



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE IBN KHALDOUN - TIARET

MEMOIRE

Présenté à:

FACULTÉ MATHÉMATIQUES ET INFORMATIQUE
DÉPARTEMENT DE MATHÉMATIQUES

Pour l'obtention du diplôme de:

MASTER

Spécialité : Analyse Fonctionnelle et Équations Différentielles

Par:

BAACHI HICHAM
HIRECHE ABDELHAK
YAHY RACHID
Sur le thème

Résolution d'un problème d'optimisation par méthode du gradient conjugué

Soutenu publiquement le 17 / 07 / 2021 à Tiaret devant le jury composé de:

Mr A. Larabi	MCA Université de Tiaret	Président
Mr N.Rezzoug	MAA Université de Tiaret	Encadreur
Mr K. Maazouz	MCB Université de Tiaret	Examineur

2020-2021

★ ————— *Remerciements* ————— ★

En préambule à ce mémoire nous remercions ALLAH qui nous
aide et nous donne.

Nous tenons à remercier sincèrement Mr N. Rezzoug en tant que
Encadreur, qui a toujours montré à l'écouter et très disponible
tout au long de la réalisation de ce mémoire.

Nos remerciements les plus chaleureux vont à Mr A. Larabi, doyen
de la Faculté de mathématiques et informatique, pour nous avoir
honoré de présider le jury de notre mémoire.

Nous également remercions beaucoup Mr K. Maazouz, professeur
au Département de Mathématiques de l'Université Ibn Khaldoun
de Tiaret, pour l'honneur qu'il nous a fait en acceptant
d'examiner ce mémoire.

Enfin, nous adressons nos remerciements à tous nos proches et nos
amis, qui nous ont toujours soutenues et encouragés au cours de la
réalisation de ce mémoire. Merci à tous.

————— ★ ★ ★ —————

★ ————— *Dédicaces* ————— ★

C'est avec grande plaisir que je dédie ce modeste travail

Al plus chère de ma vie, ma Mère.

A celui qui m'a fait de moi un homme, mon Père

A mes chers frères et sœurs

A tous mes amis de promotion de 2 ème année master
mathématiques

A tous les membres de ma famille et toute personne qui porte le
nom BAACHI

Je dédie ce travail a tous ceux ont participé à ma réussite

————— *Baachi Hicham* —————

★ ————— *Dédicaces* ————— ★

Je dédie ce mémoire

A mes parents, qui sont la source de ma réussite, pour leurs
encouragements et leurs sacrifices, à mes frères et soeurs

Je vous remercie pour votre confiance, votre soutien

Je ne sais pas comment vous remercier.

A mes chers amis qui m'ont soutenu et encouragé durant ces
années d'études.

————— *Hireche Abdelhak* —————

★ ————— *Dédicaces* ————— ★

A celle qui a attendu avec patience les fruits de sa bonne
éducation et de ses dévouements,

A ma chère mère.

A celui qui a changé la nuit en jour pour m'assurer les bonnes
conditions,

A mon cher père.

A ma petite famille qui m'a toujours soutenue.

A tous mes collègues amis.

Je dédie ce modeste travail.

————— *Yahi Rachid* —————

TABLE DES MATIÈRES

1	Préliminaires	6
1.1	Différentiabilité, dérivées partielles et dérivées directionnelles	6
1.2	Gradient et Matrice Hessienne	7
1.3	Direction de descente	7
1.4	Formule de Taylor	8
1.4.1	Formule de Taylor avec reste intégral	8
1.4.2	Formule de Taylor-Lagrange	9
1.4.3	Formule de Taylor-Young	9
1.5	Ensembles convexes	10
1.6	Fonctions convexes	11
1.7	Conditions nécessaires et suffisantes d'optimalité	13
1.7.1	Conditions nécessaires d'optimalité	13
1.7.2	Conditions suffisantes d'optimalité	15
2	Recherches linéaires	16
2.1	Forme générale d'un problème d'optimisation	16
2.2	Problème d'optimisation sans contraintes	16
2.2.1	Problème d'optimisation avec contraintes	17
2.3	Méthodes à directions de descente	17
2.3.1	Principe général	17
2.3.2	L'algorithme de méthode à directions de descente	18
2.4	Recherche linéaire d'Armijo	19

2.4.1	Principe de la méthode	19
2.4.2	Algorithme (règle d'Armijo)	20
2.5	Recherche linéaire de Goldstein	21
2.5.1	Principe de la méthode	21
2.5.2	L'algorithme de Goldstein	22
2.6	Recherche linéaire de Wolfe	23
2.6.1	Recherche linéaire de Wolfe	23
2.6.2	Recherche linéaire de Wolfe forte	23
2.6.3	L'algorithme de Wolfe	24
3	Méthode du gradient conjugué	25
3.1	Optimisation quadratique sans contraintes	25
3.1.1	Définitions et théorèmes fondamentaux	25
3.1.2	Calcul du pas obtenu par une recherche linéaire exacte	26
3.2	Méthode des gradient conjugué	28
3.2.1	Définition et propriété générale	28
3.2.2	L'algorithme du gradient conjugué	28
3.3	Méthode du gradient conjugué, cas quadratique	33
3.3.1	Algorithme de la méthode du gradient conjugué, cas quadratique	34
3.3.2	Propriétés du gradient conjugué quadratique	34
3.3.3	Convergence de l'algorithme de la méthode du gradient conjugué quadratique	36
3.4	Méthode du gradient conjugué, cas non-quadratique	37
3.4.1	Différentes formes du gradient conjugué	37
3.4.2	Méthode du gradient conjugué non quadratique	38
3.5	Théorème de Zoutendijk	45
3.6	Utilisation du théorème de Zoutendijk pour démontrer la convergence globale	46
3.7	Convergence de méthode du gradient conjugué	47
3.7.1	Méthode de Dai-Yuan	48

