Optimisation

Dr. Ibtissem DIDI

01 Mars 2020

Plan

Historique

L'***optimisation*** est une branche des mathématiques cherchant à modéliser, à analyser et à résoudre analytiquement ou numériquement les problèmes qui consistent à minimiser ou maximiser une fonction sur un ensemble. L'optimisation joue un rôle important en :

- la recherche opérationnelle (domaine à la frontière entre l'informatique, les mathématiques et l'économie),
- mathématiques appliquées (fondamentales pour l'industrie et l'ingénierie),
- analyse et en analyse numérique,
- statistique pour l'estimation du maximum de vraisemblance d'une distribution,
- la recherche de stratégies dans le cadre de la théorie des jeux,
- théorie du contrôle et de la commande.

Historique

Les premiers problèmes d'optimisation auraient été formulés par **Euclide**, au III^e siècle avant notre ère, dans son ouvrage historique *Éléments*.

Figure – Mécanicien et un mathématicien grec

300 ans plus tard, **Héron d'Alexandrie** dans Catoptrica énonce le « principe du plus court chemin » dans le contexte de l'optique.

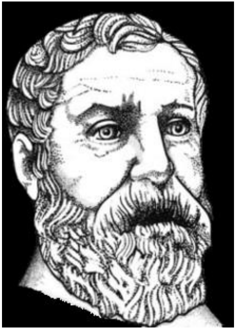


Figure – Ingénieur

Historique

Au XVIIe siècle, l'apparition du calcul différentiel entraîne l'invention de techniques d'optimisation, ou du moins en fait ressentir la nécessité. **Newton** met au point une méthode itérative permettant de trouver les extremums locaux d'une fonction en faisant intervenir la notion de dérivée.

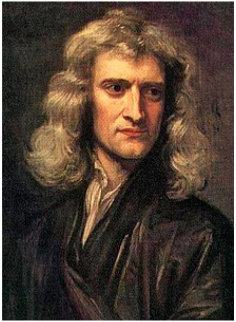


Figure – Philosophe, mathématicien, physicien, alchimiste, astronome et théologien anglais, puis britannique

Historique

Cette nouvelle notion issue de ses travaux avec **Leibniz** permet de grandes avancées dans l'optimisation de fonctions car le problème est ramené à la recherche des racines de la dérivée.

Figure – Philosophe, scientifique, mathématicien, logicien, diplomate, juriste, bibliothécaire et philologue allemand

Historique

Durant le XVIIIe siècle, les travaux des mathématiciens **Euler** et **Lagrange** mènent au calcul des variations, une branche de l'analyse fonctionnelle regroupant plusieurs méthodes d'optimisation.

Figure – Mathématicien et physicien suisse

Historique

Lagrange invente une technique d'optimisation sous contraintes : les multiplicateurs de Lagrange.

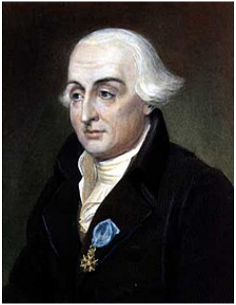


Figure – Mathématicien, mécanicien et astronome italien naturalisé français

Historique

Le XIXe siècle est marqué par l'intérêt croissant des économistes pour les mathématiques. Ceux-ci mettent en place des modèles économiques qu'il convient d'optimiser, ce qui accélère le développement des mathématiques. Depuis cette période, l'optimisation est devenue un pilier des mathématiques appliquées.

Historique

On peut tout de même évoquer l'invention de plusieurs méthodes itératives utilisant le gradient de la fonction, ainsi que l'utilisation du terme « programmation mathématique », pour désigner des problèmes d'optimisation. Historiquement, le premier terme introduit fut celui de « programmation linéaire », inventé par **George Dantzig** vers 1947.

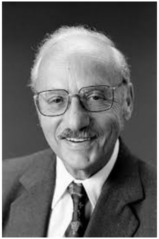


Figure – Mathématicien américain, notamment inventeur de l'algorithme du simplexe en optimisation linéaire

Problème d'optimisation

Un problème d'optimisation $(\mathbb{P})$ s'exprime de la manière suivante :

Définition

Etant donné une fonction $f : \mathcal{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ trouver un élément $\bar{x}$ de $\mathcal{R}$ tel que $f(\bar{x}) \leq f(x)$ pour tout $x \in \mathcal{R}$. On dit que l'on cherche à minimiser la fonction f sur l'ensemble $\mathcal{R}$.

- La fonction f peut s'appeler : *fonction-coût*, ou simplement *coût*, *fonction-objectif*, ou simplement *objectif*, *critère*, etc.
- L'ensemble $\mathcal{R}$ est appelé : *ensemble admissible*, et les points de $\mathcal{R}$ sont appelés *les points admissibles* de $(\mathbb{P})$.
- Le point $\bar{x}$ est appelé *solution* ou *minimum* ou bien *minimiseur* de $(\mathbb{P})$.

Problème d'optimisation

Le problème d'optimisation $(\mathbb{P})$ peut s'écrire de plusieurs manières :

$$\min_{x \in \mathcal{R}} f(x)$$

$$\min \{f(x) | x \in \mathcal{R}\}$$

$$\min f(\mathcal{R})$$

ou

$$\left\{ \begin{array}{l} \min f(x) \\ x \in \mathcal{R} \end{array} \right.$$

Dans la pratique, il est souvent difficile de déterminer une fonction-objectif à minimiser, et les diverses fonctions-objectifs choisies donnent lieu à autant de problèmes d'optimisation différents. X est l'espace des paramètres (disant que X est un espace vectoriel de dimension finie). La partie $\mathcal{R}$ de X est l'ensemble des ***contraintes***. $\mathcal{R}$ est représenté de diverses manières, par des égalités $a_i(x), i = \overline{1,p}$ ou des inégalités $c_j(x), j = \overline{1,q}$ à respecter, des bornes à ne pas dépasser. Si $\mathcal{R}$ est l'espace X tout entier, c'est-à-dire si on laisse toute liberté dans le choix de x, on parlera de problème d'optimisation sans contraintes.

Moyennant le changement de fonction f en $-f$, on peut convertir une formulation "maximiser" en une formulation "minimiser" et vice versa.

Maximiser f revient à minimiser $-f$.

Explication

$$f(x) \leq f(\bar{x}), \forall x \in \mathcal{R} \iff -f(x) \geq -f(\bar{x}), \forall x \in \mathcal{R}$$

Toutefois il ne faut pas s'y fier : si certaines propriétés de f sont maintenues par passage de f en $-f$ (continuité, différentiabilité ou linéarité), d'autres, cruciales, sont détruites par cette transformation ; par exemple "minimiser f sur $\mathcal{R}$ avec f et $\mathcal{R}$ convexes" peut être considérer comme un problème facile, alors que "maximiser f sur $\mathcal{R}$ avec f et $\mathcal{R}$ convexes" est de fait un problème d'optimisation très difficile.
La convexité est un exemple de propriété tournée davantage vers la minimisation que vers la maximisation.

Région admissible

N'importe quel point x satisfaisant les contraintes d'égalités et d'inégalités est dit *point admissible* de $\mathbb{P}$. L'ensemble de point satisfaisant ces contraintes est dit *région admissible* de $f(x)$. Ainsi la région admissible peut être définie par l'ensemble

$$\mathcal{R} = \{x/a_i(x) = 0 \text{ pour } i = \overline{1,p} \text{ et } c_j(x) \geq 0 \text{ pour } j = \overline{1,q}\}$$

N'importe quel point x qui n'appartient pas à $\mathcal{R}$ est dit *point non admissible*

Région admissible

- Si les contraintes du problème $\mathbb{P}$ étaient toutes des inégalités, les contraintes se divisent en 3 parties :
  1. Point intérieur est un point pour lequel $c_j(x) > 0$ pour tout j. Ceci est un point admissible.
  2. Point au bord est un point pour lequel au moins un $c_j(x) = 0$. Ceci peut être ou ne pas être un point admissible.
  3. Point extérieurs est un point pour lequel au moins un $c_j(x) < 0$. Ceci est un point non admissible.
- Si une contrainte $c_m(x)$ est nulle durant une itération spécifique, elle est dite *active*.
- Si $c_m(\bar{x})$ est nulle la convergence est atteinte, l'optimum $\bar{x}$ est localisé au bord. Dans ce cas là, le point optimal est dit *contraint*.

Exemple 1

En utilisant la méthode graphique, résoudre le problème d'optimisation suivant :

$$\begin{aligned} \min f(x) &= x_1^2 + x_2^2 - 4x_1 + 4 \\ sc : c_1(x) &= x_1 - 2x_2 + 6 \geq 0 \\ c_2(x) &= -x_1^2 + x_2 - 1 \geq 0 \\ c_3(x) &= x_1 \geq 0 \\ c_4(x) &= x_2 \geq 0 \end{aligned}$$

Solution

La fonction objectif est exprimée comme suit :

$$(x_1 - 2)^2 + x_2^2 = C$$

Ainsi les contours de $f(x)$ dans le plan (x_1, x_2) sont des cercles de centre $(2, 0)$ et de rayon $r = \sqrt{C}$. Les contraintes $c_1(x)$ et $c_2(x)$ impliquent

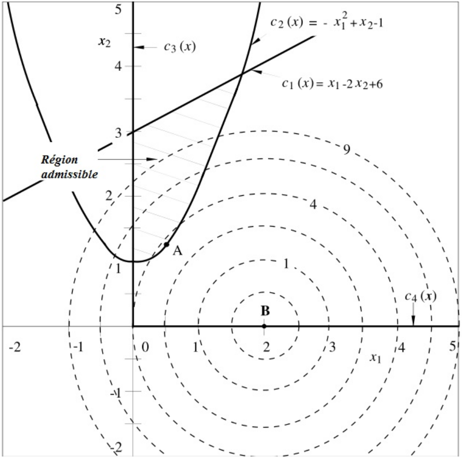
$$x_2 \leq \frac{1}{2}x_1 + 3$$

et

$$x_2 \geq x_1^2 + 1$$

respectivement, tant que $c_3(x)$ et $c_4(x)$ impliquent la positivité de x_1 et x_2.

