IFT 3515
Fonctions à plusieurs variables
Optimisation sans contraintes

Fabian Bastin
DIRO
Université de Montréal

Préliminaires

Soit $Y \subseteq \mathcal{R}^n$ un ensemble ouvert et $f : Y \to \mathcal{R}$.

Notations :

1. norme euclidienne (norme 2) de $x \in \mathcal{R}^n$: $\|x\| = \sqrt{x^T x}$
2. $$\nabla_x f(x) = \begin{pmatrix} \frac{df(x)}{dx_1} \\ \frac{df(x)}{dx_2} \\ \vdots \\ \frac{df(x)}{dx_n} \end{pmatrix}$$

Définition (ensemble ouvert)

X est un ensemble ouvert si $\forall x \in X$, $\exists \epsilon > 0$ tel que $\mathcal{B}(x, \epsilon) = \{z \in \mathcal{R}^n \,|\, \|z - x\| < \epsilon\} \subseteq X$

Développement de Taylor

Si $f \in C^1$ sur Y, alors $\forall x, y \in Y$,

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

comme $y \to x$.

Note : si $y \neq x$, $h(y) = o(\|y - x\|)$ comme $y \to x$ signifie que

$$\lim_{y \to x} \frac{h(y)}{\|y - x\|} \to 0.$$

En d'autres termes, $h(y)$ converge “plus vite” vers 0 que $\|y - x\|$.

Le développement linéaire de f autour de x est

$$\tilde{f}(y) = f(x) + \nabla f(x)^T (y - x)$$

Développement de Taylor – version sans résidu

$\exists z \in \{t \in \mathcal{R}^n \,|\, t = \lambda x + (1-\lambda)y,\ \lambda \in [0,1]\}$ tel que

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

Dérivée directionnelle

La dérivée de f au point x suivant le vecteur h est, si elle existe, la dérivée en 0 de la fonction à une variable définie par
$t \to f(x + th)$, c'est-à-dire

$$D_h f(x) = \lim_{t \to 0} \frac{f(x + th) - f(x)}{t}$$

Lemme

Soit $f : Y \to \mathcal{R}$, où Y est un sous-ensemble ouvert de $\mathcal{R}^n$, $f \in C^1$, $x \in Y$ et $h \in \mathcal{R}^n$. Alors

$$D_h f(x) = \nabla f(x)^T h.$$

Démonstration.

Le développement de Taylor nous donne

$$f(x + th) = f(x) + \nabla f(x)^T th + o(\|th\|)$$

aussi pour $t \neq 0$,

$$\frac{f(x + th) - f(x)}{t} - \frac{o(\|th\|)}{t} = \nabla f(x)^T h$$

Le résultat suit en faisant tendre t vers 0. $\square$

Direction de descente

Définition (Direction réalisable)

Soient $X \subseteq \mathcal{R}^n$ et $f : X \to \mathcal{R} \in C^1$. Étant donné $x \in X$, $d \in \mathcal{R}^n$ est une direction réalisable en x s'il existe un scalaire $\alpha_{\max}$ tel que $x + \alpha d \in X$ pour tout $\alpha \in [0, \alpha_{\max}]$.

Lemme (Direction de descente)

Soient $X \subseteq \mathcal{R}^n$ et $f : X \to \mathcal{R} \in C^1$. Si $d \in \mathcal{R}^n$ est une direction réalisable en x et $\nabla f(x)^T d < 0$, alors $\exists \kappa > 0$ tel pour tout $\tau \in (0, \kappa]$

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

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

Preuve du lemme

Démonstration.
Puisque $D_d f(x) = \nabla f(x)^T d < 0$, il existe un scalaire $\kappa > 0$ tel que pour tout $\tau \neq 0$, $-\kappa \leq \tau \leq \kappa$,

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

Il suffit de restreindre τ à des valeurs strictement positives pour avoir

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

$\square$

Condition nécessaire d'optimalité

Théorème (Optimalité au premier ordre)

Soient $X \subseteq \mathcal{R}^n$ et $f : X \to \mathcal{R} \in C^1$. Si x^* est un minimum local de f sur X, alors pour toute direction $d \in \mathcal{R}^n$ qui est une direction réalisable en x^*, nous avons $\nabla f(x^*)^T d \geq 0$.

Démonstration.

Comme d est une direction réalisable, il existe $\alpha_{\max}$ tel que pour tout $\alpha \in [0, \alpha_{\max}]$, le point $x(\alpha) = x^* + \alpha d \in X$.
Définissions $g(\alpha) = f(x(\alpha))$, $0 \leq \alpha \leq \alpha_{\max}$. g a un minimum local en $\alpha = 0$, et en vertu du développement de Taylor autour de 0,

$$g(\alpha) - g(0) = g'(0)\alpha + o(\alpha).$$

Si $g'(0) < 0$, pour α suffisamment petit, $g(\alpha) < g(0)$, aussi 0 ne serait pas minimum local. $\square$

Condition nécessaire d'optimalité (suite)

Démonstration.