\mathbb{R}	L'ensemble des nombres réels.
\mathbb{R}^n	$\overbrace{\mathbb{R} \times \mathbb{R} \times \dots \times \mathbb{R}}^{n \text{ fois}}$
\mathbb{R}^+	L'ensemble des nombres réels positifs.
\mathbb{C}	L'ensemble des nombres complexes.
$\ \cdot\ $	La norme euclidienne.
$\langle \cdot, \cdot \rangle$	Produit scalaire.
$\mathcal{L}(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$	L'ensemble des fonctions linéaires de \mathbb{R}^n dans \mathbb{R} .
A^T	Transposée d'une matrice A .
$\frac{\partial f}{\partial x}$	La dérivée de f suivant la variable x .
$\frac{\partial f}{\partial x \partial y}$	La dérivée de $\frac{\partial f}{\partial y}$ suivant la variable x .
$f(x) = o(g(x))$	$\lim \frac{f(x)}{g(x)} = 0$.
$\mathcal{M}_{n,n}(\mathbb{R})$	L'ensemble des matrices de n ligne et n colonne.
$\nabla f(x)$	Gradient de la fonction f .
$D^2 f(a)$	Matrice hessienne.
\hat{x}	Solution optimale.
(PQSC)	Problème quadratique sans contraintes.
(PNQSC)	Problème non quadratique sans contraintes.
(FR)	Fletcher Reeves.
(PRP)	Polak-Ribière-Polyak.
(DY)	Dai-Yuan.
(HZ)	Hestenes-Stiefel.
(DY)	Conjugate Descent Method.

L'optimisation est une branche importante et un outil inévitable pour les sciences de la décision et l'analyse des systèmes physiques. Les ingénieurs, les économistes, les décideurs se heurtent quotidiennement, quel que soit leur secteur d'activité, à des problèmes d'optimisation. Il peut s'agir de minimiser un cout de production, d'optimiser le parcours d'un véhicule, de rationaliser l'utilisation de ressources, d'améliorer les performances d'un circuit électronique et de fournir une aide à la décision à des gestionnaires, etc.

En toute généralité, un problème d'optimisation consiste à déterminer la plus petite (ou grande) valeur possible d'une fonction réelle $f : C \rightarrow \mathbb{R}$ dite fonction objective peut prendre dans un ensemble C nommé domaine des contraintes ou ensemble des solutions réalisables.

Les problèmes d'optimisation sont divisés naturellement en deux catégories : ceux avec des variables continues, et ceux avec des variables discrètes. Dans l'optimisation continue qui fait l'objet de notre recherche, on considère l'ensemble des solutions réalisables l'ensemble \mathbb{R} . Ces deux types de problèmes ont des champs d'applications variés, les méthodes de résolution sont différentes. Dans l'optimisation continue, on s'intéresse à des notions comme la convexité, la différentiabilité, l'existence et l'unicité d'une solution, les conditions nécessaires et les conditions suffisantes d'optimalité.

L'étude des problèmes semi définie positive est en effet devenue très récemment un axe à part entière de la recherche mathématique, l'intérêt est justifié par ses différents champs d'application. L'objectif générale de ce mémoire est l'utilisation de la méthode du gradient conjugué pour résoudre un problème d'optimisation continue. Notre travail est formalisé en trois chapitres.

Dans le premier chapitre on donne des généralités sur la différentiabilité, formules de Taylor et la convexité, puis on présente les conditions nécessaires et suffisantes d'optimalité.

Le deuxième chapitre est consacré à les recherches linéaires inexactes d'Armijo, Goldstein et Wolfe.

Dans le dernier chapitre on étudie la méthode du gradient conjugué quadratique et non quadratique et on termine ce chapitre par Quelques développements récents de la méthode du gradient conjugué.

1.1 Différentiabilité, dérivées partielles et dérivées directionnelles

Définition 1.1. Soit U un ouvert de \mathbb{R}^n et soit la fonction $f : U \rightarrow \mathbb{R}$. On dit que f est différentiable en un point a de U s'il existe une application linéaire $L_a \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$ telle que

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(a+h) - f(a) - L_a(h)}{\|h\|} = 0.$$

L_a est uniquement déterminée si elle existe. Dans ce cas, L_a est notée $df(a)$ et est appelée différentielle ou application linéaire tangente de f en a .

Définition 1.2. Soit U un ouvert de \mathbb{R}^n et soit la fonction $f : U \rightarrow \mathbb{R}$. On note si elle existe, $\frac{\partial f}{\partial x_i}(a)$ ou simplement $\partial_i f(a)$ la dérivée partielle de f en a tel que

$$\partial_i f(a) = \frac{\partial f}{\partial x_i}(a) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(a + te_i) - f(a)}{t} = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(a_1, \dots, a_{i-1}, a_i + t, a_{i+1}, \dots, a_n) - f(a)}{t}.$$

et l'on dit que c'est la dérivée partielle de f en a selon la i -ème variable.

Définition 1.3. Soit f une application d'un ouvert U de \mathbb{R}^n dans \mathbb{R} , v élément de \mathbb{R}^n et $a \in U$. On dit que f admet une dérivée en a suivant le vecteur v si la limite suivante existe

$$\frac{\partial f}{\partial v}(a) \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(a + tv) - f(a)}{t}.$$

On dit que f est Gâteaux-différentiable en a si les dérivées directionnelles $\frac{\partial f}{\partial v}(a)$ sont définies pour tout $v \in \mathbb{R}^n$ et si de plus l'application $v \mapsto \frac{\partial f}{\partial v}(a)$ est linéaire.

Remarque 1.1. Lorsque f ne dépend que de 2 ou 3 variables, on utilise souvent la notation (x, y) (resp. (x, y, z)) au lieu de (x_1, x_2) (resp. (x_1, x_2, x_3)) et les dérivées partielles sont notées $\frac{\partial f}{\partial x}(a)$, $\frac{\partial f}{\partial y}(a)$, etc.

1.2 Gradient et Matrice Hessienne

Définition 1.4. Soit U un ouvert de \mathbb{R}^n et soit la fonction $f : U \rightarrow \mathbb{R}$. Si les dérivées partielles $\frac{\partial f}{\partial x_i}(x)$ existes, on note par

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

le gradient de f au point $a = (a_1, \dots, a_n)$.