Solution


$c_2(x) = -x_1^2 + x_2 - 1$
$c_3(x)$
$c_1(x) = x_1 - 2x_2 + 6$
x_2
x_1
Région admissible
A
B
$c_4(x)$
9
4
1
-2 -1 0 1 2 3 4 5
5 4 3 2 1 -1 -2

Solution

La solution est localisée au point $\mathcal{R}$ sur le bord de $c_2(x)$. Le point optimal est donc contraint car $c_2(\bar{x}) = 0$. Par conséquent, si le problème était résolu par une méthode de programmation, la contrainte $c_2(x)$ deviendra active dés que la solution sera atteinte.
Si les deux contraintes $c_1(x)$ et $c_2(x)$ n'existent pas, le minimum sera le point B.

Exemple 2

En utilisant la méthode graphique, résoudre le problème d'optimisation suivant :

$$\begin{aligned} \min f(x) &= x_1^2 + x_2^2 + 2x_2 \\ sc : a_1(x) &= x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0 \\ c_1(x) &= x_1 + x_2 - 0.5 \geq 0 \\ c_2(x) &= x_1 \geq 0 \\ c_3(x) &= x_2 \geq 0 \end{aligned}$$

Solution

La fonction objectif est exprimée comme suit :

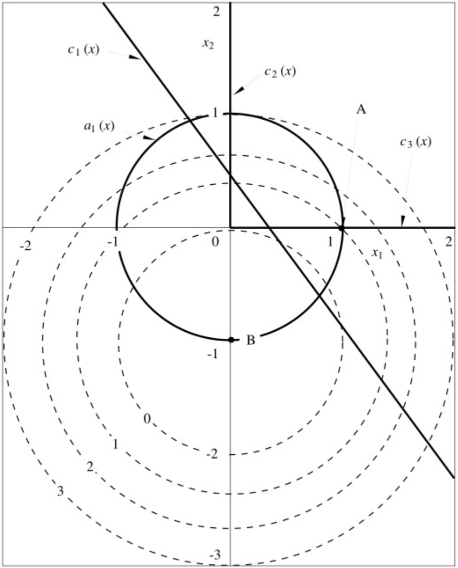
$$x_1^2 + (x_2 + 1)^2 = C + 1$$

Ainsi les contours de $f(x)$ dans le plan (x_1, x_2) sont des cercles de centre $(0, -1)$ et de rayon $r = \sqrt{C+1}$. La contrainte $a_1(x)$ est un cercle de centre $(0, 0)$ et de rayon $r = 1$. La contrainte $c_1(x)$ est une droite

$$x_2 \leq 0.5 - x_1$$

Les contraintes $c_2(x)$ et $c_3(x)$ impliquent la positivité de x_1 et x_2.

Solution



Solution

Dans ce cas là, la région admissible est l'arc de cercle $a_1(x) = 0$ dans le quadrant positif du plan (x_1, x_2). La solution est localisée au point $\mathcal{R}$. Le point optimal $\bar{x}(1,0)$ est donc contraint car $a_1(\bar{x}) = 0$ et $c_3(\bar{x}) = 0$. Par conséquent, si le problème était résolu par une méthode de programmation, la contrainte $c_2(x)$ deviendra active dés que la solution sera atteinte.
Si les deux contraintes $c_1(x)$ et $c_2(x)$ n'existent pas, le minimum sera le point B.

Introduction

Dans ce chapitre, on va donner des définitions du vecteur gradient, la matrice hessienne et les différents types d'extremum (maximum et minimum). Les conditions nécessaires et suffisantes d'optimalité. Par conséquent, une classe de fonctions convexes et concaves sera introduite. A travers ce chapitre ,on va se focaliser sur des problèmes d'optimisation non linéaire

$$\begin{array}{ll} \min & f = f(x) \\ sc: & x \in \mathcal{R} \end{array}$$

Définition d'une forme quadratique

Définition

Soit H une matrice symétrique $n \times n$ et $g \in \mathbb{R}^n$. On appelle *forme quadratique* la fonction $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ définie par

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T H x - g^T x$$

Lorsque la matrice H possède certaines propriétés, la fonction f peut prendre un nom particulier. La propriété à laquelle nous allons nous intéresser est la **positivité**.

Définition d'une forme quadratique

Définition

Soit H une matrice symétrique $n \times n$ et $g \in \mathbb{R}^n$. On dit que H est semi-définie positive (SDP) et on note $H \geq 0$, quand

$$x^T H x \geq 0, \forall x \in \mathbb{R}^n$$

On dit que H est définie positive (DP) et on note $H > 0$, quand

$$x^T H x > 0, \forall x \in \mathbb{R}^n, x \neq 0$$

Définition d'une forme quadratique

Cette définition peut être reliée aux valeurs propres de la matrice H :

Propriété

Soit H une matrice symétrique $n \times n$. On note $\lambda_i, i = \overline{1, n}$ ses valeurs propres (réelles). On a les équivalences suivantes :

$$H \geq 0 \Longleftrightarrow \lambda_i \geq 0, i = \overline{1, n}$$

$$H > 0 \Longleftrightarrow \lambda_i > 0, i = \overline{1, n}$$

Lorsque la matrice H est définie positive (resp. semi-définie positive), on dira que $f(x)$ est une forme quadratique définie positive (resp. semi-définie positive).

Définition de la différentiabilité

Dans $\mathbb{R}^n$ on note x le vecteur colonne

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

et la notation $\|.\|$ désignera, la norme euclidienne

$$\|x\| = \left(\sum_{k=1}^{n} x_k^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

Définition de la différentiabilité

Définition

Soit $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^m$ représentée dans la base canonique de $\mathbb{R}^m$ par le vecteur

$$f(x) = \left(\begin{array}{c} f_1(x) \\ \vdots \\ f_m(x) \end{array} \right)$$

continue en $a \in \mathbb{R}^n$. On dit que f est différentiable en a s'il existe une application linéaire, notée $f'(a)$, telle que pour tout $d \in \mathbb{R}^n$ on ait

$$f(a+d) = f(a) + f'(a)d + \|d\| \, \epsilon(d)$$

où $\epsilon(.)$ est une fonction continue en 0 vérifiant $\lim\limits_{d \to 0} \epsilon(d) = 0$. On appel $f'(a)$ dérivée de f au point a.

Calcul de la dérivée première

On peut d'ores et déjà donner un résultat "pratique" permettant de calculer directement la dérivée à partir du développement.

Proposition

Soit $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^m$ différentiable en a, alors

$$\lim_{t \to 0} \frac{f(a+td) - f(a)}{t} = f'(a)d$$

Cette méthode d'estimation du gradient est souvent appelée *différences finies*. La quantité $f'(a)d$ est la dérivée directionnelle de f au point a dans la direction d. La proposition suivante fait le lien entre la matrice de $f'(a)$ et les dérivées partielles de f au point a :

Calcul de la dérivée première

Proposition

Soit $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^m$ différentiable en a, alors on peut représenter $f'(a)$ par sa matrice dans les bases canoniques de $\mathbb{R}^n$ et de R^m et on a

$$[f'(a)]_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(a)$$

On appelle souvent $f'(a)$ la *matrice jacobienne* de f au point a. Lorsque $m = 1$ on adopte une notation et un nom particuliers : *le gradient* est le vecteur noté $\nabla f(a)$ et défini par

$$f'(a) = \nabla f(a)^T$$

et on a

$$f(a+d) = f(a) + \nabla f(a)^T d + \|d\| \, \epsilon(d)$$

Dérivée seconde

On se place maintenant dans le cas $m = 1$, soit $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$.

Définition

L'application $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ est dite deux fois différentiable s'il existe une matrice symétrique $\nabla^2 f(a)$ telle que

$$f(a+d) = f(a) + \nabla f(a)^T d + d^T \nabla^2 f(a) d + \|d\|^2 \epsilon(d)$$

On appelle $\nabla^2 f(a)$ *matrice hessienne* de f au point a. Comme l'énonce le théorème suivant, cette matrice s'obtient à partir des dérivées secondes de f :

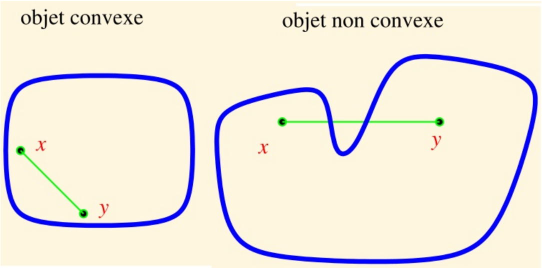
Théorème

Soit $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ deux fois différentiable en un point a. Si on note $g(x) = \nabla f(x)$ alors la matrice hessienne est définie par $\nabla^2 f(a) = g'(a)$, soit

$$[\nabla^2 f(a)]_{ij} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}$$

Introduction

La convexité est à la base une propriété géométrique, assez intuitive d'ailleurs, qui permet de caractériser certains objets. On voit assez bien ce qu'est un objet convexe dans un espace à deux ou trois dimensions. Nous allons maintenant montrer comment cette propriété peut aussi s'appliquer aux fonctions de $\mathbb{R}^n$ dans $\mathbb{R}$.



Ensemble convexe

Définition (ensemble convexe)

Soient x_1 et x_2 deux vecteurs de $\mathbb{R}^n$. Le segment de droite joignant l'extrémité de ces vecteurs, l'ensemble des point :

$$D = \{x \in \mathbb{R}^n / x = \alpha x_1 + (1-\alpha)x_2, 0 \leq \alpha \leq 1\}$$

Exemple. Considérons les deux vecteurs $x_1 = \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \end{pmatrix}$ et $x_2 = \begin{pmatrix} 2 \\ 5 \end{pmatrix}$.

Soit $[P_1, P_2]$ le segment de droite reliant les extrémités de x_1 et x_2.

$$[P_1, P_2] = \left\{x \in R^2 / x = \alpha \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \end{pmatrix} + (1-\alpha)\begin{pmatrix} 2 \\ 5 \end{pmatrix}, 0 \leq \alpha \leq 1\right\}$$

En faisant varier la valeur de α entre 0 et 1, on obtient les points de segment.