Dès lors, $g'(0) \geq 0$.

Or,

$$g'(\alpha) = \nabla f(x(\alpha))^T \frac{d}{d\alpha} x(\alpha) = \nabla f(x(\alpha))^T d.$$

Dès lors, $\nabla f(x^*)^T d \geq 0$. $\square$

Corollaire

Soient $X \subseteq \mathcal{R}^n$ un ensemble ouvert et $f : X \to \mathcal{R} \in C^1$. Si x^* est un minimum local de f sur X, alors $\nabla f(x^*) = 0$.

Condition nécessaire d'optimalité

Démonstration.
Du théorème précédent, $\forall\, d \in \mathcal{R}^n$, $\nabla f(x^*)^T d \geq 0$. □

Preuve alternative.
Par contradiction, supposons que x est un minimum local et que $\nabla f(x) \neq 0$. Considérons la direction $d = -\nabla f(x)$. Puisque X est ouvert, alors d est une direction réalisable en x, et

$$\nabla f(x)^T d = -\|\nabla f(x)\|^2 < 0,$$

puisque $\nabla f(x) \neq 0$. Dès lors, d est une direction de descente en x et par conséquent il est possible de déterminer un scalaire $\tau > 0$ tel que $x + \tau d \in \mathcal{B}(x, \epsilon)$ et $f(x + \tau d) < f(x)$, et donc x n'est pas un minimum local. □

Condition d'optimalité au deuxième ordre

Comme dans le cas unidimensionnel, les conditions au premier ordre sont rencontrées en un point stationnaire (minimum, maximum, point selle). Nous voulons donc avoir plus pour garantir qu'un point stationnaire est bien un minimum.

Soit $f : X \to \mathcal{R}$, avec $X \subseteq \mathcal{R}^n$ ouvert.

Définition (Hessien)

Si f est une fonction deux fois continûment dérivable en x, le hessien de f est la matrice des dérivées partielles d'ordre 2 :

$$\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} \frac{d^2 f(x)}{dx_1^2} & \frac{d^2 f(x)}{dx_1 dx_2} & \cdots & \frac{d^2 f(x)}{dx_1 dx_n} \\ \frac{d^2 f(x)}{dx_1 dx_2} & \frac{d^2 f(x)}{dx_n^2} & \cdots & \frac{d^2 f(x)}{dx_2 dx_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{d^2 f(x)}{dx_1 dx_n} & \frac{d^2 f(x)}{dx_2 dx_n} & \cdots & \frac{d^2 f(x)}{dx_n^2} \end{pmatrix}$$

Matrice (semi-)définie positive

Définition (Matrice semi-définie positive)

Une matrice $A \in \mathcal{R}^{n \times n}$ *est semi-définie positive si* $\forall x \in \mathcal{R}^n$, $x^T A x \geq 0$.

Définition (Matrice définie positive)

Une matrice $A \in \mathcal{R}^{n \times n}$ *est définie positive si* $\forall x \in \mathcal{R}^n$, $x \neq 0$, $x^T A x > 0$.

Définition (Matrice semi-définie négative)

Une matrice $A \in \mathcal{R}^{n \times n}$ *est semi-définie négative si* $\forall x \in \mathcal{R}^n$, $x^T A x \leq 0$.

Définition (Matrice définie négative)

Une matrice $A \in \mathcal{R}^{n \times n}$ *est définie négative si* $\forall x \in \mathcal{R}^n$, $x \neq 0$, $x^T A x < 0$.

Matrice (semi-)définie positive

Théorème

Une matrice A est semi-définie positive (définie positive) si et seulement si une des conditions suivantes tient

1. $\forall x \in \mathcal{R}^n$ *(et* $x \neq 0$*),* $x^T A x \geq 0$ *(*> 0*)*
2. *toutes les valeurs propres sont non-négatives (positives)*
3. *les déterminants de tous les mineurs principaux sont non-négatifs (positifs)*

Mineurs principaux

Considérons une matrice $A \in \mathcal{R}^{n \times n}$. B_i est le i^e mineur principal de A si B est une matrice de dimension $i \times i$, et $B(l, c) = A(l, c)$, $l = 1, \ldots, i$, $c = 1, \ldots, i$.

$$\begin{pmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \end{pmatrix}$$

Notations

Soit la matrice $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

- $A \succ 0$: A est définie positive.
- $A \succeq 0$: A est semi-définie positive.
- $A \prec 0$: A est définie négative.
- $A \preceq 0$: A est semi-définie négative.