Définition 1.5. Soient U un ouvert de \mathbb{R}^n et $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction dont toutes les dérivées partielles d'ordre deux sont définies en a . Alors la matrice

$$Hf(a) \stackrel{\text{d'éf}}{=} \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(a) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1}(a) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1}(a) \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}(a) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2}(a) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2}(a) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n}(a) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n}(a) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2}(a) \end{pmatrix}$$

est appelée matrice hessienne de f en a .

Théorème 1.1. Soit U un ouvert de \mathbb{R}^2 et $(x_0, y_0) \in U$ et $f : U \rightarrow \mathbb{R}$. On suppose que $\frac{\partial f}{\partial x}$, $\frac{\partial f}{\partial y}$ et $\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}$ sont définies sur U et que $\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}$ est continue en (x_0, y_0) . Alors $\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x_0, y_0)$ existe et également l'on a

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x_0, y_0) = \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}(x_0, y_0).$$

1.3 Direction de descente

Définition 1.6. Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, d un vecteur non nul de \mathbb{R}^n est dit une direction de descente s'il existe un réel $\delta > 0$ tel que pour tout λ dans l'intervalle $]0, \delta[$, on a

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

Théorème 1.2. Si f est différentiable en un point $x \in \mathbb{R}^n$ et $d \in \mathbb{R}^n$ telle que

$$\nabla^T f(x) \cdot d < 0,$$

alors d est une direction de descente en x .

Remarque 1.2. la direction d fait avec l'opposé du gradient $-\nabla f(x)$ un angle θ strictement plus petit que $\frac{\pi}{2}$

$$\theta = \arccos \frac{-\nabla f(x)^T \cdot d}{\|\nabla f(x)\| \|d\|} \in [0, \frac{\pi}{2}[.$$

1.4 Formule de Taylor

1.4.1 Formule de Taylor avec reste intégral

Théorème 1.3. Soit I un intervalle de \mathbb{R} et $(a, h) \in \mathbb{R}^2$ tel que a et $a + h$ soient dans I . Soit $p \in \mathbb{N}$ et $f \in \mathcal{C}^{p+1}(I; \mathbb{R})$. Alors on a la formule suivante

$$f(a + h) = f(a) + \sum_{k=1}^p \frac{h^k}{k!} f^{(k)}(a) + \frac{h^{p+1}}{p!} \int_0^1 (1-t)^p f^{(p+1)}(a + th) dt.$$

Preuve

Supposons que $h \neq 0$ (sinon la formule est triviale). Si f est de classe C^1 on a

$$f(a + h) - f(a) = \int_a^{a+h} f'(y) dy.$$

En posant $y = a + th$, on obtient donc

$$f(a + h) - f(a) = h \int_0^1 f'(a + th) dt,$$

qui est la formule voulue dans le cas $p = 0$.

Dans le cas général, on applique la formule d'intégration par parties itérée à la fonction 1 que l'on intègre successivement en $(t - 1)$, $(t - 1)^2/2$, etc, et à la fonction $t \mapsto f'(a + th)$, il vient

$$\int_0^1 f'(a + th) dt = \left[\sum_{i=1}^p (-h)^{i-1} \frac{(t-1)^i}{i!} f^{(i)}(a + th) \right]_0^1 + \frac{(-1)^p h^p}{p!} \int_0^1 (t-1)^p f^{(p+1)}(a + th) dt.$$

Après quelques simplifications faciles, on obtient le résultat voulu. ■

Donnons maintenant la généralisation de la formule de Taylor avec reste intégral aux fonctions de plusieurs variables.

Remarque 1.3. En appliquant le résultat ci-dessus composante par composante, on peut généraliser la formule de Taylor d'ordre 2 avec reste intégral au cas d'une fonction à valeurs vectorielles.

Corollaire 1.1. Pour une fonction C^2 de \mathbb{R}^n dans \mathbb{R} , la formule de Taylor avec reste intégral se récrit

$$f(a + h) = f(a) + \sum_{i=1}^n h_i \frac{\partial f}{\partial x_i}(a) + \sum_{i,j=1}^n h_i h_j \int_0^1 (1-t) \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(a + th) dt.$$

1.4.2 Formule de Taylor-Lagrange

Théorème 1.4. Soit I un intervalle de \mathbb{R} et $(a, h) \in \mathbb{R}^2$ tel que a et $a + h$ soient dans I . Soit $p \in \mathbb{N}$ et $f \in C^{p+1}(I; \mathbb{R})$. Soit $f : U \mapsto \mathbb{R}$ une fonction $p + 1$ fois différentiable sur U . Alors il existe $\theta \in]0, 1[$ tel que

$$f(a + h) = f(a) + \sum_{k=1}^p \frac{d^k f(a)(h, \dots, h)}{k!} + \frac{d^{p+1} f(a + \theta h)(h, \dots, h)}{(p + 1)!}.$$

Corollaire 1.2. Pour une fonction deux fois différentiable de \mathbb{R}^n dans \mathbb{R} , la formule de Taylor Lagrange d'ordre 2 est

$$f(a + h) = f(a) + \sum_{i=1}^n h_i \frac{\partial f}{\partial x_i}(a) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n h_i h_j \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(a + \theta h) \quad \text{avec } \theta \in]0, 1[$$

1.4.3 Formule de Taylor-Young

Théorème 1.5. Soit I un intervalle de \mathbb{R} et $(a, h) \in \mathbb{R}^2$ tel que a et $a + h$ soient dans I . Soit $p \in \mathbb{N}$ et $f \in C^{p+1}(I; \mathbb{R})$. Alors il existe un voisinage V de 0 et une fonction $\varepsilon : V \rightarrow \mathbb{R}$ tendant vers 0 en 0, tels que

$$\forall h \in V, f(a + h) = f(a) + \sum_{k=1}^p \frac{d^k f(a)(h, \dots, h)}{k!} + \varepsilon(h) \|h\|_E^p.$$

Preuve

La preuve se fait par récurrence sur p .

Le cas $p = 1$ résulte de la définition de la différentiabilité.

