 0$

$$\begin{aligned} x_1 &= x_0 - [\nabla^2 f(x_0)]^{-1} \nabla f(x_0) \\ &= \begin{pmatrix} 0.7500 \\ -0.5000 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

et

$$f(x_0) = 6.$$

- $k = 1$

$$\begin{aligned} x_2 &= x_1 - [\nabla^2 f(x_1)]^{-1} \nabla f(x_1) \\ &= \begin{pmatrix} 0,9416 \\ -0,1532 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

et

$$f(x_1) = 5.8945.$$

- $k = 2$

$$\begin{aligned} x_3 &= x_2 - [\nabla^2 f(x_2)]^{-1} \nabla f(x_2) \\ &= \begin{pmatrix} 0.9945 \\ -0,0153 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

et

$$f(x_2) = 5.0510,$$

Avantages et inconvénients

- ☺ Si le point x_0 est assez proche de la solution optimale x^* tel que $\nabla^2 f(x^*)$ soit définie positive, alors l'algorithme de Newton converge toujours.
- ☹ Les difficultés et le coût de calcul de la hessienne $\nabla^2 f(x_k)$: l'expression analytique des dérivées secondes est rarement disponible dans les applications.
- ☹ Le coût de résolution du système linéaire $\nabla^2 f(x_k)(x_{k+1} - x_k) = \nabla f(x_k)$.
- ☹ L'absence de convergence si le premier itéré est trop loin de la solution, ou si la hessienne est singulière.
- ☹ Pas de distinction entre minima, maxima et points stationnaires.

2.2 Méthode du gradient

La méthode du gradient fait partie des classes de méthodes de descente.

Considérons un point de départ x_0 et cherchons à minimiser une fonction f . Puisque l'on veut atteindre x^* , nous cherchons à avoir : $f(x_1) < f(x_0)$. Une forme particulièrement simple est de chercher x_1 tel que le vecteur $x_1 - x_0$ soit colinéaire à une direction de descente $d_0 \neq 0$. Nous le noterons : $x_1 - x_0 = \rho_0 d_1$, où ρ_0 est le pas de déplacement de la méthode. On peut alors itérer de cette manière en se donnant x_k , d_k et ρ_k pour atteindre x_{k+1} par

$$\begin{cases} \text{Choisir } x_0. \\ \text{Calculer } x_{k+1} = x_k + \rho_k d_k, \end{cases}$$

avec $d_k \in \mathbb{R}^n$ est la direction de descente et $\rho_k > 0$ est le pas de déplacement.

Rappelons que le développement de Taylor de f de premier ordre, donne au voisinage de x_{k+1} .

$$\begin{aligned} f(x_{k+1}) &= f(x_k + \rho_k d_k) \\ &= f(x_k) + \rho_k \nabla f(x_k) d_k + o(\rho_k d_k) \\ &\simeq f(x_k) + \rho_k \nabla f(x_k) d_k. \end{aligned}$$

Comme d_k est une direction de descente stricte alors $f(x_{k+1}) < f(x_k)$, on obtient $\rho_k d_k \nabla f(x_k) < 0$ avec $\rho_k > 0$, on peut choisir $d_k = -\nabla f(x_k)$ pour que $\rho_k d_k \nabla f(x_k) < 0$.

Théorème 2.2.1. Soit f une fonction de classe C^1 de \mathbb{R}^n dans \mathbb{R} , x^* est un minimum de

f , on suppose que

1. f est elliptique c-à-d

$$\forall x, y \in \mathbb{R}^n : \langle \nabla f(y) - \nabla f(x), y - x \rangle \geq \alpha \|y - x\|^2.$$

2. L'application ∇f est lipschitzienne c-à-d.

$$\forall x, y \in \mathbb{R}^n : \|\nabla f(y) - \nabla f(x)\| \leq M \|y - x\|.$$

Supposons que la suite $(\rho_n)_{n \in \mathbb{N}}$ satisfait la propriété suivante

$$\text{Il existe } a_1, a_2 \text{ avec } 0 < a_1 < a_2 < \frac{2\alpha}{M^2} \text{ tel que } a_1 \leq \rho_n \leq a_2, \forall n \in \mathbb{N}.$$

Alors la suite $\{x_n\}_{n \geq 0}$ converge vers l'unique point de min de f (soit x^* ce point) et la convergence est géométrique i.e.,

$$\exists 0 \leq \beta < 1 : \|x_n - x^*\| \leq \beta^n \|x_0 - x^*\|, \forall n \in \mathbb{N}.$$

Démonstration. L'hypothèse d'ellipticité assure que : $\exists x^* \in \mathbb{R}^n$ tel que $f(x^*) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$.

Ce point vérifie nécessairement $\nabla f(x^*) = 0$.

Soit $n \in \mathbb{N}$, on a

$$\begin{aligned} x_{n+1} - x^* &= x_n - \rho_n \nabla f(x_n) - x^* \\ &= x_n - x^* - \rho_n (\nabla f(x_n) - \nabla f(x^*)). \end{aligned}$$

D'où

$$\|x_{n+1} - x^*\|^2 = \|x_n - x^*\|^2 + \rho_n^2 \|\nabla f(x_n) - \nabla f(x^*)\|^2 - 2\rho_n \langle x_n - x^*, \nabla f(x_n) - \nabla f(x^*) \rangle.$$

Donc tenant compte, des hypothèses f elliptique et ∇f lipschitzienne, on obtient

$$\begin{aligned} \|x_{n+1} - x^*\|^2 &\leq \|x_n - x^*\|^2 + \rho_n^2 M^2 \|x_n - x^*\|^2 - 2\rho_n \alpha \|x_n - x^*\|^2 \\ &\leq \|x_n - x^*\|^2 (M^2 \rho_n^2 - 2\alpha \rho_n + 1). \end{aligned}$$