Conditions nécessaires de deuxième ordre

Lemme

Soient $X \subseteq \mathcal{R}^n$ un ensemble ouvert et $f : X \to \mathcal{R} \in C^2$. Si $x \in X$ est un minimum local de f sur X, alors $\nabla f(x) = 0$ et $\nabla^2 f(x)$ est une matrice semi-definie positive.

Démonstration.

Nous avons déjà prouvé que $\nabla f(x) = 0$ si x est un minimum local. Concentrons-nous dès lors sur le caractère semi-défini positif. Le développement de Taylor au deuxième ordre donne

$$f(x + \tau d) = f(x) + \tau \nabla f(x)^T d + \frac{\tau^2}{2} d^T \nabla^2 f(x) d + o(\|\tau d\|^2)$$

Comme $\nabla f(x) = 0$, nous avons

$$f(x + \tau d) - f(x) = \tau^2 d^T \nabla^2 f(x) d + o(\|\tau d\|^2)$$

Conditions nécessaires de deuxième ordre

Démonstration.

Supposons par contradiction que $\nabla^2 f(x)$ n'est pas semi-définie positive, autrement dit $\exists y \in \mathcal{R}^n$ tel que $y^T \nabla^2 f(x) y < 0$.
Pour $\tau > 0$ suffisamment petit, $x + \tau y \in \mathcal{B}(x, \epsilon)$ et

$$\tau^2 y^T \nabla^2 f(x) y + o(\|\tau y\|^2) < 0$$

Dès lors,

$$f(x + \tau y) - f(x) < 0$$

et x n'est pas un minimum local.

□

Conditions non suffisantes

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

Exemple : $f(x, y) = x^3 + y^3$. Nous avons

$$\nabla f(x, y) = \begin{pmatrix} 3x^2 \\ 3y^2 \end{pmatrix} \qquad \nabla^2 f(x, y) = \begin{pmatrix} 6x & 0 \\ 0 & 6y \end{pmatrix}$$

En (0,0), la fonction, son gradient et la matrice hessienne s'annulent, et il est évident qu'une matrice carrée nulle est semi-définie positive.
Pour $\epsilon > 0$ suffisamment petit, $(-\epsilon/2, -\epsilon/2) \in \mathcal{B}(x, \epsilon)$ et $f(-\epsilon/2, -\epsilon/2) < 0$.

Conditions suffisantes de second ordre

Théorème

Soient $X \subseteq \mathcal{R}^n$ un ensemble ouvert et $f \in C^2$ sur X. Si $\nabla f(x^*) = 0$ et $\nabla^2 f(x^*)$ est une matrice definie positive, alors il existe un $\epsilon > 0$ suffisamment petit tel que $f(x^*) < f(x)$ pour tout $x \in \mathcal{B}(x^*, \epsilon)$.

Démonstration.

En utilisant le développement de Taylor à l'ordre 2

$$f(x^* + \tau d) = f(x^*) + \tau \nabla f(x^*)^T d + \frac{\tau^2}{2} d^T \nabla^2 f(x^*) d + o(\|\tau d\|^2),$$

nous pouvons écrire, puisque $\nabla f(x^*) = 0$,

$$f(x^* + \tau d) - f(x^*) = \frac{\tau^2}{2} d^T \nabla f(x^*) d + o(\|\tau d\|^2)$$

Conditions suffisantes de second ordre

Démonstration.

Si A est symétrique, il est possible de montrer que

$$\lambda_{\min} \leq \frac{d^T A d}{\|d\|^2} \leq \lambda_{\max}$$

où $\lambda_{\min}$ ($\lambda_{\max}$) est la plus petite (grande) valeur propre de A. On peut en effet effectuer la décomposition spectrale $A = Q \Lambda Q^T$ où

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix}, \qquad Q = \begin{pmatrix} \boldsymbol{u}_1 & \cdots & \boldsymbol{u}_n \end{pmatrix},$$

tels que $A\boldsymbol{u}_i = \lambda_i \boldsymbol{u}_i$, $\|u_i\| = 1$, $QQ^T = I$.

Conditions suffisantes de second ordre

Démonstration.

Avec $y := Q^T d$, nous obtenons

$$d^T A d = y^T \Lambda y = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i y_i^2.$$

Dès lors

$$d^T A d \geq \lambda_{\min} \sum_{i=1}^{n} y_i^2 = \lambda_{\min} \|y\|^2 = \lambda_{\min} \|d\|^2$$

$$d^T A d \leq \lambda_{\max} \sum_{i=1}^{n} y_i^2 = \lambda_{\max} \|y\|^2 = \lambda_{\max} \|d\|^2$$

Il suit

$$d^T \nabla^2 f(x) d \geq \lambda_{\min} \|d\|^2.$$

Démonstration.