Soit $p \geq 2$. Supposons le résultat vrai pour $p - 1$ et prouvons-le pour p . Soit donc $f : U \mapsto \mathbb{R}$ une fonction de classe C^{p-1} qui est p fois différentiable en a . Fixons un h tel que $[a, h] \subset U$ et posons

$$g(t) = f(a + th) - \sum_{k=1}^p \frac{t^k d^k f(a)(h, \dots, h)}{k!}.$$

Vues les hypothèses, la fonction g est dérivable sur $[0, 1]$ et l'on a

$$\begin{aligned} g'(t) &= df(a + th)(h) - \sum_{k=1}^p \frac{t^{k-1}}{(k-1)!} d^k f(a)(h, \dots, h) \\ &= \left(df(a + th) - \sum_{j=0}^{p-1} \frac{t^j}{j!} d^j(df)(a)(h, \dots, h) \right) (h). \end{aligned}$$

En appliquant à df la formule de Taylor-Young d'ordre $p - 1$, on obtient l'existence d'un voisinage V de 0 (que l'on peut toujours supposer convexe) et d'une fonction ε définie sur V tendant vers 0 en 0, tels que

$$\forall h' \in V, df(a + h') = df(a) + \sum_{j=1}^{p-1} \frac{d^j(df)(a)(h', \dots, h')}{j!} + \varepsilon(h') \|h'\|_E^{p-1}.$$

Pour $h \in V$, on peut appliquer la formule ci-dessus à $h' = th$ et on obtient

$$\forall t \in [0, 1], \|g'(t)\|_F \leq \varepsilon(th)t^{p-1} \|h\|_E^p.$$

Enfin, on remarque

$$g(1) - g(0) = f(a + h) - f(a) - \sum_{k=1}^p \frac{d^k f(a)(h, \dots, h)}{k!}$$

et il ne reste plus qu'à appliquer l'inégalité des accroissements finis à g pour conclure. ■

Corollaire 1.3. *Pour une fonction C^2 de \mathbb{R}^n dans \mathbb{R} , deux fois différentiable en a , la formule de Taylor-Young se récrit*

$$f(a + h) = f(a) + \sum_{i=1}^n h_i \frac{\partial f}{\partial x_i}(a) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n h_i h_j \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(a) + \varepsilon(h) \|h\|_E^2.$$

1.5 Ensembles convexes

Définition 1.7. *Soit S un sous ensemble de \mathbb{R}^n , S est dit convexe si et seulement si $\forall x_1, x_2 \in S, \forall \lambda \in [0, 1]$,*

$$\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2 \in S.$$

Définition 1.8. *Soit $x_1, x_2, \dots, x_k \in \mathbb{R}^n$ et $\lambda_j \in \mathbb{R}$ telle que $\lambda_j \geq 0$ et $\sum_{j=1}^k \lambda_j = 1$. Toute expression*

de la forme $\sum_{j=1}^k \lambda_j x_j$, s'appelle combinaison convexe des points x_j ou barycentre.

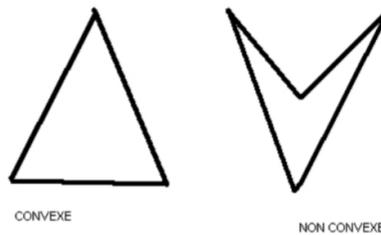


FIGURE 1.1 – ensemble convexe et non convexe.

Définition 1.9. *Soit $S \subset \mathbb{R}^n$, On appelle enveloppe convexe de S et on le note $H(S)$, L'ensemble de toutes les combinaisons convexes de S , en d'autre termes*

$$x \in H(S) \Leftrightarrow \exists x_1, x_2, \dots, x_k \in S \text{ et } \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k \in \mathbb{R}_+ \text{ tel que } \sum_{j=1}^k \lambda_j = 1 \text{ et } x = \sum_{j=1}^k \lambda_j x_j.$$

Proposition 1.1. Soit $S \subset \mathbb{R}^n$ quelconque, alors $H(S)$ est un convexe, c'est aussi le plus petit convexe qui contient S .

Proposition 1.2. Soit $S \subset \mathbb{R}^n$. L'intersection de tous les convexes contenant S est le plus petit convexe qui contient S .

1.6 Fonctions convexes

Définition 1.10. Soient S est un ensemble convexe non vide de \mathbb{R}^n , où $f : S \rightarrow \mathbb{R}$.

a) f est dite convexe si et seulement si

$$f(\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2) \leq \lambda f(x_1) + (1 - \lambda)f(x_2), \quad (1.1)$$

pour tout $x_1, x_2 \in S$ et $\lambda \in [0, 1]$.

b) f est dite strictement convexe si et seulement si

$$f(\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2) < \lambda f(x_1) + (1 - \lambda)f(x_2) \quad (1.2)$$

pour tout $x_1 \neq x_2 \in S$ et pour $\lambda \in]0, 1[$.

c) f est dite fortement convexe ou uniformément convexe dans S si et seulement existe une constante $C > 0$ tel que

$$f(\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2) \leq \lambda f(x_1) + (1 - \lambda)f(x_2) - \frac{1}{2}C\lambda(1 - \lambda) \|x_1 - x_2\|^2 \quad (1.3)$$

pour tout $x_1, x_2 \in S$ et pour tout $\lambda \in [0, 1]$.

Définition 1.11. f est dite concave dans S (strictement concave dans S) si et seulement si $(-f)$ est convexe (strictement convexe) dans S .