Soit la fonction ϕ définie par

$$\begin{aligned}\phi : \mathbb{R} &\longrightarrow \mathbb{R} \\ \rho &\longrightarrow \phi(\rho) = M^2\rho^2 - 2\alpha\rho + 1,\end{aligned}$$

on a

$$\phi'(\rho) = 0 \text{ ssi } \rho = \frac{\alpha}{M^2}.$$

Donc

ρ	$-\infty$	$\frac{\alpha}{M^2}$	$+\infty$
$\phi'(\rho)$		- 0 +	
$\phi(\rho)$	$-\infty$	$1 - \frac{\alpha^2}{M^2}$	$+\infty$

$\forall \rho \in [a_1, a_2]$ tel que $0 < a_1 < a_2 < \frac{2\alpha}{M^2}$, on a $1 - \frac{\alpha^2}{M^2} \leq \phi(\rho) \leq \max(\phi(a_1), \phi(a_2)) < 1$,

$$\begin{aligned}\|x_{n+1} - x^*\| &\leq \phi(\rho_n)\|x_n - x^*\|^2, \\ &\leq \gamma\|x_n - x^*\|^2,\end{aligned}$$

où $\gamma = (0, \max(\phi(a_1), \phi(a_2))) \geq 0$,

d'où

$$\|x_{n+1} - x^*\| \leq \sqrt{\gamma}\|x_n - x^*\|.$$

Posons $\beta = \sqrt{\gamma}$, alors

$$0 \leq \beta < 1,$$

et on a

$$\|x_{n+1} - x^*\| \leq \beta\|x_n - x^*\| \leq \beta^2\|x_{n-1} - x^*\| \leq \dots \leq \beta^{n+1}\|x_0 - x^*\|,$$

avec β^n est une suite géométrique de raison $0 \leq \beta < 1$, donc $\lim_{n \rightarrow +\infty} \beta^n = 0$. Ce qui donne

$\lim_{n \rightarrow +\infty} \|x_{k+1} - x^*\| = 0$, d'où

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} x_{n+1} = x^*.$$



2.2.1 Algorithme du gradient

Étape 1 : (Initialisation) : $k = 0$ et choisi x_0 .

Étape 2 : (Itération) : $x_{k+1} = x_k - \rho_k \nabla f(x_k)$.

Étape 3 : (Critère d'arrêt) : Si : $\|\nabla f(x_k)\| < \epsilon$. Stop

$$x^* = x_{k+1}.$$

Sinon : $k = k + 1$, aller à l'étape 02.

2.2.2 Méthode du gradient à pas fixe

On dit que la méthode du gradient est à pas fixe ou constant si ρ_k est constant (indépendant de k).

Alors la méthode du gradient à pas fixe est définie par

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Choisir } x_0. \\ \text{Calculer } x_{k+1} = x_k + \rho d_k, \end{array} \right.$$

où $\rho > 0$, $d_k = -\nabla f(x_k)$.

2.2.3 Méthode du gradient à pas optimal

Le calcul du pas de déplacement, joue un rôle important dans la vitesse de convergence, il s'avère que plus ρ est grand plus la convergence est plus rapide. Pour cela plusieurs chercheurs suggèrent d'utiliser des pas variables moyennant les méthodes de recherche linéaire, il s'agit de minimiser la fonction unidimensionnelle

$$\phi(\rho) = \min_{\rho > 0} f(x_k + \rho d_k).$$

Les méthodes de type recherche linéaire les plus connues sont celles de Goldstein Armijo, Fibonacci,...

Inconvénients de la méthode de gradient

L'algorithme du gradient peut rencontrer un certain nombre de problèmes, en particulier celui de la convergence lorsque le conditionnement de la matrice hessienne est élevé.

2.3 Méthode du gradient conjugué

2.3.1 Cas quadratique

Avant de décrire la méthode du gradient conjugué, on donne les définitions suivantes.

Définition 2.3.1. (*Conjugaison*) Soit A une matrice symétrique ($n \times n$), définie positive, on dit que deux vecteurs x et $y \in \mathbb{R}^n$ sont A -conjugués (où conjugués par rapport à A) s'il vérifient

$$x^T A y = 0.$$

Définition 2.3.2. Soient $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ est une matrice symétrique est définie positive, et soit l'ensemble $\{d_0, d_1, \dots, d_k\}$ de directions non-nulles, ces directions sont dites A conjuguées si

$$d_i^T A d_j = 0 \quad \forall i, j \text{ tel que } i \neq j.$$

La méthode du gradient conjugué est une méthode permettant de résoudre un problème d'optimisation quadratique ou quelconque. Elles reposent sur le concept des directions conjuguées parce que les gradients successifs sont orthogonaux entre eux et aux directions précédentes. Considérons le problème quadratique sans contraintes suivant

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) = \frac{1}{2} x^T A x + b^T x + c,$$

où $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ est symétrique et définie positive, $b \in \mathbb{R}^n$, $c \in \mathbb{R}$.

On peut considérer la méthode du gradient conjugué comme une méthode de descente à pas optimal.

Description de la méthode

La méthode consiste à minimiser f à partir d'un point x_0 , suivant n directions : d_0, d_1, \dots, d_{n-1} , mutuellement conjuguées par rapport à A .

1. La première idée fondamentale de l'algorithme du gradient conjugué, consiste à choisir chaque direction de descente conjuguée à la direction de descente précédente par rapport à A .
2. La seconde idée fondamentale consiste à chercher d_{k+1} sous forme d'une combinaison linéaire de d_n et du gradient au point x_{k+1} , soit

$$d_{k+1} = -\nabla f(x_{k+1}) + \beta_k d_k, \quad (2.1)$$

où β_k étant choisie de telle sorte, que les directions successives soient conjuguées par rapport à A .