Exemple

$$\alpha = 0 \quad x = \begin{pmatrix} 2 \\ 5 \end{pmatrix} = P_2$$

$$\alpha = \frac{1}{4} \quad x = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 4 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{3}{4}\begin{pmatrix} 2 \\ 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{5}{2} \\ 4 \end{pmatrix}$$

$$\alpha = \frac{1}{2} \quad x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 4 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 2 \\ 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 3 \end{pmatrix}$$

$$\alpha = \frac{3}{4} \quad x = \frac{3}{4}\begin{pmatrix} 4 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 2 \\ 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{7}{2} \\ 2 \end{pmatrix}$$

$$\alpha = 1 \quad x = \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \end{pmatrix} = P_1$$

Exemple

Ces points sont représentés sur la figure suivante.

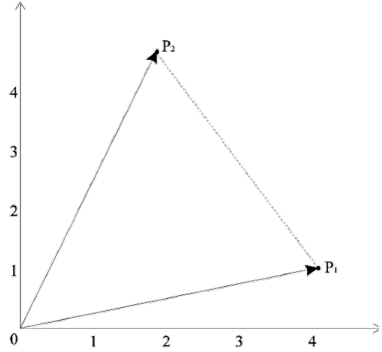


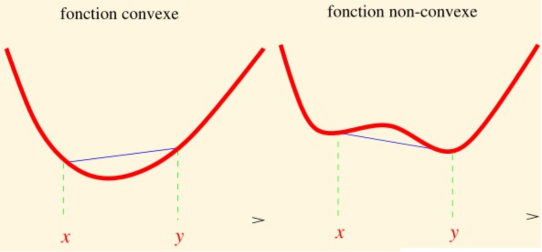
Figure – Segment de droite reliant P_1 à P_2.

Fonction convexe

Définition (fonction convexe)

Soit S un ens. convexe de $\mathbb{R}^n$; $f : S \longrightarrow \mathbb{R}$ est dite *convexe* sur S si :
$\forall (x, y) \in S^2, \forall \alpha \in [0, 1], f\,(\alpha x + (1-\alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1-\alpha) f(y)$

On dira que f est *strictement convexe* sur S si pour $x \neq y$:
$\forall (x, y) \in S^2, \forall \alpha \in \,]0, 1[\,, f\,(\alpha x + (1-\alpha)y) < \alpha f(x) + (1-\alpha) f(y$



Caractérisation de la convexité en termes du hessien

Propriété

Si $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ est 2 fois continûment dérivable sur S convexe alors f est convexe ssi $f''(x) \geq 0$, $\forall x \in S$ et strictement convexe ssi $f''(x) > 0$, $\forall x \in S$.

Ce résultat se généralise pour $n > 1$: le résultat suivant fait le lien entre le hessien et la propriété de convexité :

Théorème

Si $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ est 2 fois continûment dérivable sur S convexe alors f est convexe ssi $\nabla^2 f(x) \geq 0$, $\forall x \in S$ et strictement convexe ssi $\nabla^2 f(x) > 0$, $\forall x \in S$.

Caractérisation de la convexité en termes du hessien

Le corollaire suivant est immédiat :

Corollaire

Soit f une forme quadratique définie par

$$f(x) = \frac{1}{2} x^T H x - g^T x$$

alors f est convexe ssi $H \geq 0$, et strictement convexe ssi $H > 0$.

Cela provient du fait que $\nabla^2 f(x) = H$

Caractérisation de la convexité en termes du gradient

Dans le cas où la fonction f n'est supposée qu'une fois différentiable, on a le résultat suivant :

Théorème

Soit $f : S \subset \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ une fonction **une fois différentiable**, alors f est convexe ssi

$$f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^T(y-x), \forall (x,y) \in S^2$$

La fonction f est strictement convexe ssi

$$f(y) > f(x) + \nabla f(x)^T(y-x), \forall (x,y) \in S^2, x \neq y$$

Types d'extremum

Définition 1

Un point $\bar{x} \in \mathcal{R}$, est dit un *minimiseur local* de $f(x)$ s'il existe $\epsilon > 0$ tel que

$$f(\bar{x}) \leq f(x)$$

si

$$x \in \mathcal{R} \text{ et } \|x - \bar{x}\| < \epsilon$$

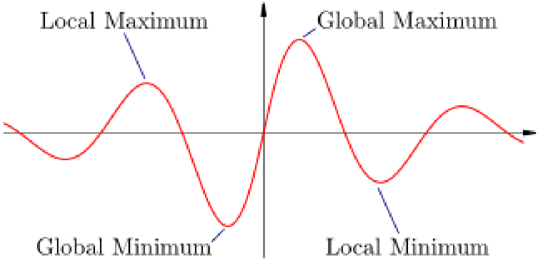
Définition 2

Un point $\bar{x} \in \mathcal{R}$, est dit un *minimiseur global* de $f(x)$ tel que $\forall x \in \mathcal{R}$

$$f(\bar{x}) \leq f(x)$$

Si la définition 2 est satisfaite en $\bar{x}$ alors la définition 1 est aussi satisfaite en $\bar{x}$ et donc un minimiseur global est aussi un minimiseur local.

Types d'extremum



Introduction

Le gradient $g(x)$ et le Hessien $H(x)$ doivent satisfaire certaines conditions en $\bar{x}$ (minimiseur local). Deux conditions vont être présentées :

1. Conditions qui vont être satisfaite en $\bar{x}$. Ce sont des conditions nécessaires.
2. Conditions qui vont garantir que $\bar{x}$ est un minimiseur local. Ce sont des conditions suffisantes.

Définition (Direction)

Soit $\delta = \alpha d$ une variation de x où $\alpha > 0$ et d est le vecteur direction. Si $\mathcal{R}$ est la région admissible et une constante $\hat{\alpha} > 0$ existe telle que

$$x + \alpha d \in \mathcal{R}$$

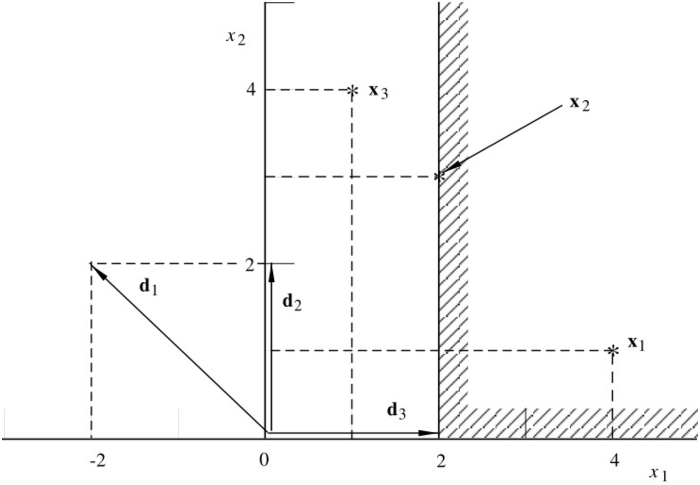
Pour tout α avec $0 \leq \alpha \leq \hat{\alpha}$, alors d est dite *direction admissible* au point x.

Exemple. La région admissible d'un problème d'optimisation est donnée par :

$$\mathcal{R} = \{x/x_1 \geq 2, x_2 \geq 0\}$$

Lequel des vecteurs $d_1 = [-2\ 2]^T$, $d_2 = [0\ 2]^T$ et $d_3 = [2\ 0]^T$ est une direction admissible au points $x_1 = [4\ 1]^T$, $x_2 = [2\ 3]^T$ et $x_3 = [1\ 4]^T$?

Exemple


x_2
4
2
$\mathbf{x}_3$
$\mathbf{x}_2$
$\mathbf{x}_1$
$\mathbf{d}_1$
$\mathbf{d}_2$
$\mathbf{d}_3$
-2
0
2
4
x_1

Exemple

- d_1 est une direction admissible au point x_1 pour tout $0 \leq \alpha \leq \hat{\alpha}$ pour $\hat{\alpha} = 1$.
- d_2 et d_3 sont des directions admissibles au point x_1 pour tout $0 \leq \alpha \leq \hat{\alpha}$ avec $\hat{\alpha} > 0$.
- d_1 n'est pas une direction admissible au point x_1.
- $\exists \hat{\alpha} > 0$ pour lequel d_2 et d_3 sont des directions admissibles au point x_2.
- d_1, d_2 et d_3 ne sont pas des directions admissibles au point x_3, car x_3 n'appartient pas à la région admissible.

Conditions nécessaire du premier ordre

La fonction objectif doit satisfaire deux types de conditions dans le but d'avoir un minimum, dites, conditions du premier et du second ordre. Les conditions du premier ordre utilisent la première dérivée, i.e., le gradient.

Théorème

1. Si $f(x) \in \mathcal{C}^1$ et $\bar{x}$ est un minimiseur local, alors
$$g(\bar{x})^T d \geq 0$$
pour toute direction admissible d au point $\bar{x}$.
2. Si $\bar{x}$ est localiser à l'intérieur de $\mathcal{R}$ alors
$$g(\bar{x}) = 0$$

Conditions nécessaire du second ordre

Les conditions nécessaire du second ordre utilisent non seulement les dérivées premières mais aussi les secondes dérivées, équivalent, le gradient et le Hessien.

Soit d est une direction arbitraire au point x.
Rappelons que,la forme quadratique $d^T H(x)d$ est dite **D.P**, **S.D.P**, **S.D.N** et **D.N** si $d^T H(x)d > 0$, ≥ 0, ≤ 0 et < 0 respectivement, pour tout $d \neq 0$ au point x. Si $d^T H(x)d$ admet des valeurs positives et négatives est dite **indéfinie**.