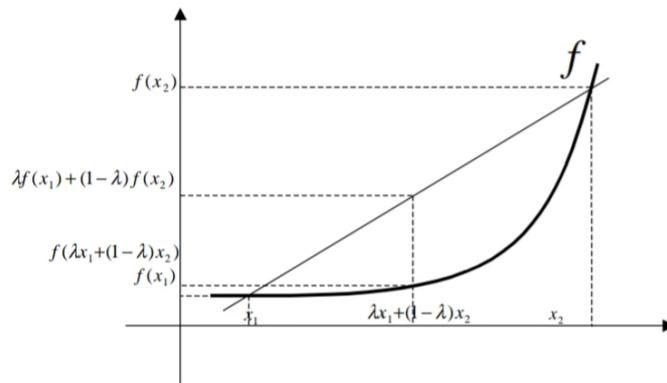


FIGURE 1.2 – Une fonction convexe

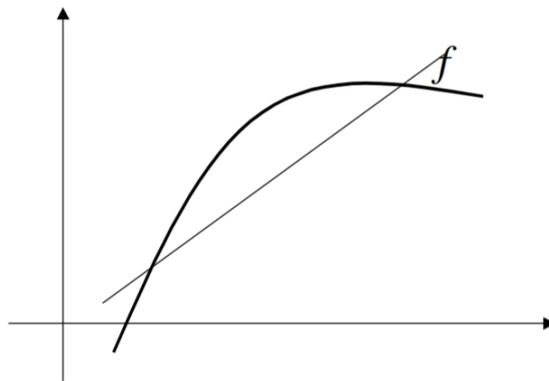


FIGURE 1.3 – Une fonction concave.

Proposition 1.3. Soit $S \subset \mathbb{R}^n$ convexe non vide, $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ convexe, alors pour tout $\alpha \in \mathbb{R}$, l'ensemble

$$S_\alpha = \{x \in S : f(x) \leq \alpha\},$$

est convexe.

Preuve

Soient $x_1, x_2 \in S_\alpha$, alors

$$f(x_1) \leq \alpha \text{ et } f(x_2) \leq \alpha. \tag{1.4}$$

Démontrons que pour $\lambda \in [0, 1]$, $\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2 \in S_\alpha$. En effet f étant convexe, on a

$$f(\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2) \leq \lambda f(x_1) + (1 - \lambda)f(x_2),$$

en utilisant (1.4) d'où

$$f(\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2) \leq \lambda \alpha + (1 - \lambda)\alpha = \alpha, \tag{1.5}$$

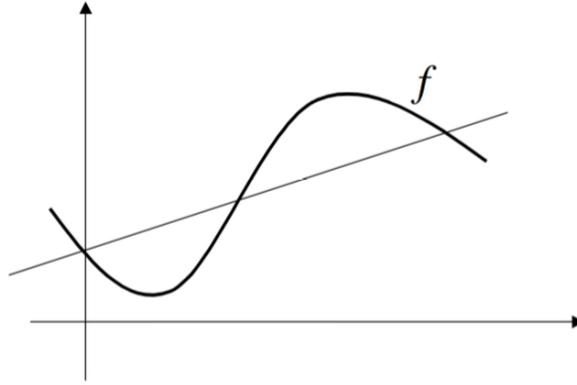


FIGURE 1.4 – Une fonction ni convexe et ni concave.

(1.5) implique que $\lambda x_1 + (1-\lambda)x_2 \in S_\alpha$. Par conséquent S_α est convexe. ■

Définition 1.12. Soit $S \subset \mathbb{R}^n$ convexe non vide, $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. f est dite quasi convexe dans S si et seulement si pour tout $\alpha \in \mathbb{R}$, l'ensemble

$$S_\alpha = \{x \in S : f(x) \leq \alpha\},$$

est convexe.

Définition 1.13. Soit $S \subset \mathbb{R}^n$ convexe non vide $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. f est dite quasi convexe dans S si et seulement si

$$f(\lambda x_1 + (1-\lambda)x_2) \leq \text{Maximum}[f(x_1), f(x_2)] \quad (1.6)$$

pour tout $x_1, x_2 \in S$ et pour tout $\lambda \in [0, 1]$.

1.7 Conditions nécessaires et suffisantes d'optimalité

1.7.1 Conditions nécessaires d'optimalité

Définition 1.14. On dit que la matrice $A \in \mathcal{M}_{n,n}(\mathbb{R})$ est semi-définie positive si

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

qu'elle est définie positive si, de plus,

$$x^T A x = 0 \implies x = 0.$$

Ceci implique donc qu'une matrice est définie positive si et seulement si

$$x^T A x > 0, \text{ pour tout } x \neq 0.$$

Proposition 1.4. *Une condition nécessaire et suffisante pour que la matrice A soit définie positive (resp. semi-définie positive) est que toutes ses valeurs propres soient strictement positive (resp. positives ou nulles).*

Théorème 1.6. *Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ un fonction différentiable au point $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$. Soit $d \in \mathbb{R}^n$ telle que $\nabla f(\bar{x})^T d < 0$. Alors il existe $\delta > 0$ tel que $f(\bar{x} + \alpha d) < f(\bar{x})$ pour tout $\alpha \in]0, \delta[$. La direction d s'appelle dans ce cas direction de descente.*

Preuve

Comme f est différentiable en \bar{x} alors

$$f(\bar{x} + \alpha d) = f(\bar{x}) + \alpha \nabla f(\bar{x})^T d + \alpha \|d\| \lambda(\bar{x}, \alpha d),$$

où $\lambda(\bar{x}, \alpha d) \rightarrow 0$ pour $\alpha \rightarrow 0$.

Ceci implique

$$\frac{f(\bar{x} + \alpha d) - f(\bar{x})}{\alpha} = \nabla f(\bar{x})^T d + \|d\| \lambda(\bar{x}, \alpha d), \alpha \neq 0,$$

et comme $\nabla f(\bar{x})^T d < 0$ et $\lambda(\bar{x}, \alpha d) \rightarrow 0$ pour $\alpha \rightarrow 0$, il existe $\delta > 0$ tel que

$$\nabla f(\bar{x})^T d + \|d\| \lambda(\bar{x}, \alpha d) < 0 \text{ pour tout } \alpha \in]0, \delta[,$$

et par conséquent on obtient

$$f(\bar{x} + \alpha d) < f(\bar{x}) \text{ pour tout } \alpha \in]0, \delta[. \quad \blacksquare$$

Théorème 1.7. *Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ différentiable en \bar{x} , si \bar{x} est un minimum local alors $\nabla f(\bar{x}) = 0$.*

Preuve

Par contre, on suppose que $\nabla f(\bar{x}) \neq 0$. Si on pose $d = -\nabla f(\bar{x})$, on obtient

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

et par le théorème précédent, il existe $\delta > 0$ tel que

$$f(\bar{x} + \alpha d) < f(\bar{x}) \text{ pour tout } \alpha \in]0, \delta[,$$

mais ceci est contradictoire avec le fait que \bar{x} est un minimum local, d'où $\nabla f(\bar{x}) = 0$. ■

Théorème 1.8. *Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ deux fois différentiable en \bar{x} . Supposons que \bar{x} soit minimum local. Alors $\nabla f(\bar{x}) = 0$ et $H(\bar{x})$ est semi définie positive.*

Preuve

Le corollaire ci-dessus montre la première proposition, pour la deuxième proposition on a

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

où $\lambda(\bar{x}, \alpha d) \rightarrow 0$ pour $\alpha \rightarrow 0$.