3. On construit la suite

$$x_{k+1} = x_k + \rho_k d_k, \quad (2.2)$$

avec

$$\rho_k = \min_{\rho > 0} f(x_k + \rho d_k). \quad (2.3)$$

Calcul du pas de déplacement

Pour résoudre le problème (2.3) précédent, on peut utiliser l'une des méthodes de recherche linéaire dans le cas des problèmes quelconques, par exemple de Wolfe. Dans le cas quadratique, il existe d'autres procédures pour le calculer. Il s'agit d'utiliser la condition d'optimalité sur ρ_k comme suit

i.e. ;

ρ_k optimal implique que $\langle \nabla f(x_k + \rho_k d_k), d_k \rangle = 0$,

alors

$$\langle Ax_k + b, d_k \rangle + \rho_k \langle Ad_k, d_k \rangle = 0,$$

on obtient

$$\langle \nabla f(x_k), d_k \rangle + \rho_k \langle Ad_k, d_k \rangle = 0,$$

d'où

$$\rho_k = -\frac{\langle \nabla f(x_k), d_k \rangle}{\langle Ad_k, d_k \rangle}.$$

Calcul du coefficient β_k

Les coefficients β_k soit choisi de sorte que d_k soit conjuguée avec toutes les directions précédentes. En d'autres termes, on doit avoir $d_{k+1}^T Ad_k = 0$.

Ce qui est équivalent à

$$\langle -\nabla f(x_{k+1}) + \beta_k d_k^T, Ad_k \rangle = 0,$$

alors

$$-\nabla f(x_{k+1})Ad_k + \beta_k d_k^T Ad_k = 0,$$

donc

$$\beta_k = \frac{\nabla^T f(x_{k+1})Ad_k}{d_k^T Ad_k}.$$

2.3.2 Algorithme du gradient conjugué

Étape 1 (Initialisation) : $k = 0$, $d_0 = -\nabla f(x_0)$.

Étape 2 (Itération) : Calculer

- $\rho_k = -\frac{d_k^T \nabla f(x_k)}{d_k^T Ad_k}$,

- $x_{k+1} = x_k + \rho_k d_k$.

- $\beta_k = \frac{\nabla^T f(x_{k+1})Ad_k}{d_k^T Ad_k}$,

- $d_{k+1} = -\nabla f(x_{k+1}) + \beta_k d_k$,

Étape 3 (Critère d'arrêt) : Si : $\|\nabla f(x_k)\| < \epsilon$. Stop

$$x^* = x_{k+1}.$$

Sinon : $k = k + 1$, aller à l'étape 02.

Théorème 2.3.1. *Soit k une itération quelconque de l'algorithme où l'optimum de $f(x)$ n'est pas encore atteint (c-à-d. $\nabla f(x_k) \neq 0, i = 1, \dots, k$) on a*

1.

$$\rho_k = \frac{\langle g_k, g_k \rangle}{\langle Ad_k, d_k \rangle}. \quad (2.4)$$

2.

$$\beta_k = \frac{\langle g_{k+1} - g_k, g_{k+1} \rangle}{\langle g_k, g_k \rangle} \quad (2.5)$$

$$= \frac{\langle g_{k+1}, g_{k+1} \rangle}{\langle g_k, g_k \rangle}. \quad (2.6)$$

Avec $g_k = \nabla f(x_k)$.

3. *Les directions d_0, d_1, \dots, d_{k+1} engendrées par l'algorithme sont mutuellement conjuguées.*

Démonstration. Montrons d'abord les relations (2.4) et (2.5).

D'après la relation (2.1) on a

$$\begin{aligned} \langle g_k, d_k \rangle &= \langle g_k, -g_k + \beta_{k-1}d_{k-1} \rangle \\ &= -\langle g_k, g_k \rangle + \beta_{k-1}\langle g_k, d_{k-1} \rangle. \end{aligned}$$

D'où $\langle g_k, d_k \rangle = -\langle g_k, g_k \rangle$, ce qui donne

$$\rho_k = \frac{\langle g_k, g_k \rangle}{\langle Ad_k, d_k \rangle}. \quad (2.7)$$

D'autre part on a

$$\begin{aligned} \langle g_{k+1} - g_k, g_{k+1} \rangle &= \langle \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k), g_{k+1} \rangle \\ &= \langle (Ax_{k+1} + b) - (Ax_k + b), g_{k+1} \rangle \\ &= \langle A(\rho_k d_k), g_{k+1} \rangle \\ &= \rho_k \langle Ad_k, g_{k+1} \rangle. \end{aligned}$$

En remplaçant ρ_k dans l'égalité précédente, on obtient

$$\begin{aligned} &= \frac{\langle g_k, g_k \rangle}{\langle Ad_k, d_k \rangle} \times \frac{\langle Ad_k, g_{k+1} \rangle}{\langle g_k, g_k \rangle} \\ &= \frac{\langle Ad_k, g_{k+1} \rangle}{\langle Ad_k, d_k \rangle} = \beta_k \end{aligned}$$

D'où la première identité de (2.5). Reste à vérifier la deuxième identité.

Il suffit de montrer que $\langle g_{k+1}, g_k \rangle = 0$. On a

$$\begin{aligned} \langle g_{k+1}, g_k \rangle &= \langle g_{k+1}, -d_k + \beta_{k-1}d_{k-1} \rangle = -\langle g_{k+1}, d_k \rangle + \beta_{k-1}\langle g_{k+1}, d_{k-1} \rangle \\ \langle g_{k+1}, g_k \rangle &= \langle \nabla f(x_{k+1}), d_k \rangle = 0 \quad (\rho_k \text{ est optimal}) \\ \langle g_{k+1}, d_{k-1} \rangle &= \langle Ax_{k+1} - b, d_{k-1} \rangle \\ &= \langle A(x_k + \rho_k d_k) - b, d_{k-1} \rangle \\ &= \langle \nabla f(x_k), d_{k-1} \rangle + \rho_k \langle Ad_k, d_{k-1} \rangle \\ &= 0. \end{aligned}$$

D'où

$$\langle g_{k+1}, g_k \rangle = 0.$$

Montrons par récurrence que les vecteurs d_0, d_1, \dots, d_k sont A-conjugués.