Ainsi,

$$
\begin{aligned}
f(x^* + \tau d) - f(x^*) &= \frac{\tau^2}{2} d^T \nabla^2 f(x^*) d + o(\|\tau d\|^2) \\
&\geq \frac{\tau^2}{2} \lambda_{\min} \|d\|^2 + o(\|\tau d\|^2)
\end{aligned}
$$

Il suit que pour $\tau > 0$ suffisamment petit, $x^* + \tau d \in \mathcal{B}(x^*, \epsilon)$ et $f(x^* + \tau d) - f(x^*) > 0$ ou $f(x^* + \tau d) > f(x^*)$. $\square$

Corollaire

Soient $X \subseteq \mathcal{R}^n$ un ensemble ouvert et $f \in C^2$ sur X. Si $\nabla f(x^*) = 0$ et $\nabla^2 f(x^*)$ est une matrice definie positive, alors x^* est un minimum local de f sur X.

Fonction convexe

Soit $X \subseteq \mathbb{R}^n$ un ensemble convexe et $f : X \to \mathbb{R}$.

f est dite convexe si $\forall x_1, x_2 \in X$, $\forall t \in [0, 1]$:

$$f(tx_1 + (1-t)x_2) \leq tf(x_1) + (1-t)f(x_2).$$

f est dite strictement convexe si $\forall x_1, x_2 \in X$, $x_1 \neq x_2$, $\forall t \in (0, 1)$:

$$f(tx_1 + (1-t)x_2) < tf(x_1) + (1-t)f(x_2).$$

Une fonction f est dite (strictement) concave si $-f$ est (strictement) convexe.

Propriétés

Théorème

Une fonction $f : X \subseteq \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ *est convexe si et seulement si la fonction* $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ *donnée par*

$$g(\alpha) = f(x + \alpha y)$$

est convexe en tout $x + \alpha y \in X$*.*

L'intérêt de ce résultat en optimisation est que si une fonction est convexe, elle le sera également le long de toute direction de recherche.

Caractérisations équivalentes

Théorème

Soit $f : X \subseteq \mathbb{R}^n$, $f \in C^2$, X *ouvert. Les affirmations suivantes sont équivalentes*

(i) f *est convexe ;*

(ii) $\forall x, y \in X$, $f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^T(y - x)$;

(iii) $\forall x \in X$, $\nabla^2 f(x) \succeq 0$.

Convexité et fonctions quadratique

Considérons la fonction quadratique

$$f(x) = x^T A x + b^T x + c.$$

$f(\cdot)$ est

- convexe si et seulement si $A \succeq 0$;
- strictement convexe si et seulement si $A \succ 0$;
- concave si et seulement si $A \preceq 0$;
- strictement concave si et seulement si $A \prec 0$.

Fonction convexe – minimisation globale

Théorème

Soit le problème d'optimisation sans contrainte

$$\min_x \; f(x),$$

où $f \in C^1$ est convexe. Alors, tout point x^* satisfaisant $\nabla f(x^*) = 0$ est un minimum global.

Démonstration.

Comme f est convexe et dans C^1, nous avons $\forall x, y$,

$$f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^T (y - x).$$

En particulier, $\forall y$,

$$f(y) \geq f(x^*) + \nabla f(x^*)^T (y - x^*).$$

et comme $\nabla f(x^*) = 0$, $f(y) \geq f(x^*)$.

Convexité stricté

Soit $f : X \subseteq \mathbb{R}^n$, $f \in C^2$, X ouvert. f est strictement convexe ssi

$$\forall x, y \in X \text{ tels que } x \neq y, f(y) > f(x) + \nabla f(x)^T (y - x).$$

Si $\forall x \in X$, $\nabla^2 f(x) \succ 0$, alors f est strictement convexe. Mais l'inverse n'est pas vrai ! Exemple : $f(x) = \sum_{i=1}^4 x_i^4$.

Convexité stricté et unicité de la solution

Théorème

Soit le problème d'optimisation sans contrainte

$$\min_{x \in X} \ f(x),$$

où $f \in C^1$ est strictement convexe et X est un ensemble convexe. La solution optimale, si elle existe, est unique.