Ceci implique

$$\frac{f(\bar{x} + \alpha d) - f(\bar{x})}{\alpha^2} = \frac{1}{2} d^t H(\bar{x}) d + \|d\|^2 \lambda(\bar{x}; \alpha d), \alpha \neq 0.$$

Comme \bar{x} est un minimum local alors $f(\bar{x} + \alpha d) \geq f(\bar{x})$ pour α suffisamment petit, d'où

$$\frac{1}{2} d^t H(\bar{x}) d + \|d\|^2 \lambda(\bar{x}; \alpha d) \geq 0 \text{ pour } \alpha \text{ petit.}$$

En passant à la limite quand $\alpha \rightarrow 0$, on obtient que $d^t H(\bar{x}) d \geq 0$, d'où $H(\bar{x})$ est semi définie positive. ■

1.7.2 Conditions suffisantes d'optimalité

Théorème 1.9. *Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ deux fois différentiable en \bar{x} . Si $\nabla f(\bar{x}) = 0$ et $H(\bar{x})$ est définie positive, alors \bar{x} est un minimum local strict.*

Preuve

f est deux fois différentiable au point \bar{x} . Alors $\forall x \in \mathbb{R}^n$, on obtient

$$f(x) = f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^t (x - \bar{x}) + \frac{1}{2} (x - \bar{x})^t H(\bar{x}) (x - \bar{x}) + \|x - \bar{x}\|^2 \lambda(\bar{x}, x - \bar{x}), \quad (1)$$

où $\lambda(\bar{x}, x - \bar{x}) \rightarrow 0$ pour $x \rightarrow \bar{x}$. Supposons que \bar{x} n'est pas un minimum local strict. Donc il existe une suite $\{x_k\}$ convergente vers \bar{x} telle que $f(x_k) \leq f(\bar{x}), x_k \neq \bar{x}$.

Posons $d_k = (x_k - \bar{x}) / \|x_k - \bar{x}\|$. Donc $\|d_k\| = 1$ et on obtient à partir de (1)

$$\frac{f(x_k) - f(\bar{x})}{\|x_k - \bar{x}\|^2} = \frac{1}{2} d_k^t H(\bar{x}) d_k + \lambda(\bar{x}, x_k - \bar{x}) \leq 0,$$

et comme $\|d_k\| = 1, \forall k$ alors $\exists \{d_k\}_{k \in N_1 \subset \mathbb{N}}$ telle que $d_k \rightarrow d$ pour $k \rightarrow \infty$ et $k \in N_1$. On a bien sur $\|d\| = 1$. Considérons donc $\{d_k\}_{k \in N_1}$ et le fait que $\lambda(\bar{x}; x - \bar{x}) \rightarrow 0$ pour $k \rightarrow \infty$ et $k \in N_1$. Alors (1.4) donne $d^t H(\bar{x}) d \leq 0$, ce qui contredit le fait que $H(\bar{x})$ est définie positive car $\|d\| = 1$ (donc $d \neq 0$). Donc \bar{x} est un minimum local strict. ■

2.1 Forme générale d'un problème d'optimisation

Etant donné un ensemble $X \subset \mathbb{R}^n$ et une fonction $f : X \rightarrow \mathbb{R}$, la forme générale d'un problème d'optimisation est la suivante

$$\min\{f(x); x \in X\} \quad (2.1)$$

où $X \subset \mathbb{R}^n$ est appelé ensemble des solutions admissibles ou réalisables, $x \in \mathbb{R}^n$ s'appelle variable de décision, $f(x)$ s'appelle fonction économique ou fonction objectif.

2.2 Problème d'optimisation sans contraintes

Si $X = \mathbb{R}^n$, le problème d'optimisation (2.1) s'appelle problème d'optimisation sans contraintes et aura donc la forme suivante

$$\min \{f(x); x \in \mathbb{R}^n\} \quad (2.2)$$

Problème d'optimisation sans contraintes non linéaire

Le problème (2.2) est un problème d'optimisation sans contraintes non linéaire si f n'est pas affine.

Problème d'optimisation sans contraintes quadratique

Le problème (2.2) est un problème d'optimisation sans contraintes non linéaire quadratique si

$$f(x) = x^T A x - b x \quad (2.3)$$

où A est une matrice symétrique d'ordre (n, n) , x^T est le transposé du vecteur x .

2.2.1 Problème d'optimisation avec contraintes

Soit \mathcal{U} un ouvert non vide de \mathbb{R}^n (le plus souvent $\mathcal{U} = \mathbb{R}^n$). Soit $f : \mathcal{U} \rightarrow \mathbb{R}$ une application différentiable sur \mathcal{U} , et $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_p : \mathcal{U} \rightarrow \mathbb{R}$ des applications de classe C^1 sur \mathcal{U} (i.e. φ_i est différentiable et $\nabla\varphi_i : x \mapsto \nabla\varphi_i(x)$ est continue; c'est le cas en particulier lorsque φ_i est 2 fois différentiable). Soit le domaine \mathcal{D}

$$\mathcal{D} = \{\mathbf{x} \in \mathcal{U} \mid \varphi_i(\mathbf{x}) = 0, \forall i = 1, 2, \dots, p\}.$$

Le problème

$$\min_{x \in \mathcal{D}} f(\mathbf{x})$$

est un problème de minimisation sous contraintes.