• Pour $k = 1$ on a

$$\begin{aligned} \langle Ad_0, d_1 \rangle &= \langle Ad_0, -g_1 + \beta_0 d_0 \rangle \\ &= \langle Ad_0, -g_1 \rangle + \frac{\langle Ad_0, g_1 \rangle}{\langle Ad_0, d_0 \rangle} \langle Ad_0, d_0 \rangle \\ &= 0. \end{aligned}$$

Supposons que d_0, d_1, \dots, d_k sont A-conjugués et montrons que d_0, d_1, \dots, d_{k+1} sont A-conjugués. C-à-d. il suffit de montrer que $\langle d_{k+1}, Ad_i \rangle = 0, \forall i = 0, \dots, k$.

• Pour $i = k$

$$\begin{aligned} \langle d_{k+1}, Ad_k \rangle &= \langle -g_{k+1} + \beta_k d_k, Ad_k \rangle \\ &= \langle -g_{k+1}, Ad_k \rangle + \beta_k \langle d_k, Ad_k \rangle \\ &= -\langle g_{k+1}, Ad_k \rangle + \langle Ad_k, g_{k+1} \rangle \\ &= 0. \end{aligned}$$

- Pour $i < k$

$$\begin{aligned}\langle d_{k+1}, Ad_i \rangle &= \langle -g_{k+1}, Ad_i \rangle + \beta_k \langle d_k, Ad_i \rangle \\ &= -\langle g_{k+1}, Ad_i \rangle.\end{aligned}$$

Montrons que $\langle g_{k+1}, Ad_j \rangle = 0$, $\forall j = 0, \dots, k$, on a besoin d'abord de montrer que $\langle g_{k+1}, d_j \rangle = 0$, $\forall j = 0, \dots, k$.

- Pour $j < k$

$$\begin{aligned}\langle g_{k+1}, d_j \rangle &= \langle Ax_{k+1} - b, d_j \rangle = \langle \nabla f(x_k), d_j \rangle + \rho_k \langle Ad_k, d_j \rangle \\ &= \langle \nabla f(x_k), d_j \rangle\end{aligned}$$

Alors $\langle g_{k+1}, d_j \rangle = 0$, $\forall j = 0, \dots, k$.

D'après (2.2) on obtient

$$\begin{aligned}\langle g_{k+1}, Ad_i \rangle &= \frac{1}{\rho_i} \langle g_{k+1}, A(x_{i+1} - x_i) \rangle \\ &= \frac{1}{\rho_i} \langle g_{k+1}, (Ax_{i+1} - b) - (Ax_i - b) \rangle \\ &= \frac{1}{\rho_i} \langle g_{k+1}, g_{i+1} - g_i \rangle.\end{aligned}$$

Avec (2.1) on obtient

$$\begin{aligned}\langle g_{k+1}, Ad_i \rangle &= \frac{1}{\rho_i} \langle g_{k+1}, -d_{i+1} + \beta_i d_i + d_i - \beta_{i-1} d_{i-1} \rangle \\ &= \frac{1}{\rho_i} [\langle g_{k+1}, d_{i+1} \rangle - (\beta_{i+1}) \langle g_{k+1}, d_i \rangle + \beta_{i-1} \langle g_{k+1}, d_{i-1} \rangle]\end{aligned}$$

Par conséquent, on a montré par récurrence que les directions $\{d_0, \dots, d_k\}$ sont A-conjugués, ce qui assure la convergence de l'algorithme du gradient conjugué. ■

2.3.3 Cas quelconque

Cette partie présente les classes des méthodes du gradient conjugué dans le cas quelconque globalement convergentes pour les fonctions multivariées à valeurs réelles ré-

gulière non nécessairement convexes.

Nous nous intéressons à la minimisation des fonctions qui ne sont pas nécessairement quadratiques.

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x).$$

Les méthodes du gradient conjugué produisent une suite $\{x_k\}$, $k \geq 1$ de la forme

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k.$$

Le pas $\alpha_k \in \mathbb{R}$ étant déterminé par une méthode de recherche linéaire, la direction d_k est définie par la forme de récurrence suivante

$$d_k = \begin{cases} -g_k & \text{si } k = 1, \\ -g_k + \beta_k d_{k-1} & \text{si } k \geq 2, \end{cases}$$

où $\beta_k \in \mathbb{R}$, $g_k = \nabla f(x_k)^T$.

Différentes méthodes correspondent à différents choix pour le scalaire β_k . On pose

$$y_k = g_{k+1} - g_k.$$

Le tableau suivant présente certains choix du paramètre β_k .

$$\beta_k^{AS} = \frac{g_{k+1}^T y_k}{d_k^T y_k} \quad (1952) \text{ proposé par Hestenes et Stiefel.}$$

$$\beta_k^{FR} = \frac{\|g_{k+1}\|^2}{\|g_k\|^2} \quad (1964) \text{ proposé par Feltcher et Reeves .}$$

$$\beta_k^D = \frac{g_{k+1}^T \nabla^2 f(x_k) d_k}{d_k^T \nabla^2 f(x_k) d_k} \quad (1967) \text{ proposée par Daniel .}$$

$$\beta_k^{PR} = \frac{g_{k+1}^T y_k}{\|g_k\|^2} \quad (1969) \text{ proposé par Polaket , Ribière et par Polyak .}$$

$$\beta_k^{CD} = \frac{\|g_{k+1}\|}{-d_k^T g_k d_k} \quad (1987) \text{ proposé par Fletcher .}$$

$$\beta_k^{CD} = \frac{g_{k+1}^T}{-d_k^T g_k} \quad (1991) \text{ proposé par Liu et Stourey.}$$

$$\beta_k^{DY} = \frac{\|g_{k+1}\|^2}{d_k^T y_k} \quad (1999) \text{ proposée par Dia et Yuan.}$$

$$\beta_k^N = \left(y_k - 2d_k \frac{\|y_k\|^2}{d_k y_k} \right) \frac{g_{k+1}}{d_k^T y_k} \quad (2005) \text{ proposée par Hager et Zhang.}$$

2.3.4 Algorithme de la méthode du gradient conjugué pour les fonctions quelconques

Étape 1 (Initialisation) : $k = 0$, x_0 le point d'initialisation, $g_0 = \nabla f(x_0)$, $d_0 = -\nabla f(x_0)$.