Théorème

1. Si $f(x) \in \mathcal{C}^{\,2}$ et $\bar{x}$ est un minimiseur local, alors pour toute direction admissible d au point $\bar{x}$,
   1. $g(\bar{x})^T d \geq 0$
   2. Si $g(\bar{x})^T d = 0$, alors $d^T H(\bar{x}) d \geq 0$
2. Si $\bar{x}$ est un minimiseur local à l'intérieur de $\mathcal{R}$ alors,
   1. $g(\bar{x}) = 0$
   2. $d^T H(x) d \geq 0$, $\forall d \neq 0$.

Exemple 1. Soit $\bar{x} = \left[\frac{1}{2}\ 0\right]^T$ un minimiseur local du problème

$$\min f(x) = x_1^2 - x_1 + x_2 + x_1 x_2$$

$$\text{sc} : x_1 \geq 0, x_2 \geq 0$$

Montrer que les C.N du second ordre sont vérifiées.

Solution. Les dérivées partielles premières de f sont :

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = 2x_1 + x_2 - 1,\ \frac{\partial f}{\partial x_2} = x_1 + 1$$

Si $d = [d_1\ d_2]^T$ est une direction admissible, on obtient :

$$g(x)^T d = (2x_1 + x_2 - 1)d_1 + (x_1 + 1)d_2$$

au point $x = \bar{x}$

$$g(\bar{x})^T d = \frac{3}{2} d_2$$

et pour $d_2 \geq 0$, on a :

$$g(\bar{x})^T d \geq 0$$

Ainsi, les C.N du premier ordre sont satisfaites.

Conditions nécessaire du second ordre

Maintenant, si $d_2 = 0$,

$$g(\bar{x})^T d = 0$$

le Hessien est :

$$H(\bar{x}) = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

et

$$d^T H(\bar{x}) d = 2d_1^2 \geq 0$$

Pour toute valeur de d_1. Ainsi ; les C.N du second ordre sont satisfaites.

Conditions nécessaire du second ordre

Exemple 2. Les points $p_1 = [0\ 0]^T$ et $p_2 = [6\ 9]^T$ sont des minimiseurs probables du problème :

$$\min f(x) = x_1^3 - x_1^2 x_2 + 2x_2^2$$

$$\text{sc} : x_1 \geq 0, x_2 \geq 0$$

Solution. Les dérivées partielles premières sont :

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = 3x_1^2 - 2x_1x_2,\ \frac{\partial f}{\partial x_2} = 4x_2 - x_1^2$$

Si $d = [d_1\ d_2]^T$ est une direction admissible, on obtient :

$$g(x)^T d = (3x_1^2 - 2x_1x_2)d_1 + (4x_2 - x_1^2)d_2$$

aux points p_1 et p_1

$$g(p_i)^T d = 0$$

Ainsi, les C.N du premier ordre sont satisfaites.

Le Hessien

$$H(x) = \begin{pmatrix} 6x_1 - 2x_2 & -2x_1 \\ -2x_1 & 4 \end{pmatrix}$$

si $x = p_1$ alors

$$H(p_1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}$$

Donc

$$d^T H(p_1) d = 4d_2^2 \geq 0$$

Ainsi, les C.N du second ordre au point p_1 sont satisfaites.

si $x = p_2$ alors

$$H(p_2) = \begin{pmatrix} 18 & -12 \\ -12 & 4 \end{pmatrix}$$

Donc

$$d^T H(p_2) d = 18d_1^2 - 24d_1d_2 + 4d_2^2$$

qui n'est pas définie. Ainsi, les C.N du second ordre au point p_2 ne sont pas satisfaites.

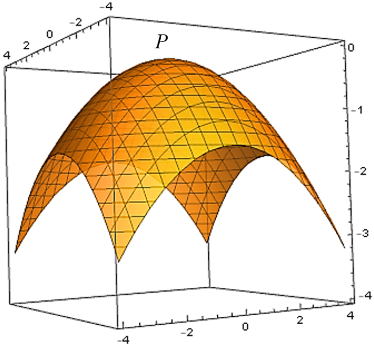
Classification des points stationnaires

Si les points extremums appelés minimiseurs et maximiseurs, sont localisés à l'intérieur de la région admissible, ils sont appelés **points stationnaires** lorsque $g(x) = 0$ en ces points. Un autre type de points stationnaires est le **point selle** ou **point col**.

Illustrons toutes les définitions précédentes dans le cas d'une fonction à deux variables.

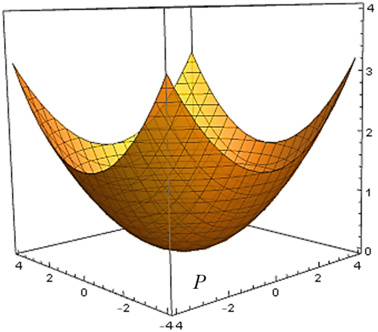
Classification des points stationnaires

Pour ce type de fonction, $z = f(x, y)$, le graphe est une surface dans l'espace à trois dimensions. Une telle fonction présente un maximum au point $P(x_0; y_0; f(x_0, y_0))$, si $f(x_0, y_0)$ atteint une valeur supérieure à toutes celles que prend $f(x, y)$ au voisinage de $x = x_0$ et $y = y_0$, comme indiqué sur la figure.



Classification des points stationnaires

De même, $f(x,y)$ possède un minimum au point $P(x_0; y_0; f(x_0, y_0))$, si $f(x_0, y_0)$ atteint une valeur inférieure à toutes celles que prend $f(x,y)$ au voisinage de $x = x_0$ et $y = y_0$; ce cas est illustré par la figure.



Classification des points stationnaires

Il en résulte qu'au point $P(x_0; y_0; f(x_0, y_0))$, il existe un plan tangent horizontal. Ce plan tangent est engendré par deux tangentes, elles-mêmes déterminées par :

$$\frac{\partial f}{\partial x} \; et \; \frac{\partial f}{\partial y}$$

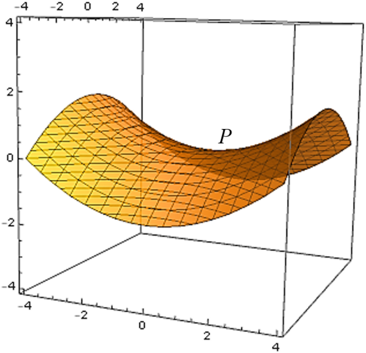
Ainsi, la condition nécessaire à l'existence d'un extremum est la suivante

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}\right) = (0, 0)$$

Cette condition est nécessaire mais pas suffisante. En effet, il existe des fonctions pour lesquelles $\dfrac{\partial f}{\partial x} = \dfrac{\partial f}{\partial y} = 0$ sans qu'il existe un extremum en ce point. Dans ce cas, on parle de point-selle.

Classification des points stationnaires

Bien que les deux tangentes soient horizontales, il est toujours possible de trouver un point situé au-dessus du point-selle et un autre au-dessous, ceci quelque soit le voisinage du point-selle considéré. Notons encore, qu'en un point-selle la fonction présente un minimum pour l'une des variables et un maximum pour l'autre variable.



Classification des points stationnaires

Il faut donc remplir une condition suffisante qui est la suivante :

$$D = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} - \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}\right)^2 > 0$$

Ainsi on obtient le résultat suivant :

Résultat. Soit $P(x_0, y_0, f(x_0, y_0))$ le point en lequel :

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial y} = 0$$

Alors si en ce point :

1. $\dfrac{\partial^2 f}{\partial x^2} > 0$ et $D > 0$, f possède un minimum au point P.
2. $\dfrac{\partial^2 f}{\partial x^2} < 0$ et $D > 0$, f possède un maximum au point P.
3. Si $D < 0$, f ne possède ni minimum ni maximum au point P, mais un point-selle.
4. Si $D = 0$, on ne peut rien conclure.

Classification des points stationnaires

Exemple 1. Soit la fonction $z = f(x_1, x_2) = -x_1^2 - x_2^2$. Les points stationnaires s'obtiennent en résolvant le système d'équations :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial f}{\partial x_1} = & 0 \\ \\ \dfrac{\partial f}{\partial x_2} = & 0 \end{cases}$$

c'est-à-dire :

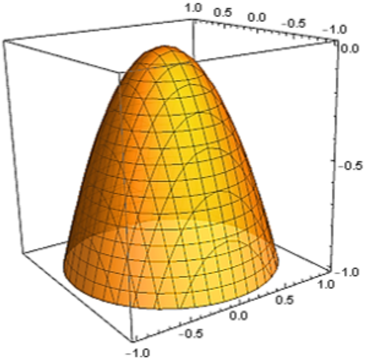
$$\begin{cases} -2x_1 = & 0 \\ -2x_2 = & 0 \end{cases} \Longleftrightarrow \begin{cases} x_1 = & 0 \\ x_2 = & 0 \end{cases}$$

Donc, il existe un point stationnaire qui $P = (0, 0, 0)$. Pour connaître la nature de ce point, il suffit d'appliquer le résultat précédent.

Ainsi on trouve :

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} = -2 < 0 \; et \; D = 4 > 0$$

Donc, $P = (0, 0, 0)$ est un maximum, comme le montre le graphe de la fonction f sur la figure.



Exemple 2. Soit $z = f(x_1, x_2) = 4x_1^2 - x_1x_2 + x_2^2 - x_1^3$
On résout le système suivant :

$$\begin{cases} 8x_1 - x_2 - 3x_1^2 & = 0 \\ -x_1 + 2x_2 & = 0 \end{cases}$$

Ainsi, on obtient deux points stationnaires : $P_1 = (0, 0, 0)$ et $P_2 = \left(\frac{5}{2}, \frac{5}{4}, \frac{125}{16}\right)$

1. Pour le point $P_1 = (0, 0, 0)$, nous avons :

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} = 8 > 0 \ et \ D = 4 > 0$$

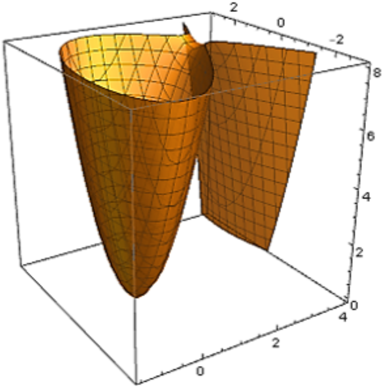
Donc le point $P_1 = (0, 0, 0)$ est un minimum.