Convexité stricté et unicité de la solution

Démonstration.
Supposons par l'absurde qu'il existe deux solutions optimales différentes x_1^* et x_2^*. Prenons

$$z = \frac{x_1^* + x_2^*}{2}$$

En vertu de la convexité stricte,

$$f(z) < \frac{1}{2} f(x_1^*) + \frac{1}{2} f(x_2^*) = f(x_1^*).$$

$\square$

Algorithme

Un algorithme défini sur un sous-ensemble $X \subseteq \mathcal{R}^n$ est un processus itératif qui, partant d'une solution initiale $x_0 \in X$, génère une suite de points $\{x_k\}$ dans X.

À un algorithme correspond une multi application (multi function ou "mapping") $A : X \to X$ associant à un point $x_k \in X$ un sous-ensemble $A(x_k) \subseteq X$.
Exemple :

$$A(x) = \left\{ \left[0, \frac{x_1}{2}\right], \left[0, \frac{x_2}{2}\right] \right\}.$$

Dénotons par $X^* \subseteq X$ l'ensemble des solutions recherchées.

Algorithme de descente

Définition (Algorithme de descente)

Un algorithme A est un algorithme de descente par rapport à une fonction $z : X \to \mathcal{R}$ continue si

1. $x \notin X^*$ *et* $y \in A(x) \Rightarrow z(y) < z(x)$
2. $x \in X^*$ *et* $y \in A(x) \Rightarrow z(y) \leq z(x)$.

Définition

Un algorithme A est fermé au point $x \in X$ si

1. $\{x_k\} \in X$ *a la propriété que* $\lim_{k \to \infty} x_k = x$
2. $\{y_k \in A(x_k)\}$ *a la propriété que* $\lim_{k \to \infty} y_k = y$

alors $y \in A(x)$.

Note : la notion de fermeture pour les multi applications correspond à celle de continuité pour les fonctions.

Point d'accumulation et ensemble fermé

Définition (Point d'accumulation)

Soit $X \subseteq \mathcal{R}^n$*. Considérons une suite de points* $x_k \in X$, $k = 1, 2, \ldots$ *telle que* $\lim_{k\to\infty} x_k = x$*.* x *est un point d'accumulation (point limite) de* X*.*

X est un ensemble fermé si tout point d'accumulation de X appartient à X.

Par exemple, dans $\mathcal{R}^2$ l'ensemble

$$\Gamma = \{[x, y] \in \mathcal{R}^2 \mid x \in [a, b], y = 0\}$$

est un ensemble fermé.

Ensemble ouvert, borné, compact

Définition (Ensemble ouvert)

Soit $X \subseteq \mathcal{R}^n$. X est un ensemble ouvert si $\forall x \in X$, alors la boule $B(x, \epsilon) = \{z \in R^n \mid \|x - z\| < \epsilon\} \subseteq X$.

(Contre)-exemple : dans R^2 l'ensemble

$$\Gamma = \{[x, y] \in \mathcal{R}^2 \mid x \in (a, b), y = 0\}$$

n'est pas un ensemble ouvert puisque nous ne pouvons pas modifier la valeur de y.

Définition (Ensemble borné)

Un ensemble X est borné si $\exists M$ t.q. $\forall\, x \in X$, $\|x\| \leq M$.

Définition (Ensemble compact)

Dans $\mathcal{R}^n$, un ensemble X est compact si et seulement si il est fermé et borné.

Théorème de convergence globale

Supposons que $X \subseteq \mathcal{R}^n$ est un ensemble non vide et fermé, et soit X^* l'ensemble non vide des solutions. Soit A un algorithme défini sur X qui, partant d'un point $x_0 \in X$, génère une suite de points $\{x_k\}$ comme suit :

- si $x_k \in X^*$, l'algorithme s'arrête,
- sinon, soit $x_{k+1} \in A(x_k)$. Poser $k \leftarrow k + 1$ et recommencer.

Supposons que la suite de points $\{x_k\}$ générés par l'algorithme est contenue dans un sous ensemble compact de X et qu'il existe une fonction continue z par rapport à laquelle A est un algorithme de descente. Sous ces conditions, si la multi application A est fermée aux points appartenant à X^*, alors

1. soit l'algorithme s'arrête après un nombre fini d'itérations à un point de X^*,
2. soit il génère une suite infinie de points $\{x_k\}$ telle que tout point d'accumulation de $\{x_k\}$ (c'est-à-dire tout point limite d'une sous-suite convergente de $\{x_k\}$) appartient à X^*.

Descente par coordonnées (coordinate descent)

Soit $f : Y \subseteq \mathcal{R}^n \to \mathcal{R}$. f est minimisée pour chaque coordonnée séquentiellement. Ainsi, les directions utilisées en séquence sont

$$e_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad e_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \cdots, \quad e_n = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$$

À chaque fois que n itérations sont complétées, la séquence est reprise.