Étape 2 (Critère d'arrêt) : Si : $g_k = 0$. Stop

$$x^* = x_k.$$

Sinon : aller à l'étape 03.

Étape 3 (Itération) : Calculer

- ρ_k calculer par une méthode de recherche linéaire,
- $d_{k+1} = -g_{k+1} + \beta_{k+1}d_k$,
- β_k définir selon la méthode,
- $x_{k+1} = x_k + \rho_k d_k$,

poser $k = k + 1$ et aller à l'étape 2.

2.4 Variante de la méthodes du gradient conjugué "Fletcher-Reeves"

Après avoir évoqué les types des méthodes gradients conjugués, selon le choix du paramètre β_k , nous présentons maintenant une variante de la méthode du gradient conjugué "**Fletcher-Reeves**".

Rappelons que la méthode Fletcher-Reeves est une variante de la méthode du gradient conjugué où

$$x_{k+1} = x_k + \rho_k d_k, \quad (2.8)$$

avec

$$\begin{cases} d_1 = -g_1 & \text{si } k = 1, \\ d_{k+1} = -g_k + \beta_k d_{k-1} & \text{si } k \geq 2. \end{cases} \quad (2.9)$$

Et

$$\beta_k^{FR} = \frac{\|g_{k+1}\|^2}{\|g_k\|^2}.$$

2.4.1 Algorithme de la méthode de Flecher-Reeves

Étape 1 (Initialisation) : $k = 0$, x_0 le point d'initialisation, $g_0 = \nabla f(x_0)$, $d_0 = -\nabla f(x_0)$.

Étape 2 (Critère d'arrêt) : Si : $g_k = 0$. Stop

$$x^* = x_k.$$

Sinon : aller à l'étape 03.

Étape 3 (Itération) : Calculer

- ρ_k ,
- $\beta_k^{FR} = \frac{\|g_{k+1}\|^2}{\|g_k\|^2}$,
- $d_{k+1} = -g_{k+1} + \beta_{k+1}d_k$,
- $x_{k+1} = x_k + \rho_k d_k$,

poser $k = k + 1$ et aller à l'étape 2.

Calcul du pas de déplacement

Les méthodes de gradient conjugué dans le cas quelconque basé sur les méthodes de recherches linéaires pour le calcul du pas de déplacement, sont appelée les méthodes de recherche linéaire inexacte.

Dans ce qui suit nous présentons la méthode de recherche linéaire de Wolfe.

Méthode de recherche linéaire de Wolfe

les méthodes de recherche linéaire sont connues pas leurs utilisation pour calculer le pas de déplacement optimal ρ_k , elles consistent à minimiser la fonction unidimensionnelle

$$\psi_k(\rho_k) = \min_{\rho > 0} f(x_k + \rho d_k).$$

Définition 2.4.1. On dit que le pas ρ_k vérifie la recherche linéaire inexacte de

1. Wolfe faible si on a

$$f(x_k + \rho_k d_k) \leq f(x_k) + \alpha \rho_k g_k^T d_k,$$

où $0 < \alpha < 1$, et

$$g_{k+1}^T d_k \geq \sigma g_k^T d_k,$$

où $0 < \alpha < \sigma < 1$, et

2. Wolfe forte si on a

$$f(x_k + \rho_k d_k) \leq f(x_k) + \alpha \rho_k g_k^T d_k, \quad (2.10)$$

où $0 < \alpha < 1$.

$$|g_{k+1} d_k| \leq -\sigma g_k^T d_k, \quad (2.11)$$

où $0 < \alpha < \sigma < 1$.

2.4.2 Algorithme de wolfe

On pose $\phi_k(\rho_k) = f(x_k + \rho_k d_k)$,

Étape 1 (Initialisation) : Prendre $\rho_0 \in [0, 10^{99}]$, calculer $\phi_k(0), \phi'_k(0)$. Prendre $\alpha = 0.1$
(ou $\alpha = 0.1$ ou $\alpha = 0.001$ ou $\alpha = 0.0001$)

$\sigma = 0.9$ (ou σ plus petit encore).

Poser $a_0 = 0$, $b_0 = 10^{99}$, $k = 0$ et aller à **Étape 2**.

Étape 2 (test) : Calculer $\phi_k(\rho_k)$. Si $\phi_k(\rho_k) \leq \phi_k(0) + \alpha \rho_k \phi'_k(0)$, aller à **Étape 3**.

Sinon

Poser $a_{k+1} = a_k, b_{k+1} = \rho_k$ et aller à **Étape 4**.

Étape 3 (Test) Calculer $\phi'_k(\rho_k)$. Si $\phi'_k(\rho_k) \geq \sigma \phi'_k(0)$ où $(|\phi'_k(\rho_k)| \leq -\sigma \phi'_k(0))$. Stop.

Prendre $\rho = \rho_k$.

Sinon

Poser $\rho_{k+1} = \rho_k, b_{k+1} = b_k$ et aller à **Étape 4**.

Étape 4 (Calcul de ρ_{k+1})

$$\rho_{k+1} = \frac{a_{k+1} + b_{k+1}}{2}.$$

Poser $k = k + 1$ et allez à **Étape 2**.