Exemple 2.1. Soit $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}, f(x, y) = x$. Soit $\mathcal{D} = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid x^2 + y^2 = 1\}$ le cercle unité de centre $(0, 0)$.

2.3 Méthodes à directions de descente

2.3.1 Principe général

Considérons le problème d'optimisation sans contrainte

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

où $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ est supposée régulière.

On note aussi par $\nabla f(x)$ et $\nabla^2 f(x)$ le gradient et le hessien de f en x respectivement.

On s'intéresse ici à une classe d'algorithmes qui sont fondés sur la notion de direction de descente.

On voit que si d est une direction de descente $f(x + \alpha d) < f(x)$, pour tout $\alpha > 0$ suffisamment petit, et donc que f décroît strictement dans la direction d . De telles directions sont intéressantes en optimisation car, pour faire décroître f , il suffit de faire un déplacement le long de d . Les méthodes à directions de descentes utilisent cette idée pour minimiser une fonction. Elles construisent la suite des itérés $\{x_k\}_{k \geq 1}$, approchant une solution x_k du problème (P) à une formule de récurrence suivante

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k, \text{ pour } k \geq 1,$$

où α_k est appelé le pas et d_k la direction de descente de f en x_k .

Pour définir une direction de descente il faut donc spécifier deux choses

- 1) dire comment la direction d_k est calculée, la manière de procéder donne le nom à l'algorithme
- 2) dire comment on détermine le pas α_k , c'est ce que l'on appelle la recherche linéaire.

2.3.2 L'algorithme de méthode à directions de descente

Etape 0 (initialisation)

On suppose qu'au début de l'itération k , on dispose d'un itéré $x_k \in \mathbb{R}^n$.

Etape1

Test d'arrêt : si $\|\nabla f(x_k)\| \simeq 0$, arrêt de l'algorithme.

Etape2

Choix d'une direction de descente $d_k \in \mathbb{R}^n$.

Etape3

Recherche linéaire : déterminer un pas $\alpha_k > 0$ le long de d_k de manière à "faire décroître f suffisamment" .

Etape4

Si la recherche linéaire réussie $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$; remplacer k par $k + 1$ et aller à l'étape 1 .
 En pratique, on recherche plutôt une valeur α^* qui assure une décroissance suffisante de f cela conduit à la notion d'intervalle de sécurité.

Définition 2.1. On dit que $[\alpha_g, \alpha_d]$ est un intervalle de sécurité s'il permet de classer les valeurs de λ de la façon suivante

- Si $\alpha < \alpha_g$ alors α est considéré trop petit,
- Si $\alpha_d \geq \alpha \geq \alpha_g$ alors α est satisfaisant,
- Si $\alpha > \alpha_d$ alors est considéré trop grand.

Le problème est de traduire de façon numérique sur h_k les trois conditions précédentes, ainsi que de trouver un algorithme permettant de déterminer α_g et α_d .

Algorithme de base

Etape 0 : (initialisation)

$\alpha_g = \alpha_d = 0$, choisir $\alpha_1 > 0$, poser $k = 1$ et aller à l'étape 1.

Etape 1

Si α_k convient, poser $\alpha^* = \alpha_k$ et on s'arrête.

Si α_k est trop petit on prend $\alpha_{g,k+1} = \alpha_k, \alpha_d = \alpha_d$ et on va a l'étape 2.

Si α_k est trop grand on prend $\alpha_{d,k+1} = \alpha_k, \alpha_g = \alpha_g$ et on va a l'étape 2.

Etape 2

Si $\alpha_{d,k+1} = 0$ déterminer $\alpha_{k+1} \in] \alpha_{g,k+1} , +\infty[$.

Si $\alpha_{d,k+1} \neq 0$ déterminer $\alpha_{k+1} \in] \alpha_{g,k+1} , \alpha_{d,k+1}[$.

Remplacer k par $k + 1$ et aller a l'étape 1.

Sur une itération k de la dernière méthode nous avons l'itération courante $x_k \in \mathbb{R}^n$ et la direction de recherche $d_k \in \mathbb{R}^n$ qui est une direction de descente pour la fonction objectif $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ on a

$$\nabla^T f(x_k) d_k < 0.$$

Le but est de réduire "de façon importante" la valeur de l'objective par un pas $x_k \mapsto x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$ de x_k dans la direction d_k . Pour cela de nombreux mathématiciens (Armijo, Goldstein, Wolfe, Wolfe forte) ont élaboré plusieurs règles (tests).

L'objective de cette section consiste à présenter les principaux tests.

D'abord présentons le schéma d'une recherche linéaire inexacte.

Elles reviennent à déterminer, par tâtonnement un intervalle $[\alpha_g, \alpha_d]$, où $\alpha^* \in [\alpha_g, \alpha_d]$, dans lequel

$$h_k(\alpha_k) < h_k(0) \quad (f(x_k + \alpha_k d_k) < f(x_k)).$$

2.4 Recherche linéaire d'Armijo

2.4.1 Principe de la méthode

Il ne suffit pas de choisir à chaque itération k , α_k tel que

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

pour que la suite $\{x_k\}$ converge vers la solution optimale ou vers un point stationnaire. En effet si la fonction décroît très peu en passant du point x_k vers le point $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$, la suite $\{x_k\}$ diverge ou peut converger vers un point qui n'a rien à voir avec la solution optimale.

Pour éviter cet inconvénient, il faut imposer une condition caractérisant la notion de descente suffisante de la fonction. Il faut choisir α_k de sorte que la fonction f décroît de façon suffisante en passant du point x_k au point $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$.