Méthode de Gauss-Seidel

Étape 0 Soit f la fonction à minimiser, et $\delta > 0$ le niveau de tolérance. Poser $k = 0$ et choisir une solution initiale x^0.

Étape 1
1. Poser $y_0 := x_k$.
2. Pour $j = 1, \ldots, n$,
   - calculer $\alpha^* \in \arg\min_\alpha f(y_{j-1} + \alpha e_j)$.
   - Poser $y_j = y_{j-1} + \alpha_j e_j$.
3. Poser $x_{k+1} = y_n$.

Étape 2 Arrêt si $\|x_{k+1} - x_k\| < \delta$ et poser $x^* := x_{k+1}$. Sinon, poser $k := k + 1$ et retourner à l'étape 1.

Méthode de Jacobi

Étape 0 Soit f la fonction à minimiser, et $\delta > 0$ le niveau de tolérance. Poser $k = 0$ et choisir une solution initiale x^0.

Étape 1
1. Pour $j = 1, \ldots, n$, calculer $\alpha_j^* \in \arg\min_\alpha f(x_k + \alpha e_j)$.
2. Soit $\alpha^* = (\alpha_1^*, \ldots, \alpha_n^*)$. Poser $x_{k+1} = x_k + \alpha^*$.

Étape 2 Arrêt si $\|x_{k+1} - x_k\| < \delta$ et poser $x^* := x_{k+1}$. Sinon, poser $k := k + 1$ et retourner à l'étape 1.

Méthode de recherche linéaire

Une méthode de recherche linéaire pour optimiser une fonction $f : R^n \rightarrow R$ génère une suite de points $\{x_k\}$ où x_0 est un point initial choisi dans $\mathcal{R}^n$ et où

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

i.e. x_{k+1} est généré à partir de x_k en choisissant une direction $d_k \in R^n$ et en prenant un pas $\alpha_k \in \mathcal{R}$ dans cette direction pour s'éloigner de x_k. Les méthodes diffèrent par leurs choix de direction d_k et de pas α_k.

Méthode de plus forte pente

Supposons qu'à chaque itération k, d_k soit choisi comme une direction de descente. Dès lors, à une itération k, si $\nabla f(x_k) \neq 0$, il est possible de trouver α_k

$$f(x_k + \alpha_k d_k) < f(x_k).$$

Supposons que $f(x)$ soit bornée inférieurement sur Y par κ. Dès lors $f(x_k) > f(x_{k+1}) > \ldots \geq \kappa$.

Théorème

Toute fonction monotonement décroissante et minorée converge.

En d'autres termes, $f(x_k)$ converge vers une value $\overline{f}$. Mais il se peut que $\overline{f} > f^*$! d_k et α_k doivent être choisis adéquatement pour avoir $\overline{f} = f^*$

Méthode de plus forte pente

Cherchons la direction qui fait décroître f le plus vite localement.

Le développement linéaire de f autour de x était

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

et donc

$$f(x_k + \alpha d_k) - f(x_k) = \alpha \nabla f(x_k)^T d_k + o(\|\alpha d_k\|)$$

L'inégalité de Cauchy-Schwarz nous indique que

$$|\nabla f(x_k)^T d_k| \leq \|\nabla f(x_k)\| \|d_k\|$$

et l'égalité est atteinte avec $d_k = \pm \nabla f(x_k)$. En faisant tendre α vers 0, on voit que

$$|f(x_k + \alpha d_k) - f(x_k)| \approx \alpha |\nabla f(x_k)^T d_k|$$

et donc localement, la plus forte décroissance est atteinte en prenant $d_k = -\nabla f(x_k)$: plus forte pente.

Méthode de plus forte pente (méthode du gradient)

Étape 0 Soit $f \in C^1$ la fonction à minimiser, et $\delta > 0$ le niveau de tolérance. Poser $k = 0$ et choisir une solution initiale x_0.

Étape 1 Arrêt si $\|\nabla f(x_k)\| < \delta$ et poser $x^* := x_k$.

Étape 1 Calculer $\alpha^* \in \arg\min_{\alpha \geq 0} f(x_k - \alpha \nabla f(x_k))$.
Poser $x_{k+1} = x_k - \alpha^* \nabla f(x^k)$, $k \leftarrow k + 1$.
Retour à l'étape 1.

Méthode de plus forte pente : convergence

Posons $\delta = 0$ plutôt que $\delta > 0$.

Théorème

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

Démonstration.

Considérons une sous-suite convergente $\{x_{k_j}\}$ de $\{x_k\}$ telle que $x_{k_j} \to x^*$ quand $k_j \to \infty$. Dès lors

$$f(x_{k_{j+1}}) \leq f(x_{k_j+1}) = \min_{\alpha \geq 0} f(x_{k_j} - \alpha \nabla f(x_{k_j}))$$

et donc, $\forall \alpha \geq 0$,

$$f(x_{k_{j+1}}) \leq f(x_{k_j} - \alpha \nabla f(x_{k_j}))$$

Méthode de plus forte pente : convergence

Démonstration.