Maintenant on donne le théorème de convergence de la variante de Fletcher-Reeves. Avant de donner le on a besoin des hypothèse et théorème suivantes.

hypothèse 1 On dit que f définie de \mathbb{R}^n dans \mathbb{R} vérifie la condition de Lipschitz si f est continûment différentiable dans un voisinage $V(\Lambda)$ tel que $\Lambda = \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leq f(x_1), x_1 \in \mathbb{R}^n \text{ point initial } \}$ et si $\nabla f(x)$ vérifié la condition de Lipschitz dans $V(\Lambda)$,

c-à-d, il existe une constante $M > 0$ telle que

$$\|g(x) - g(y)\| \leq M\|x - y\|, \forall x, y \in V(\Lambda).$$

hypothèse 2 L'ensemble $\Lambda = \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leq f(x_1)\}$ est borné, i.e., il existe une constante $\hat{\gamma} < \infty$ telle que

$$\|g(x)\| \leq \hat{\gamma} \quad \forall x \in \hat{\gamma}.$$

Théorème 2.4.1. (*Théorème de Zoutendijk*) *Considérons une méthode itérative quelconque générant une suite $\{x_k\}, k \geq 1$ de la forme*

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

d_k étant une direction de descente et ρ_k est le pas de déplacement, obtenu par la méthode de recherche linéaire inexacte de Wolfe. Supposons aussi que f vérifie la condition de Lipschitz, alors on a

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2} < \infty, \quad (2.12)$$

où

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\|g_k\|^4}{\|d_k\|^2} < \infty. \quad (2.13)$$

Remarque 2.4.1.

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2} < \infty,$$

et équivalent à

$$\sum_{k=0}^{\infty} \cos^2 \theta_k \|g_k\|^2 < \infty,$$

avec

$$\cos \theta_k = - \frac{\langle g_k, d_k \rangle}{\|g_k\| \|d_k\|},$$

où θ_k est l'angle que fait d_k avec g_k pour tout k , alors on a

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0.$$

Dans les différentes méthodes du gradient conjugué, on a

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0 \iff \lim_{k \rightarrow \infty} \inf \|g_k\| = 0.$$

Théorème 2.4.2. *Supposons que les conditions des hypothèses 1 et 2 soient vérifiées. Considérons une méthode du type (2.8) et (2.9), avec $\beta_k = \beta_k^{FR} = \frac{\|g_k\|^2}{\|g_{k-1}\|^2}$ et le pas ρ_k satisfaisant la règle de Wolfe (2.10) et (2.11) où $\sigma \in]0, \frac{1}{2}[$. Alors on a*

$$\frac{-1}{1-\sigma} \leq \frac{d_k^T g_k}{\|g_k\|^2} \leq \frac{2\sigma-1}{1-\sigma} \quad k \geq 1. \quad (2.14)$$

Démonstration. On démontre le Théorème 2.4.2 par récurrence

1. Pour $k = 1$

$$\frac{d_1^T g_1}{\|g_1\|^2} = \frac{-\|g_1\|^2}{\|g_1\|^2} = -1.$$

D'autre part $0 < \sigma < \frac{1}{2}$, ce qui implique

$$\begin{cases} \frac{-1}{1-\sigma} \leq -1, \\ \frac{2\sigma-1}{1-\sigma} \geq -1. \end{cases}$$

2. Supposons que (2.14) est satisfaite pour $k > 1$ et démontrons qu'elle le sera pour $k + 1$. Supposons que

$$\frac{-1}{1-\sigma} \leq \frac{d_k^T g_k}{\|g_k\|^2} \leq \frac{2\sigma-1}{1-\sigma}, \quad \forall k \geq 1. \quad (2.15)$$

On a

$$\frac{d_{k+1}^T g_{k+1}}{\|g_{k+1}\|^2} = \frac{(-g_{k+1} + \beta_{k+1} d_k)^T g_{k+1}}{\|g_{k+1}\|^2} = -1 + \frac{\beta_{k+1} d_k^T g_{k+1}}{\|g_{k+1}\|^2}.$$

D'autre part, on a

$$\beta_k^{FR} = \frac{\|g_k\|^2}{\|g_{k-1}\|^2},$$

alors

$$\frac{1}{\beta_{k+1}^{FR}} = \frac{\|g_k\|^2}{\|g_{k+1}\|^2},$$

d'où

$$\frac{d_{k+1}^T g_{k+1}}{\|g_{k+1}\|^2} = -1 + \frac{\beta_{k+1}}{\beta_{k+1}^{FR}} \frac{d_k^T g_{k+1}}{\|g_k\|^2}. \quad (2.16)$$

En utilisant la condition de la recherche linéaire (2.11), on aura

$$|g_{k+1}d_k| \leq -\sigma g_k^T d_k \text{ d'où } \sigma |\beta_{k+1}| d_k^T g_k \leq |\beta_{k+1}| d_k^T g_{k+1} \leq -\sigma |\beta_{k+1}| d_k^T g_k.$$

En remplaçant dans (2.16), on donne

$$-1 + \sigma \frac{|\beta_{k+1}| d_k^T g_k}{\beta_{k+1}^{FR} \|g_k\|^2} \leq \frac{d_{k+1}^T g_{k+1}}{\|g_{k+1}\|^2} \leq -1 - \sigma \frac{|\beta_{k+1}| d_k^T g_k}{\beta_{k+1}^{FR} \|g_k\|^2}.$$

De (2.15), on obtient

$$-1 - \frac{|\beta_{k+1}| \sigma}{\beta_{k+1}^{FR} (1 - \sigma)} \leq \frac{d_{k+1}^T g_{k+1}}{\|g_{k+1}\|^2} \leq -1 + \frac{|\beta_{k+1}| \sigma}{\beta_{k+1}^{FR} (1 - \sigma)},$$

et de (2.16), on a

$$\frac{-\sigma}{1 - \sigma} \leq \frac{|\beta_{k+1}|}{\beta_{k+1}^{FR}} \leq 1.$$

Par conséquent on obtient le résultat

$$\frac{-1}{1 - \sigma} \leq \frac{d_{k+1}^T g_{k+1}}{\|g_{k+1}\|^2} \leq \frac{2\sigma - 1}{1 - \sigma}.$$

■

Théorème 2.4.3. *Supposons que les conditions des hypothèse 1 et 2 vérifiées. Considérons une méthode du type (2.8) et (2.9), avec $\beta_k = \beta_k^{FR} = \frac{\|g_k\|^2}{\|g_{k-1}\|^2}$ vérifie aussi $|\beta_k| \leq \beta_k^{FR}$, et le pas ρ_k satisfaisant la règle de Wolfe (2.10) et (2.11) où $\sigma \in]0, \frac{1}{2}[$.*