2. Pour le point $P_2 = \left(\frac{5}{2}, \frac{5}{4}, \frac{125}{16}\right)$, nous avons :

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} = -7 < 0 \ et \ D = -15 < 0$$

Classification des points stationnaires

Il ne s'agit ni d'un minimum ni d'un maximum, mais d'un point-selle de la fonction. Comme le montre la figure.



Le point selle : Soit $x = \bar{x} + \alpha d \in \mathcal{R}$ au voisinage du point selle $\bar{x}$, la série de Taylor est donnée

$$f(x) = f(\bar{x}) + \frac{1}{2}\alpha^2 d^T H(\bar{x}) d + o(\alpha^2 \|d\|^2)$$

puisque $g(\bar{x}) = 0$. D'après la définition d'un point selle, il existe deux directions d_1 et d_2 telles que

$$f(\bar{x} + \alpha d_1) < f(\bar{x}) \text{ et } f(\bar{x} + \alpha d_2) > f(\bar{x})$$

Ainsi, on a

$$d_1^T H(\bar{x}) d_1 < 0 \text{ et } d_2^T H(\bar{x}) d_2 > 0$$

Du coup la matrice $H(\bar{x})$ doit être indéfinie.

Exemple 3. Trouver la nature des points stationnaires de

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

Solution. Les dérivées partielles premières de $f(x)$ sont

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = 3(x_1 - 2)^2 = 0 \text{ et } \frac{\partial f}{\partial x_2} = 3(x_2 - 3)^2 = 0$$

Ainsi, $\bar{x} = (2, 3)$. Donc le Hessien est donné par

$$H(x) = \begin{bmatrix} 6(x_1 - 2) & 0 \\ 0 & 6(x_2 - 3) \end{bmatrix}$$

En remplaçant, $\bar{x}$ en $H(x)$, on obtient $H(\bar{x}) = 0$.

Classification des points stationnaires

H est semi-définie, donc on passe aux troisièmes dérivées.
Toutes les dérivées troisièmes sont nulles sauf $\frac{\partial^3 f}{\partial x_1^3}$ est $\frac{\partial^3 f}{\partial x_2^3}$ qu'elles sont égal toute les deux à 6.
Pour le point $\bar{x}+\delta$, le quatrième terme de la série de Taylor est donnée par

$$\frac{1}{3!}\left(\delta_1^3\frac{\partial^3 f}{\partial x_1^3}+\delta_2^3\frac{\partial^3 f}{\partial x_2^3}\right)=\delta_1^3+\delta_2^3$$

qui est positive pour $\delta_1, \delta_2 > 0$ et négative pour $\delta_1, \delta_2 < 0$. Ainsi

$$f(\bar{x}+\delta) > f(\bar{x}) \text{ pour } \delta_1, \delta_2 > 0$$

et

$$f(\bar{x}+\delta) < f(\bar{x}) \text{ pour } \delta_1, \delta_2 < 0$$

Donc $\bar{x}$ n'est ni un minimum, ni un maximum, c'est un point selle.

Introduction

Selon la dimension de la fonction objectif à optimiser, il existe les méthodes **unidimensionnelles** et **multidimensionnelles** qui sont des méthodes déterministes. Les méthodes unidimensionnelles sont utilisées dans l'optimisation de fonctions à une seule variable. Deux grandes classes d'optimisation unidimensionnel existent : les méthodes de **Recherche Linéaire** (Line Search Methods) et les méthodes d'**approximation**, ces méthodes sont basées sur des techniques qui permettent de localiser le point minimal de la fonction à partir de réductions successives de l'intervalle de recherche. Parmi ces méthodes, citons la méthode de **Dichotomie**, la méthode de **Fibonacci**, la méthode de la **Section d'Or** et la méthode de **l'interpolation quadratique (parabolique)/cubique**.

Introduction

Un problème d'optimisation unidimensionnel est définit par

$$\min F = f(x)$$

où $f(x)$ est une fonction à une seule variable. Ce problème a une solution si $f(x)$ possède un seul minimum dans un intervalle considéré $x_L \leq x \leq x_U$, où x_L et x_U sont les limites inférieure et supérieure respectivement du minimiseur $\bar{x}$.
Dans les méthodes de Recherche Linéaire, $\bar{x}$ appartient à un intervalle $[x_L, x_U]$ appelé **intervalle d'incertitude**, le but est de réduire d'une manière itérative l'intervalle jusqu'à obtenir le plus petit intervalle $[x_{L,k}, x_{U,k}]$ qui contient $\bar{x}$.
Dans les méthodes approximatives, on fait une approximation de la fonction par un polynôme d'ordre 2 ou 3, en général, puis appliquer les méthodes classiques du calcul différentiel.

Fonctions unimodales

Définition

On dit qu'une fonction f est **unimodale** sur un intervalle réel $[A, B]$ si elle admet un minimum $\overline{\alpha} \in [A, B]$ et si $\forall \alpha_1 \in [A, B]$ et $\forall \alpha_2 \in [A, B]$ avec $\alpha_1 < \alpha_2$, on a :

1. $\alpha_2 \leq \overline{\alpha} \Longrightarrow f(\alpha_1) > f(\alpha_2)$
2. $\alpha_1 \geq \overline{\alpha} \Longrightarrow f(\alpha_1) < f(\alpha_2)$

Une fonction unimodale sur $[A, B]$ a donc la propriété d'avoir un minimum locale unique, mais , elle n'est pas nécessairement dérivable, ni même continue.

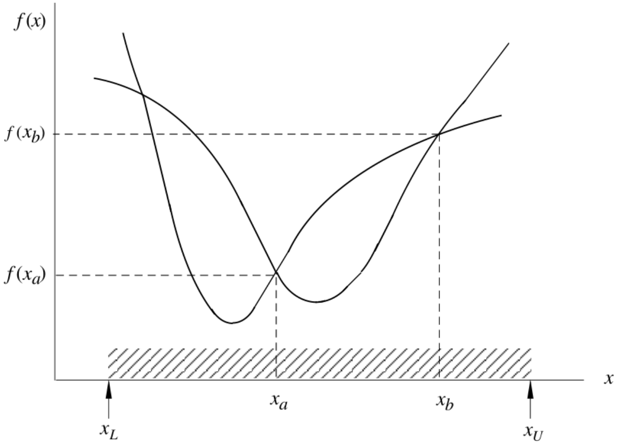
Objectif

Considérons une fonction uni-modale qui a pour minimum appartenant à l'intervalle $[x_L, x_U]$ qu'on doit le localiser. Supposons qu'on connaît la valeur de f en deux points $x_a, x_b \in [x_L, x_U]$. Ainsi, on aura 3 possibilités :

1. $f(x_a) < f(x_b)$
2. $f(x_a) > f(x_b)$
3. $f(x_a) = f(x_b)$

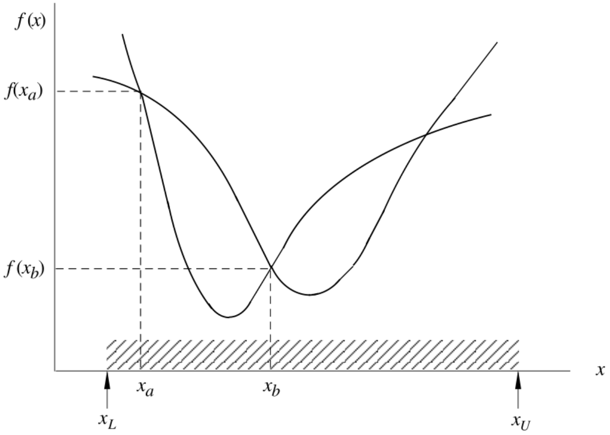
Objectif

Si on ai dans le premier cas ainsi, on aura soit $\bar{x} \in [x_L, x_a]$, soit $\bar{x} \in [x_a, x_b]$, donc il sera forcément dans $[x_L, x_b]$.



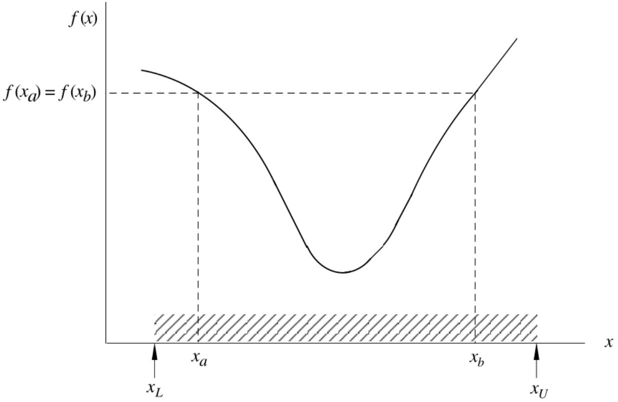
Objectif

Si on ai dans le second cas ainsi, on aura soit $\bar{x} \in [x_b, x_U]$, soit $\bar{x} \in [x_a, x_b]$, donc il sera forcément dans $[x_a, x_U]$.



Objectif

Si on ai dans le troisième cas ainsi, on aura $\bar{x} \in [x_a, x_b]$.