Comme $f \in C^1$, f et ∇f sont continus sur $\mathcal{R}^n$. En outre, comme

$$\lim_{j \to \infty} f(x_{k_j}) = f(x^*),$$

nous avons, $\forall \alpha \geq 0$,

$$\lim_{j \to \infty} f(x_{k_j} - \alpha \nabla f(x_{k_j})) = f(x^* - \alpha \nabla f(x^*))$$

De là,

$$f(x^*) \leq f(x^* - \alpha \nabla f(x^*)), \ \forall \alpha \geq 0.$$

Si $\nabla f(x^*) \neq 0$, $-\nabla f(x^*)$ est une direction de descente, et cette inégalité n'est pas valide. On en déduit $\nabla f(x^*) = 0$. □

Directions orthogonales

Lemme (Déplacement en zig-zag)

Si $x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)$ *où* α_k *est tel que*

$$f(x_k) - \alpha_k \nabla f(x_k) = \min_{\alpha \geq 0} f(x_k - \alpha \nabla f(x_k))$$

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

Démonstration.

Si $\nabla f(x_k) = 0$, alors le résultat tient immédiatement. Supposons donc $\nabla f(x_k) \neq 0$. Considérons la fonction

$$m : \mathcal{R}^+ \to \mathcal{R}, \; m(\alpha) = f(x_k - \alpha \nabla f(x_k)).$$

Dès lors,

$$m'(\alpha) = -\nabla f(x_k)^T \nabla f(x_k - \alpha \nabla f(x_k))$$

Directions orthogonales

Démonstration.

Or, α_k est choisi de sorte à minimiser $m(\alpha)$, aussi $m'(\alpha_k) = 0$. De là,

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

$\square$

Notes :

1. L'ordre de convergence de la méthode du gradient est linéaire.
2. Au début de son application, la méthode permet de faire diminuer la valeur de la fonction économique relativement rapidement, mais son efficacité à ce chapitre diminue au cours des itérations.

Calcul du pas

Nous pouvons utiliser les méthodes vues précédemment dans le cadre unidimensionel pour calculer

$$\min_{\alpha \geq 0} f(x_k - \alpha \nabla f(x_k))$$

mais il est difficile de vérifier a priori si les hypothèses de ces méthodes sont satisfaites.

Mais avons-nous besoin de calculer le minimum exact le long de $-\nabla f(x_k)$?

Nous avons plus généralement à considérer le problème de recherche linéaire qui consiste à déterminer une longueur de pas adaptée étant donnée une direction de recherche d_k.

Méthode de recherche linéaire

1. Choisir un point initial x_0 et poser $k = 0$.
2. Arrêt si la convergence est atteinte (habituellement en testant si $\|\nabla f(x_k)\| < \delta$, avec $\delta > 0$ petit.
3. Calculer une direction de recherche d_k à partir de x_k, telle que d_k est une direction de descente.
4. Calculer une longueur de pas adéquate $\alpha_k > 0$ telle que
$$f(x_k + \alpha_k d_k) < f(x_k).$$
Le calcul de α_k est appelé recherche linéaire, et est habituellement l'objet d'une boucle de calcul itérative interne.
5. Poser
$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k.$$
Incrémenter k et retourner en 2.

Calcul de la longueur de pas

Le défi dans le calcul de α_k est d'éviter que le pas soit trop long ou trop court.

Recherche linéaire exacte : nous cherchons α_k solution du programme

$$\min_{\alpha \geq 0} f(x_k + \alpha d_k)$$

L'approche est cependant souvent considérée comme trop coûteuse.

Recherche linéaire inexacte

1. formuler un critère qui assure que les pas ne sont ni trop longs ni trop courts
2. choisir une bonne longueur de pas initial
3. construire une séquence de mises à jour qui satisfont les critères précédents après quelques étapes

Recherche linéaire par "backtracking"

Une première approche consiste à fixer une valeur maximale de la longueur du pas, et de réduire celle-ci jusqu'à obtenir une réduction de la fonction.

1. Soit $\alpha_{\text{init}} > 0$. Poser $\alpha_{(0)} = \alpha_{\text{init}}$ et $\ell = 1$.
2. Tant que $f(x_k + \alpha_{(\ell)} d_k) \geq f(x_k)$, répéter
   - poser $\alpha_{(\ell+1)} = \kappa \alpha_{(\ell)}$, avec $\kappa \in (0, 1)$ fixé,
   - incrémenter ℓ par 1.
3. Poser $\alpha_k = \alpha_{(\ell)}$.