Alors cette méthode est globalement convergente, dans le sens suivant

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \inf \|g_k\| = 0. \quad (2.17)$$

Démonstration. Comme les conditions du Théorème 2.4.2 sont satisfaites, alors on a

$$\frac{-1}{1 - \sigma} \leq \frac{d_k^T g_k}{\|g_k\|^2} \leq \frac{2\sigma - 1}{1 - \sigma},$$

implique

$$-\sigma d_{k-1}^T g_{k-1} \leq \frac{\sigma}{1 - \sigma} \|g_{k-1}\|^2.$$

D'autre part de (2.11)

$$|d_k^T g_{k+1}| \leq -\sigma d_k^T g_k,$$

implique

$$|d_{k-1}^T g_k| \leq -\sigma d_{k-1}^T g_{k-1},$$

d'où

$$|d_{k-1}^T g_k| \leq -\sigma d_{k-1}^T g_{k-1} \leq \frac{\sigma}{1-\sigma} \|g_{k-1}\|^2. \quad (2.18)$$

De (2.14) et (2.18)

$$\begin{aligned} \|d_k\|^2 &= \|g_k\|^2 - |2\beta_k d_{k-1}^T g_k| + \beta_k^2 \|d_{k-1}\|^2 \\ &\leq \|g_k\|^2 + 2|\beta_k| |d_{k-1}^T g_k| + \beta_k^2 \|d_{k-1}\|^2, \\ &\leq \left(\frac{1+\sigma}{1-\sigma}\right) \|g_k\|^2 + (\beta_k)^2 \|d_{k-1}\|^2. \end{aligned}$$

Posons $\hat{\sigma} = \left(\frac{1+\sigma}{1-\sigma}\right)$, et utiliser le condition $|\beta_k| \leq \beta_k^{FR}$ on aura

$$\begin{aligned} \|d_k\|^2 &\leq \hat{\sigma} \|g_k\|^2 + (\beta_k)^2 \|d_{k-1}\|^2, \\ &\leq \hat{\sigma} \|g_k\|^2 + (\beta_k)^2 [\hat{\sigma} \|g_{k-1}\|^2 + (\beta_{k-1})^2 \|d_{k-2}\|^2], \\ &\leq \hat{\sigma} \|g_k\|^4 \sum_{j=2}^k \|g_j\|^{-2} + \hat{\sigma} \|g_k\|^4 \|g_k\|^{-2} = \hat{\sigma} \|g_k\|^4 \sum_{j=1}^k \|g_j\|^{-2}. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Supposons que g_k est borné c-à-d

$$\|g_k\| \geq \gamma > 0, \quad \forall k \geq 1$$

implique

$$\|g_k\|^{-2} \leq \gamma^{-2}.$$

De (2.19) on a

$$\begin{aligned} \|d_k\|^2 &\leq \hat{\sigma} \|g_k\|^4 \sum_{j=1}^k \|g_j\|^{-2} \leq \hat{\sigma} \frac{\hat{\gamma}^4}{\gamma^2} \sum_{j=1}^k 1, \\ \|d_k\|^2 &\leq \hat{\sigma} \frac{\hat{\gamma}^4}{\gamma^2} k, \end{aligned}$$

d'où

$$\sum_{k \geq 1} \frac{1}{\|d_k\|} \geq \frac{\gamma^2}{\hat{\sigma}} \sum_{k \geq 1} \frac{1}{k} > \infty. \quad (2.20)$$

Ce qui veut dire que $\sum_{k \geq 1} \frac{1}{\|d_k\|}$ diverge.

D'autre part, puisque les conditions du Théorème 2.4.2, et du la Théorème 2.4.3 sont satisfaites, alors on a

$$\sum_{k \geq 1} \cos^2 \theta_k \|g_k\| < \infty,$$

et

$$c_1 \frac{\|g_k\|}{\|d_k\|} \leq \cos \theta_k \leq c_2 \frac{\|g_k\|}{\|d_k\|}.$$

D'où

$$\sum_{k \geq 1} c_1^2 \frac{\|g_k\|^2}{\|d_k\|^2} \|g_k\|^2 \leq \sum_{k \geq 1} \cos^2 \theta_k \|g_k\|^2 < \infty.$$

implique

$$\sum_{k \geq 1} \frac{\|g_k\|^4}{\|d_k\|^2} < \infty.$$

Ce qui donne

$$\sum_{k \geq 1} \frac{\hat{\gamma}^4}{\|d_k\|^2} < \infty.$$

Donc

$$\sum_{k \geq 1} \frac{1}{\|d_k\|^2} < \infty.$$

Ce qui contredit (2.20), d'où le résultat.

Donc

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \inf \|g_k\| = 0.$$

■

2.5 Méthode de relaxation

La méthode de relaxation permet de ramener un problème de minimisation dans \mathbb{R}^n à la résolution successive de n problèmes de minimisation dans \mathbb{R} (à chaque itération). On cherche à minimiser $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, posons $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$. Le principe de la méthode est le suivant : étant donné un itéré X_k de coordonnées $(x_1^k, x_2^k, \dots, x_n^k)$ on fixe toutes les composantes sauf la première et on minimise sur la première

$$\min_{x \in \mathbb{R}} f(x, x_2^k, x_3^k, \dots, x_n^k).$$

On obtient ainsi la première coordonnée de l'itéré suivant X_{k+1} que l'on note x_{k+1} , on peut pour effectuer cette minimisation dans \mathbb{R} , utiliser par exemple la méthode de Newton dans \mathbb{R} . On recommence en suite en fixant la première coordonnée à x_{k+1} et les $n - 2$ dernière comme précédemment. On minimise sur la deuxième coordonnée et ainsi de suite.

2.5.1 Algorithme de relaxation

Étape 1 (Initialisation) : $k = 0$ et choisi $x_0 \in \mathbb{R}^n$.