Algorithme de la méthode de dichotomie

1. **Donner** x_L, x_U et ϵ
2. **Initialiser** $k = 0$
3. **Calculer** $L = x_U - x_L$

   Répéter
   - $x_1 = \dfrac{x_L + x_U}{2}$
   - $\delta = 10^{-3} \times L$
   - $x_a = x_1 - \delta$
   - $x_b = x_1 + \delta$
   - $f(x_a)$ et $f(x_b)$
     - **Si** $f(x_a) < f(x_b)$ **alors** $x_U = x_b$
     - **Si** $f(x_a) > f(x_b)$ **alors** $x_L = x_a$
     - **Sinon** $x_L = x_a$ **et** $x_U = x_b$
   - **Calculer à nouveau** $L = x_U - x_L$
   - $k = k + 1$

   Tant que $L > \epsilon$
4. Donner $x_s = \dfrac{x_L + x_U}{2}$ et $f(x_s)$

Après k itérations, l'intervalle d'incertitude se réduit à

$$I_k = \left(\frac{1}{2}\right)^k I_0$$

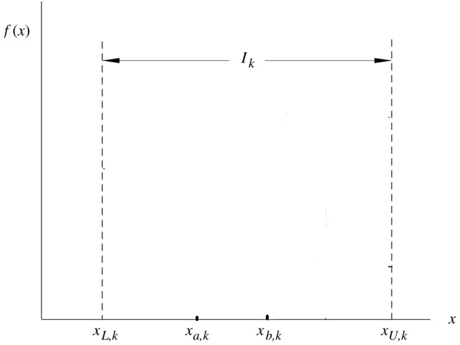
L'inconvénient de cette méthode est l'évaluation de la fonction f en deux points. Ainsi, la méthode de dichotomie n'est pas optimale, en ce sens que, pour un nombre fixé N de calcul de f, elle n'aboutit pas à l'intervalle réduit le plus petit possible. L'utilisation d'une suite de Fibonacci conduit à une méthode optimale.

Objectif

On considère un intervalle d'incertitude

$$I_k = [x_{L,k}, x_{U,k}]$$

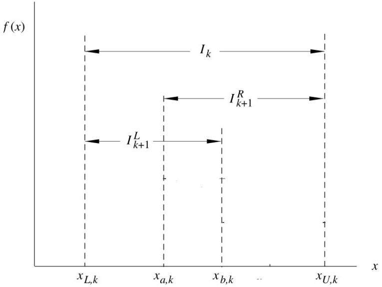
et soient $x_{a,k}$ et $x_{b,k}$ deux points de l'intervalle I_k.



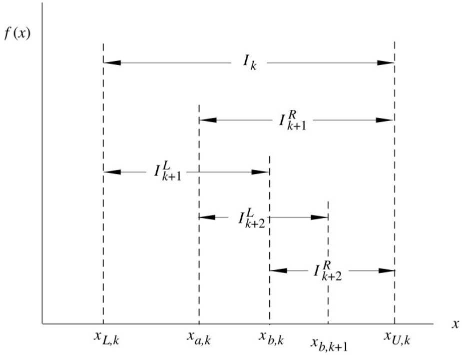
Objectif

Les valeurs de f aux pts $x_{a,k}$ et $x_{b,k}$ sont $f(x_{a,k})$ et $f(x_{b,k})$.

- Si $f(x_{a,k}) < f(x_{b,k})$, on choisi l'intervalle à gauche $I^L_{k+1} = [x_{L,k}, x_{b,k}]$.
- Si $f(x_{a,k}) > f(x_{b,k})$, on choisi l'intervalle à droite $I^R_{k+1} = [x_{a,k}, x_{U,k}]$.
- Si $f(x_{a,k}) = f(x_{b,k})$, on a soit I^L_{k+1} soit I^R_{k+1}.



Si le minimiseur appartient à l'intervalle I^R_{k+1} et que la valeur de $f(x)$ est connue en un point dans I^R_{k+1} noté $x_{b,k+1}$. Ceci est suffisant comme conditions pour pouvoir réduire l'intervalle I^R_{k+1}. Du coup, l'un des intervalles I^L_{k+2} et I^R_{k+2} va être choisi et ainsi de suite.



Objectif

D'après la figure précédente, on a

$$I_k = I_{k+1}^L + I_{k+2}^R$$

On suppose que

$$I_{k+1}^L = I_{k+1}^R = I_{k+1}$$
$$I_{k+2}^L = I_{k+2}^R = I_{k+2}$$

On obtient ainsi,

$$I_k = I_{k+1} + I_{k+2}$$

Si cette procédure est répéter plusieurs fois un ensemble d'intervalle va être généré comme suit :

$$I_1 = I_2 + I_3$$

$$I_2 = I_3 + I_4$$

$$\vdots$$

$$I_n = I_{n+1} + I_{n+2}$$

Dans ce système de n équations il existe $n+2$ variables. Si I_1 l'intervalle de départ est donné et en imposant $I_{n+2}=0$, on a

$$I_{n+1} = I_n - I_{n+2} = I_n \equiv F_0 I_n$$

$$I_n = I_{n+1} + I_{n+2} = I_n \equiv F_1 I_n$$

$$I_{n-1} = I_n + I_{n+1} = 2I_n \equiv F_2 I_n$$

$$I_{n-2} = I_{n-1} + I_n = 3I_n \equiv F_3 I_n$$

$$I_{n-3} = I_{n-2} + I_{n-1} = 5I_n \equiv F_4 I_n$$

$$I_{n-4} = I_{n-3} + I_{n-2} = 8I_n \equiv F_5 I_n$$

$$\vdots$$

$$I_1 = I_2 + I_3 = F_n I_n$$

Objectif

Une suite est générée et est appelée *suite de Fibonacci* définie par

$$\{F_0, F_1, F_2, F_3, F_4, F_5, F_6, ...\} = \{1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, ...\}$$

Ce qui donne une relation récursive de la forme

$$F_k = F_{k-1} + F_{k-2} \text{ pour } k \geq 2$$

où $F_0 = F_1 = 1$. Si le nombre d'itération est supposé être n, alors la recherche par Fibonacci réduit l'intervalle d'incertitude à

$$I_n = \frac{I_1}{F_n}$$

1. **Entrer** $x_{L,1}$, $x_{U,1}$ et n
2. **Calculer** F_1, F_2,..., F_n
3. $I_1 = x_{U,1} - x_{L,1}$ **et calculer** $I_2 = \dfrac{F_{n-1}}{F_n} I_1$

$$x_{a,1} = x_{U,1} - I_2 \ , \ x_{b,1} = x_{L,1} + I_2$$

$$f_{a,1} = f\left(x_{a,1}\right) \ , \ f_{b,1} = f\left(x_{b,1}\right)$$

et on pose $k = 1$

4. **Calculer** $I_{k+2} = \dfrac{F_{n-k+1}}{F_n - k} I_{k+1}$
   - **Si** $f_{a,k} \geq f_{b,k}$ **mettre à jour**

$$x_{L,k+1} = x_{a,k} \ , \ x_{U,k+1} = x_{U,k} \ , \ x_{a,k+1} = x_{b,k}$$

$$x_{b,k+1} = x_{L,k+1} + I_{k+2} \ , \ f_{a,k+1} = f_{b,k} \ , \ f_{b,k+1} = f\left(x_{b,k+1}\right)$$

- **Si $f_{a,k} < f_{b,k}$ mettre à jour**

$$x_{L,k+1} = x_{L,k} \ , \ x_{U,k+1} = x_{b,k} \ , \ x_{a,k+1} = x_{U,k+1} - I_{k+2}$$

$$x_{b,k+1} = x_{a,k} \ , \ f_{a,k+1} = f_{a,k} \ , \ f_{a,k+1} = f\left(x_{a,k+1}\right)$$

5. **Si $k = n - 2$ ou $x_{a,k+1} > x_{b,k+1}$ donner $\bar{x} = x_{a,k+1}$ et $\bar{f} = f(\bar{x})$ puis sortir**
   Sinon $k = k + 1$ puis aller à l'étape 4

Inconvénients

Le défaut de cette méthode est de fixer le nombre d'itérations à l'avance.
Si l'on connaît pas toujours a priori le nombre n de calculs que l'on désire effectuer, on peut utiliser la méthode du nombre d'or.

Objectif

Suivant le même principe que la méthode de Fibonacci, elle consiste a prendre les longueurs des intervalles successifs dans un rapport fixe :

$$\frac{I_1}{I_2} = \frac{I_2}{I_3} = \frac{I_3}{I_4} = \cdots = \gamma$$

de telle sorte qu'à l'étape $k+1$ la disposition relative des points soit la même que celle de l'étape k.

$$I_k = I_{k+1} = I_{k+2}$$

et si l'on impose :

$$\frac{I_k}{I_{k+1}} = \frac{I_{k+1}}{I_{k+2}} = \gamma$$

on en déduit :

$$\frac{I_k}{I_{k+1}} = 1 + \frac{I_{k+2}}{I_{k+1}}$$

Objectif

Soit $\gamma = 1 + \dfrac{1}{\gamma}$ ou encore $\gamma^2 - \gamma - 1 = 0$, équation dont la racine positive est le *nombre d'or* :

$$\gamma = \frac{\sqrt{5}+1}{2} \approx 1,618$$

Bien sûr, la méthode du nombre d'or n'est pas optimale, mais on vérifie sans peine que pour un nombre suffisamment élevé n de calculs de la fonction f, elle conduit asymptotiquement à la même disposition de points que la méthode de Fibonacci.
En effet, on a :

$$\lim_{n \longrightarrow +\infty} \frac{F_n}{F_{n-1}} = \gamma$$

1. **Entrer** $x_{L,1}$, $x_{U,1}$ et ϵ
2. $I_1 = x_{U,1} - x_{L,1}$, $\gamma = 1,618$ **et calculer** $I_2 = \dfrac{I_1}{\gamma}$
   $x_{a,1} = x_{U,1} - I_2$, $x_{b,1} = x_{L,1} + I_2$, $f_{a,1} = f\left(x_{a,1}\right)$ et $f_{b,1} = f\left(x_{b,1}\right)$ **et on pose** $k = 1$
3. **Calculer** $I_{k+2} = \dfrac{I_{k+1}}{\gamma}$
   - **Si** $f_{a,k} \geq f_{b,k}$ **mettre à jour**

     $$x_{L,k+1} \;,\; x_{U,k+1} \;,\; x_{a,k+1} \;,\; x_{b,k+1} \;,\; f_{a,k+1} \text{ et } f_{b,k+1}$$

   - **Si** $f_{a,k} < f_{b,k}$ **mettre à jour les mêmes quantités**
4. **Si** $I_k < \epsilon$ ou $x_{a,k+1} > x_{b,k+1}$ **faire**
   - **Si** $f_{a,k+1} > f_{b,k+1}$ **calculer**

     $$\bar{x} = \frac{x_{b,k+1} + x_{U,k+1}}{2}$$

- **Si** $f_{a,k+1} = f_{b,k+1}$ **calculer**

$$\bar{x} = \frac{x_{a,k+1} + x_{b,k+1}}{2}$$

- **Si** $f_{a,k+1} < f_{b,k+1}$ **calculer**

$$\bar{x} = \frac{x_{L,k+1} + x_{a,k+1}}{2}$$

calculer $\bar{f} = f(\bar{x})$ **puis sortir**
Sinon $k = k + 1$ **puis aller à l'étape 3**

Exercice.
Pour la fonction $f(x) = e^{x(x-1)}$, effectuez trois itérations des deux algorithmes (dichotomie, Fibonacci et section d'or) à partir de l'intervalle initial $[-1, 1]$ avec un $\epsilon = 10^{-3}$.