Cette méthode permet d'éviter que le pas ne devienne trop petit, mais pas qu'il soit trop long relativement à la décroissance de f, et ne garantit pas une décroissance significative de f. Afin d'améliorer la méthode, nous devons renforcer l'exigence

$$f(x_k + \alpha_{(\ell)} d_k) < f(x_k).$$

Condition d'Armijo

La condition d'Armijo impose que nous obtenions au moins une fraction β de la réduction prédite par le développement de Taylor au premier ordre de f en x_k :

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq f(x_k) + \alpha_k \beta \nabla f(x_k)^T d_k$$

pour un certain $\beta \in (0, 1)$ fixé (par exemple $\beta = 0.1$ ou même $\beta = 0.0001$).
Ceci aura aussi pour effet de prévenir des pas trop grands.
La procédure de backtracking devient

1. Soit $\alpha_{\text{init}} > 0$. Poser $\alpha_{(0)} = \alpha_{\text{init}}$ et $\ell = 1$.
2. Tant que $f(x_k + \alpha_k d_k) > f(x_k) + \alpha_k \beta \nabla f(x_k)^T d_k$, répéter
   - poser $\alpha_{(\ell+1)} = \kappa \alpha_{(\ell)}$, avec $\kappa \in (0, 1)$ fixé,
   - incrémenter ℓ par 1.
3. Poser $\alpha_k = \alpha_{(\ell)}$.

Convergence du backtracking-Armijo

Théorème (Terminaison du backtracking-Armijo)

Soit $f(x) \in C^1$, et $\nabla f(x)$ lipschitzienne autour de x_k avec une constante γ_k. Soit d_k une direction de descente en x_k. Alors, pour un $\beta \in (0,1)$ fixé,

1. *la condition d'Armijo $f(x_k + \alpha d_k) \leq f(x_k) + \alpha\beta\nabla f(x_k)^T d_k$ est satisfaite pour tout $\alpha \in [0, a_k^{\max}]$, où*

$$a_k^{\max} = \frac{2(\beta - 1)\nabla f(x_k)^T d_k}{\gamma_k \|d_k\|^2}$$

2. *de plus, pour $\kappa \in (0,1)$ fixé, la longueur de pas générée par la procédure de recherche linéaire backtracking-Armijo se termine avec*

$$\alpha_k \geq \min\left\{\alpha_{init}, \frac{2\kappa(\beta - 1)\nabla f(x_k)^T d_k}{\gamma_k \|d_k\|^2}\right\}$$

Remarque

En pratique, γ_k n'est pas connu. Dès lors, nous ne pouvons pas simplement calculer $\alpha_k^{\max}$ et α_k à partir des formules explicites données par le théorème.

La condition d'Armijo ne suffit pas à elle seule comme elle ne prévient pas des pas trop petits. Considérons par exemple la fonction $f(x) = x^2$ et $x_0 = 2$. Prenons $d_k = -1$ et $\alpha_k = 2^{-k-1}$. Dans ce cas $x_k \to 1$. Pourtant, la condition d'Armijo est satisfaite pour c_1 choisi suffisamment petit.

Convergence de la recherche linéaire avec Armijo

Théorème

Supposons que $f(x) \in C^1$ et que $\nabla f(x)$ est lipschitzienne sur $\mathcal{R}^n$. Alors, pour les itérés générés par la méthode de recherche linéaire avec pas d'Armijo par backtracking, une des trois situations suivantes a lieu :

1. $$\nabla f_k(x) = 0$$
   après un nombre fini d'itérations
2. $$\lim_{k \to \infty} f(x_k) = -\infty$$
3. $$\lim_{k \to \infty} \nabla f(x_k) = 0$$

Condition de Wolfe

La condition d'Armijo n'est toutefois pas toujours suffisante pour assurer un bon comportement de l'algorithme de recherche linéaire.

Une longueur de pas α_k est dite satisfaire les conditions de Wolfe par rapport à la direction de descente d_k si les inégalités suivantes sont satisfaites :

$$
\begin{aligned}
f(x_k + \alpha_k d_k) &\leq f(x_k) + \alpha_k \beta_1 \nabla f(x_k)^T d_k \qquad &\text{(condition d'Armijo)} \\
\nabla f(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k &\geq \beta_2 \nabla f(x_k)^T d_k \qquad &\text{(condition de courbure)}
\end{aligned}
$$

avec $0 < \beta_1 < \beta_2 < 1$.

La condition d'Armijo assure une réduction suffisante de la fonction objectif, tandis que la condition de courbure assure une réduction suffisante de la pente.