Étape 2 (Itération) : Pour i variant de 1 à n , on calcule la solution x_i^{k+1} de $\min f(x_1^{k+1}, x_2^{k+1}, \dots, x_{i-1}^{k+1}, x, x_{i+1}^{k+1}, \dots, x_n^k)$, $x \in \mathbb{R}$.

Étape 3 (Critère d'arrêt) : Si : $\|x_{k+1} - x_k\| < \epsilon$ stop,

Sinon : $k = k + 1$; aller à l'étape 02.

CHAPITRE 3

ÉTUDE NUMÉRIQUE DES MÉTHODES D'OPTIMISATION SANS CONTRAINTES

Dans ce chapitre, nous présentons une étude numérique sur quelques méthodes d'optimisation sans contraintes, sur différentes fonctions. Ces tests numériques sont effectués en langage Matlab 2007.

On désigne par

G.p.o : Gradient à pas optimal.

G.p.f : Gradient pas à fixé.

G.C : Gradient Conjugué.

Nbr : Le nombre d'itérations nécessaire pour obtenir la solution optimale.

temps : Le temps de calcul en secondes.

ϵ : La précision donnée.

3.1 Exemples

Exemple 3.1.1. Soit $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$,

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

Le point initial est $x_0 = (1, 1)$.

La solution optimale est $x^* = (2, 3)$.

Exemple 3.1.2. Soit $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$,

où $f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 - 2x_2 - x_1x_2$.

Le point initial est $x_0 = (3, 4)$.

La solution optimale est $x^* = (0.76, 1.33)$.

Exemple 3.1.3. Soit $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$,

où $f(x_1, x_2) = 2x_1^2 + 2x_2^2 - 2x_1 - 4x_2$.

Le point initial est $x_0 = (4, 6)$.

la solution optimale est $x^* = (1/2, 1)$, est la valeur de ρ dans le pas fixe est 0.25.

Exemple 3.1.4. Soit $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$,

où $f(x_1, x_2, x_3) = 3x_1^2 + 3x_2^2 + 3x_3^2 - 2x_1x_2 - 2x_1 - 10x_2$.

Le point initial est $x_0 = (0.5, 1.5, 0)$.

la solution optimale est $x^* = (1, 2, 0)$, est la valeur de ρ dans le pas fixe est 0.3.

Exemple 3.1.5. Soit $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$,

où $f(x_1, x_2) = 3x_1^2 + 3x_2^2 - 2x_1x_2 - x_1 - x_2$.

Le point initial est $x_0 = (0, 0)$.

la solution optimale est $x^* = (1/4, 1/4)$, est la valeur de ρ dans le pas fixe est 0.3.

Exemple 3.1.6. Soit $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$,

où $2x_1^2 + x_2^2 - x_1x_2 - 3x_1 - x_2 + 4$.

Le point initial est $x_0 = (0, 0)$.

La solution optimale est $x^* = (1, 1)$.

Exemple 3.1.7. Soit $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$,

où $2x_1^2 + x_2^2 - x_1x_2 + x_2 - x_1$.

Le point initial est $x_0 = (1, 1)$.

La solution optimale est $x^* = (1/7, -3/7)$.

Le tableau suivant résume les résultats obtenus pour les différents exemples

Exemples	Newton		G.p.f		G.p.o		G.C	
	Nbr	Temps	Nbr	Temps	Nbr	Temps	Nbr	Temps
Exemple.3.1.1	2	0.006078	2	0.014588	2	0.009008	2	0.005676
Exepmle.3.1.2	2	0.005401	22	0.011580	2	0.009444	2	0.004977
Exepmle.3.1.3	2	0.005742	2	0.007346	2	0.008592	2	0.006687
Exepmle.3.1.4	2	0.005635	11	0.009103	2	0.008448	2	0.006540
Exepmle.3.1.5	2	0.005673	10	0.008558	2	0.008088	2	0.006109

Dans le tableau suivant nous donnons une étude numérique comparative entre la méthode de Fletcher-Reeves et la méthode de Gradient conjugué.

Exemples	GC		GCFR	
	Nbr	Temps	Nbr	Temps
Exepmle.3.1.1	2	0.013509	13	0.003789
Example.3.1.6	42	0.022495	16	0.003903
Exepmle.3.1.7	70	0.019812	2	0.002407

Commentaires

Les résultats numériques que nous avons obtenu sur les exemples testés, montrent que toutes ces méthodes convergent vers la même solution optimale. La variante de Fletcher-Reeves est plus performante que la méthode du gradient conjugué exprimée par la réduction du temps de calcul et du nombre d'itérations.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] **X. Antione, P. Dreyfuss, Yannick**, *Introduction à l'optimisation. Aspects Théoriques et Algorithmes*, ENSMN-ENSEM 2, (2007).
- [2] **M. S. Bassarraa, H. D. Sherali, C. M. Shety**, *Nonlinear programming, Theory and Algorithmes*, Jhon Wiley and Sons, New York, second ed, (1993).
- [3] **M. Bierlair**, *Introduction à l'optimisation différentiable*, PPUR, (2006).
- [4] **P. Faure**, *Analyse Numérique Notes d'optimisation*, Collection X, Elipses, Paris, (1988).
- [5] **J. C. Gilbert, J. Nocedal**, *Global Convergence properties of conjugate gradient methods*. for optimisation. SIAM. J. Optimisation. Vol. 2.1 : 21-42, (1992).
- [6] **W. W. Hager, H. Zhang**. *A survey of nonlinear conjugate gradient methods*. Pacific. J. Optimisation Vol 2.1 : 35-58, (2006).
- [7] **J. Nocedal, S. J. Wright**, *Numerical Optimisation, Springe Series in Operations Research and Financial Engineering*, second ed, (2006).
- [8] **N. Rahali**, *Accélération de la convergence de quelque méthode d'optimisation sans contraintes*, Thèse de doctorat en science, SETIF1, (2021)
- [9] **R. T. Rockafellar**, *Convex Anglysis*, Princeton University Press, Princeton, New Jersey, (1970).
- [10] **P. Wolfe**. *Convergence condition for ascent method*, SIAM Rev. (1969).