Objectif

En optimisation unidimensionnelle, la méthode d'interpolation quadratique consiste à approximer l'expression de la fonction objectif par un polynôme du second ordre

$$p(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$$

où a_0, a_1 et a_2 sont constantes. Soit

$$p(x_i) = a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 = f(x_i) = f_i ...(\star)$$

pour $i = 1, 2, 3$ où $[x_1, x_3]$ est l'intervalle qui contient le minimiseur de $f(x)$.
Considérons que les valeurs de f_i sont connues, ainsi a_0, a_1 et a_2 peuvent être déduite par la solution du système $(\star)$.

Objectif

La première dérivée de $p(x)$ est donnée par :

$$p'(x) = a_1 + a_2 x$$

Si $p'(x) = 0$ et $a_2 \neq 0$ alors le minimiseur de $p(x)$ est déduit par

$$x^\star = -\frac{a_1}{2a_2}$$

En résolvant simultanément les équations du système $(\star)$, on trouve

$$a_1 = -\frac{\left(x_2^2 - x_3^2\right) f_1 + \left(x_3^2 - x_1^2\right) f_2 + \left(x_1^2 - x_2^2\right) f_3}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)(x_2 - x_3)}$$

$$a_2 = \frac{(x_2 - x_3) f_1 + (x_3 - x_1) f_2 + (x_1 - x_2) f_3}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)(x_2 - x_3)}$$

Objectif

Ainsi

$$x^{\star} = -\frac{\left(x_2^2 - x_3^2\right) f_1 + \left(x_3^2 - x_1^2\right) f_2 + \left(x_1^2 - x_2^2\right) f_3}{2\left[\left(x_2 - x_3\right) f_1 + \left(x_3 - x_1\right) f_2 + \left(x_1 - x_2\right) f_3\right]}$$

Si $p(x)$ est une bonne approximation de $f(x)$, alors $x^{\star}$ sera une bonne estimé de $\bar{x}$.

Interpolation en deux points. Ici, on considère que les valeurs de $f(x)$ et de ces premières dérivées sont connues en deux points distincts. On peut écrire :

$$p(x_1) = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_1^2 = f(x_1) \equiv f_1$$

$$p(x_2) = a_0 + a_1 x_2 + a_2 x_2^2 = f(x_2) \equiv f_2$$

$$p'(x_1) = a_1 + 2a_2 x_1 = f'(x_1) \equiv f_1'$$

Objectif

La solution de ces équations donne a_1 et a_2, ainsi $x^\star = -\dfrac{a_1}{2a_2}$.

$$x^\star = x_1 + \frac{f_1'(x_2 - x_1)^2}{2[f_1 - f_2 + f_1'(x_2 - x_1)]}$$

Maintenant si la dérivée est connue en deux points x_1 et x_2 alors

$$x^\star = x_2 + \frac{f_2'(x_2 - x_1)}{f_1' - f_2'}$$

1. **Entrer x_1, x_3 et ϵ et poser $x_0^\star = 10^{99}$.**
2. **Calculer $x_2 = \dfrac{x_1 + x_3}{2}$ et $f_i = f(x_i)$ et $i = 1, 2, 3$.**
3. **Calculer $x^\star$ et $f^\star = f(x^\star)$.**
   Si $|x^\star - x_0^\star| < \epsilon$, alors $\bar{x} = x^\star$ et $f(\bar{x}) = f^\star$, et arrêt.
4. **Si $x_1 < x^\star < x_2$ alors faire :**
   si $f^\star \leq f_2$, affecter $x_3 = x_2$, $f_3 = f_2$, $x_2 = x^\star$, $f_2 = f^\star$;
   sinon, si $f^\star > f_2$, affecter $x_1 = x^\star$, $f_1 = f^\star$.
   Si $x_2 < x^\star < x_3$ alors faire :
   si $f^\star \leq f_2$, affecter $x_1 = x_2$, $f_1 = f_2$, $x_2 = x^\star$, $f_2 = f^\star$;
   sinon, si $f^\star > f_2$, affecter $x_3 = x^\star$, $f_3 = f^\star$.
   Poser $x_0^\star = x^\star$, puis répéter à partir de l'étape 3

Introduction

Les méthodes multidimensionnelles sont consacrées à l'optimisation de fonction à un paramètre ou plus. Elles peuvent être classées selon l'information sur la fonction qu'elles utilisent. Elles sont dites *d'ordre 0*, si elles n'utilisent que la valeur de la fonction. Elles sont dites *d'ordre 1*, si elles nécessitent en plus le gradient de la fonction. Elles sont dites *d'ordre 2*, si elles utilisent le gradient et le héssien de la fonction.

Les méthodes d'ordre 0 sont en général peu précises et convergent très lentement vers l'optimum. Par contre, elles offrent l'avantage de se passer du calcul du gradient, ce qui peut être très intéressant lorsque la fonction n'est pas différentiable ou lorsque le calcul de son gradient est complexe ou représente un coût important.

Introduction

Les méthodes d'ordre 1 permettent d'accélérer la localisation de l'optimum, car le gradient donne une information sur la direction de recherche de la solution. Par contre, elles ne sont applicables qu'aux problèmes dans lesquels la fonction est continûment différentiable.

Les méthodes multidimensionnelles peuvent être divisées en deux groupes, d'une part, les méthodes analytiques ou de descente, et d'autre part, les méthodes heuristiques ou géométriques.

Les méthodes analytiques se basent sur la connaissance d'une direction de recherche, souvent donnée par le gradient de la fonction. Les exemples les plus signifcatifs de méthodes analytiques sont **les méthodes de descente (gradient à pas fixe/gradient à pas optimal), la méthode du Gradient Conjugué et les méthodes Newton/Quasi-Newton**.

Introduction

Nous allons maintenant nous intéresser aux algorithmes de calcul de minimum et plus particulièrement aux algorithmes de descente. Partant d'un point x_0 arbitrairement choisi, un algorithme de descente va chercher à générer une suite d'itérés $(x_k)_k \in \mathbb{N}$ telle que :

$$\forall k \in \mathbb{N}, f(x_{k+1}) \leq f(x_k)$$

Commençons par définir plus précisément la notion de descente.

Le gradient joue un rôle essentiel en optimisation.Dans le cadre des méthodes d'optimisation, il sera également important d'analyser le comportement de la fonction objectif dans certaines directions. Commençons pour cela par rappeler le concept de dérivée directionnelle :

Définition

Soit $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ une application continue. Soit $x \in \mathbb{R}^n$ et $d \in \mathbb{R}^n$. La dérivée directionnelle de f en x dans la direction d est définie par :

$$df(x;d) := \lim_{t \to 0^+} \frac{f(x+td) - f(x)}{t}$$

si cette limite existe.

Proposition

Si f est différentiable en un point $x \in \mathbb{R}^n$, alors pour tout $d \neq 0$, f admet une dérivée dans la direction d en x et :

$$df(x; d) = Df(x)(d) = \nabla f(x)^T d$$

La dérivée directionnelle donne des informations sur la pente de la fonction dans la direction d, tout comme la dérivée donne des informations sur la pente des fonctions à une variable. En particulier,

- si $df(x; d) > 0$ alors f est croissante dans la direction d.
- si $df(x; d) < 0$ alors f est décroissante dans la direction d.

Dans ce dernier cas, on dira que d est une direction de descente de f.

Définition (Direction de descente)

Soient $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ et $x \in \mathbb{R}^n$. Le vecteur $d \in \mathbb{R}^n$ est une dircetion de descente pour f à partir du point x si $t \to f(x+td)$ est décroissante en $t=0$, c'est-à-dire s'il existe $\eta > 0$ tel que :

$$\forall 0 < t \leq \eta, f(x+td) < f(x)$$

Parmi toutes les directions de descente existantes en un point x donné, il est naturel de s'intéresser à celle où la pente est la plus forte. Un résultat remarquable montre que cette direction est donnée par le gradient (ou plus exactement son opposé).

Théorème

Soit $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ différentiable. Soit $x \in \mathbb{R}^n$. Alors pour toute direction d de norme constante égale à $\|d\| = \|\nabla f(x)\|$, on a :

$$(-\nabla f(x))^T \nabla f(x) \leq d^T \nabla f(x)$$

Partant d'un point x_0 arbitrairement choisi, un algorithme de descente va chercher à générer une suite d'itérés $(x_k)_{k\in\mathbb{N}}$ telle que :

$$\forall k \in \mathbb{N}, f(x_{k+1}) \leq f(x_k)$$

D'après la caractérisation de la descente, il s'agit donc à chaque itération k, de trouver un point x_{k+1} dans une direction d vérifiant : $\nabla f(x_k)^T d < 0$.
Le schéma général d'un algorithme de descente est le suivant :

Algorithme

Données : f supposé au moins différentiable, x_0 point initial arbitrairement choisi.
Sortie : une approximation de la solution du problème : $\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$.

1. k=0
2. Tant que "test de convergence" non satisfait
   1. Trouver une direction de descente d_k telle que $\nabla f(x_k)^T d < 0$.
   2. *Recherche linéaire* : Choisir un pas $\alpha_k > 0$ à faire dans la direction d_k tel que : $f(x_k + \alpha_k d_k) \leq f(x_k)$.
   3. Mise à jour : $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$; $k = k + 1$
3. Retourner x_k

Test de convergence/Test d'arrêt

Soit $\bar{x}$ un point de minimum local du critère f à optimiser. Supposons que l'on choisisse comme test d'arrêt dans l'algorithme de descente, le critère idéal : $x_k = \bar{x}$. Dans un monde idéal (i.e. en supposant tous les calculs exacts et la capacité de calcul illimitée), soit l'algorithme s'arrête après un nombre fini d'itérations, soit il construit (théoriquement) une suite infinie x_1, x_2,..., x_k,... de points de $\mathbb{R}^n$ qui converge vers $\bar{x}$.

En pratique, un test d'arrêt devra être choisi pour garantir que l'algorithme s'arrête toujours après un nombre fini d'itérations et que le dernier point calculé soit suffisamment proche de $\bar{x}$.

Soit $\epsilon > 0$ la précision demandée. Plusieurs critères sont à notre disposition : tout d'abord (et c'est le plus naturel), un critère d'optimalité basé sur les conditions nécessaires d'optimalité du premier ordre : on teste si

$$\|\nabla f(x_k)\| < \epsilon$$

auquel cas l'algorithme s'arrête et fournit l'itéré courant x_k comme solution.

En pratique, le test d'optimalité n'est pas toujours satisfait et on devra faire appel à d'autres critères (fondés sur l'expérience du numérique) :

- Stagnation de la solution : $\|x_{k+1} - x_k\| < \epsilon \|x_k\|$.
- Stagnation de la valeur courante : $|f(x_{k+1}) - f(x_k)| < \epsilon |f(x_k)|$

- Nombre d'itérations dépassant un seuil fixé à l'avance : $k < kmax$.

et généralement une combinaison de ces critères :

Critère d'arrêt = Test d'optimalité satisfait
OU (Stagnation de la valeur courante et Stagnation de la solution)
OU Nombre maximum d'itérations autorisées dépassé.

Convergence et vitesse de convergence

Étudier la convergence d'un algorithme, c'est étudier la convergence de la suite des itérés générés par l'algorithme. Un algorithme de descente selon le modèle précédent,est dit convergent si la suite de ses itérés $(x_k)_{k\in\mathbb{N}}$ converge vers un point limite $\bar{x}$, solution du problème :

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

De plus, la convergence est dite *locale* si elle n'a lieu que pour des points initiaux x_0 dans un voisinage de $\bar{x}$. Sinon elle est dite *globale*.
En pratique, le but d'un algorithme d'optimisation ne sera que de trouver un point critique. On introduit alors la notion de convergence globale d'un algorithme d'optimisation :

Définition

Soit un algorithme itératif qui génère une suite $(x_k)_{k\in\mathbb{N}}$ dans $\mathbb{R}^n$ afin de résoudre le problème :

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

où $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ est une application de classe C^1. L'algorithme est dit *globalement convergent* si quel que soit le point initial $x_0 \in \mathbb{R}^n$,

$$\lim_{k\to+\infty} \|\nabla f(x_k)\| = 0$$

Cette propriété garantit que le critère d'arrêt "$\|\nabla f(x_k)\| \leq \epsilon$" sera satisfait à partir d'un certain rang quelle que soit la précision $\epsilon > 0$ demandée.

Il est bien entendu très important de garantir la convergence d'un algorithme sous certaines hypothèses, mais la vitesse de convergence et la complexité sont également des facteurs à prendre en compte lors de la conception ou de l'utilisation d'un algorithme ; en effet, on a tout intérêt à ce que la méthode choisie soit à la fois rapide, précise et stable. Pour cela, on introduit les notions de vitesse (ou taux) de convergence qui mesurent l'évolution de l'erreur commise $\|x_k - \bar{x}\|$.

Définition

Soit $(x_k)_{k\in\mathbb{N}}$ une suite d'itérés générées par un algorithme convergent donné. On note $\bar{x}$ la limite de la suite $(x_k)_{k\in\mathbb{N}}$ et on suppose : $\forall k \in \mathbb{N}, x_k \neq \bar{x}$ (sinon l'algorithme convergerait en un nombre fini d'itérations). La convergence de l'algorithme est dite :

- **linéaire** si l'erreur $e_k = \|x_k - \bar{x}\|$ décroît linéairement i.e. s'il existe $\tau \in]0,1[$ tel que :

$$\lim_{k\to+\infty} \frac{\|x_{k+1} - \bar{x}\|}{\|x_k - \bar{x}\|} = \tau$$

- **superlinéaire** si

$$\lim_{k\to+\infty} \frac{\|x_{k+1} - \bar{x}\|}{\|x_k - \bar{x}\|} = 0$$

Définition (suite)

- d'ordre p s'il existe $\tau \geq 0$ tel que :

$$\lim_{k \to +\infty} \frac{\|x_{k+1} - \bar{x}\|}{\|x_k - \bar{x}\|^p} = \tau$$

En particulier, si $p = 2$, la convergence est dite **quadratique** (grosso modo à partir d'un certain rang, le nombre de chiffres significatifs exacts double à chaque itération).

Bien entendu, on a intérêt à ce que la convergence d'un algorithme soit la plus élevée possible afin de converger vers la solution en un minimum d'itérations pour une précision donnée.

Algorithme de descente du gradient

Soit $x_k \in \mathbb{R}^n$ l'itéré courant. Étant donnés la valeur $f(x_k)$ et le gradient $\nabla f(x_k)$, on remplace f au voisinage de x_k par son développement de Taylor au premier ordre :

$$f(x_k + d) \approx f(x_k) + \nabla f(x_k)^T d$$

On voudrait que la dérivée directionnelle $\nabla f(x_k)^T d$ soit la plus petite possible dans un voisinage de $d = 0$. On cherche donc à résoudre :

$$\min_{d \in \mathbb{R}^n} \nabla f(x_k)^T d \text{ s.c. } \|d\| = \|\nabla f(x_k)\|$$

dont la solution nous est donnée par :

$$d_k = -\nabla f(x_k)$$

Le choix de la direction de plus forte descente définit une famille d'algorithmes appelés algorithmes de descente de gradient dont le schéma est le suivant :

Algorithme

Données : f , x_0 ppremière approximation de la solution cherchée, $\epsilon > 0$ précision demandée.
Sortie : une approximation $x^\star$ de la solution de : $\nabla f(x) = 0$.

1. k=0
2. Tant que le critère d'arrêt non satisfait
   1. Direction de descente $d_k = -\nabla f(x_k)$.
   2. *Recherche linéaire* : Trouver un pas $\alpha_k > 0$ tel que : $f(x_k + \alpha_k d_k) < f(x_k)$.
   3. $x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)$; $k = k + 1$
3. Retourner x_k

Il reste maintenant à définir une stratégie de recherche linéaire pour le calcul du pas. Nous étudions ici en première approche une méthode à pas optimal, puis une à pas fixe.

Une idée naturelle consiste à suivre la direction de plus forte descente et à faire un pas qui rende la fonction à minimiser la plus petite possible dans cette direction. Cette méthode est appelée **méthode de gradient à pas optimal** ou encore **méthode de plus forte pente**. L'étape 2.1 de l'algorithme de descente de gradient est alors remplacée par :

Recherche linéaire exacte

2.1. Calculer un pas optimal α_k solution de :

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

La méthode de plus forte pente est une sorte d'idéalisation : d'une part, nous ne savons pas en pratique calculer de façon exacte un point minimum α_k de l'objectif dans une direction donnée et le problème n'est en général pas trivial. D'autre part, la résolution du problème de minimisation unidimensionnel de l'étape 2.1, même de façon approchée, coûte cher en temps de calcul. Pour ces raisons, on peut lui préférer parfois l'algorithme de gradient à pas constant (ou à pas fixe).

Méthode de gradient à pas fixe

L'idée est très simple : on impose une fois pour toutes, la taille du pas effectué selon la direction de descente calculée à chaque itération. Les itérations 2.2 et 2.3 de l'algorithme de descente de gradient sont alors remplacées par :

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

Méthode de la plus forte pente avec Hessien

Si le hessien de $f(x)$ existe et peut être calculé, la valeur α qui minimise $f(x_k + \alpha d)$ peut être déterminée en utilisant un méthode analytique.
Si $\delta_k = \alpha d_k$ et en posant $\nabla f(x_k) = g_k$, alors le développement de la série de Taylor à l'ordre 2 est donnée par :

$$f(x_k + \delta_k) \approx f(x_k) + \delta_k^T g_k + \frac{1}{2}\delta_k^T H_k \delta_k$$

et si d_k est la direction de la plus forte pente, i.e.

$$\delta_k = -\alpha g_k$$

on obtient

$$f(x_k - \alpha g_k) \approx f(x_k) - \alpha g_k^T g_k + \frac{1}{2}\alpha^2 g_k^T H_k g_k$$

Méthode de la plus forte pente avec Hessien

En dérivant par rapport à α et en posant le résultat égal à zéro, on a :

$$\frac{df(x_k - \alpha g_k)}{d\alpha} \approx -g_k^T g_k + \alpha g_k^T H_k g_k = 0$$

Ainsi

$$\alpha = \alpha_k \approx \frac{g_k^T g_k}{g_k^T H_k g_k}$$

Par suite,

$$x_{k+1} = x_k - \frac{g_k^T g_k}{g_k^T H_k g_k} g_k$$

Convergence et vitesse de convergence

Si $f(x) \in C^2$ admet un minimum au moins local $\bar{x}$ et son hessien est D.P. au point $x = \bar{x}$, alors on peut montrer que si x_k est suffisamment proche de $\bar{x}$, on a :

$$f(x_{k+1}) - f(\bar{x}) \leq \left(\frac{1-r}{1+r}\right)^2 [f(x_k) - f(\bar{x})]$$

où

$$r = \frac{\text{La plus petite valeur propre de } H_k}{\text{La plus grande valeur propre de } H_k}$$

Ainsi la méthode de la plus forte pente converge linéairement avec un taux de convergence

$$\tau = \frac{1-r}{1+r}$$