L'idée est que la diminution jugée suffisante soit proportionnelle à la taille du pas α_k . Ainsi plus le pas sera grand, plus la diminution de la fonction f sera grande. Donc si $\gamma > 0$, on désire que

$$f(x_k) - f(x_k + \alpha_k d_k) \geq \alpha_k \gamma,$$

ou encore

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq f(x_k) - \alpha_k \gamma.$$

Le facteur γ ne peut pas être choisi de façon arbitraire. Surtout il doit varier d'une itération à l'autre. Il est plus approprié de définir γ en fonction de la pente de la fonction au point x_k dans la

direction d_k . En l'occurrence, nous choisirons

$$\gamma = -\beta \nabla f(x_k)^T d_k, \quad 0 < \beta < 1.$$

Définition 2.2. (condition d'Armijo) Soient $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction différentiable, x_k un point dans \mathbb{R}^n , $d_k \in \mathbb{R}^n$ une direction (de descente) telle que $\nabla f(x_k)^T d_k < 0$. On dit que le pas $\alpha_k \geq 0$ vérifie la condition d'Armijo, si

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq f(x_k) + \alpha_k \beta \nabla f(x_k)^T d_k, \quad 0 < \beta < 1.$$

2.4.2 Algorithme (règle d'Armijo)

Etape 0 (initialisation)

$\alpha_{g,1} = \alpha_{d,1} = 0$, choisir $\alpha_1 > 0, \rho \in]0, 1[$ poser $k = 1$ et aller à l'étape 1.

Etape 1

si $\varphi_k(\alpha_k) \leq \varphi_k(0) + \rho \varphi'_k(0) \alpha_k$: STOP ($\alpha^* = \alpha_k$)

si $\varphi_k(\alpha_k) > \varphi_k(0) + \rho \varphi'_k(0) \alpha_k$, alors

$\alpha_{d,k+1} = \alpha_d, \alpha_{g,k+1} = \alpha_k$ et aller à l'étape 2.

Etape 2

si $\alpha_{d,k+1} = 0$ déterminer $\alpha_{k+1} \in]\alpha_{g,k+1}, +\infty[$

si $\alpha_{d,k+1} \neq 0$ déterminer $\alpha_{k+1} \in]\alpha_{g,k+1}, \alpha_{d,k+1}[$

remplacer k par $k + 1$ et aller à l'étape 1.

Théorème 2.1. Si $\varphi_k : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$, définie par $\varphi_k(\alpha) = f(x_k + \alpha d_k)$ est continue et bornée inférieurement, si d_k est une direction de descente en x_k ($\varphi'_k(0) < 0$) et si $\rho \in]0, 1[$, alors l'ensemble des pas vérifiant la règle d'Armijo est non vide.

Preuve

On a

$$\varphi_k(\alpha) = f(x_k + \alpha d_k),$$

$$\psi_\rho(\alpha) = f(x_k) + \rho \alpha \nabla f(x_k)^T d_k.$$

Le développement de Taylor-Yong en $\alpha = 0$ de φ_k est

$\varphi_k(\alpha) = f(x_k + \alpha d_k) = f(x_k) + \rho \alpha \nabla f(x_k)^T d_k + \alpha \xi(\alpha)$ où $\xi(\alpha) \rightarrow 0, \alpha \rightarrow 0$ et comme $\rho \in]0, 1[$

et $\varphi'_k(0) = \nabla f(x_k)^T d_k < 0$ on déduit

$$f(x_k) + \alpha_k \nabla f(x_k)^T d_k < f(x_k) + \rho \alpha_k \nabla f(x_k)^T d_k \text{ pour } \alpha > 0.$$

On voit que pour $\alpha > 0$ assez petit on a

$$\varphi_k(\alpha) < \psi_\rho(\alpha).$$

De ce qui précède et du fait que φ_k est bornée inférieurement, $\psi_\rho(\alpha) \rightarrow -\infty$ et $\alpha \rightarrow +\infty$, on déduit que la fonction $\psi_\rho(\alpha) - \varphi_k(\alpha)$ a la propriété

$$\begin{cases} \psi_\rho(\alpha) - \varphi_k(\alpha) > 0 & \text{pour } \alpha \text{ assez petit} \\ \psi_\rho(\alpha) - \varphi_k(\alpha) < 0 & \text{pour } \alpha \text{ assez grand,} \end{cases}$$

donc s'annule au moins une fois pour $\alpha > 0$. En choisissant le plus petit de ces zéros on voit qu'il existe $\bar{\alpha} > 0$ tel que

$$\varphi_k(\bar{\alpha}) = \psi_\rho(\bar{\alpha}) \text{ et } \varphi_k(\alpha) < \psi_\rho(\alpha) \text{ pour } 0 < \alpha < \bar{\alpha}.$$

Ce qui achève la démonstration. ■

2.5 Recherche linéaire de Goldstein

2.5.1 Principe de la méthode

Supposons qu'à l'iteration k , on ait le point $x_k \in \mathbb{R}^n$ et le vecteur de descente $d_k \in \mathbb{R}^n$ ($\nabla f(x_k)^T d_k < 0$). On cherche le pas $\alpha_k > 0$ de Goldstein vérifiant les deux conditions suivantes

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq f'(x_k) + \rho \alpha_k \nabla f(x_k)^T d_k, \quad \rho \in \left] 0, \frac{1}{2} \right[\quad (\text{Goldstein1})$$

et

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \geq f'(x_k) + (1 - \rho) \alpha_k \nabla f(x_k)^T d_k, \quad \rho \in \left] 0, \frac{1}{2} \right[. \quad (\text{Goldstein2})$$

Si on note

$$\varphi_k(\alpha) = f(x_k + \alpha d_k),$$

alors (Goldstein 1) et (Goldstein 2) deviennent

$$\varphi_k(\alpha_k) \leq \varphi_k(0) + \rho \alpha_k \varphi_k'(0)$$

et

$$\varphi_k(\alpha_k) \geq \varphi_k(0) + (1 - \rho) \alpha_k \varphi_k'(0).$$

2.5.2 L'algorithme de Goldstein

L'Algorithme essaye de trouver $\alpha_k \in]\beta_1, \beta_2[$. On démarre avec un intervalle $[a_0, b_0]$ assez grand.

On prend $\alpha_0 \in [a_0, b_0]$.

Si α_0 vérifié Goldstein 1 et Goldstein 2

alors $\alpha_0 \in]\beta_1, \beta_2[$ et on s'arrête.

Si $\alpha_0 > \beta_2$

alors α_0 ne vérifie pas Goldstein 1, alors on prend $b_1 = \alpha_0$ et $a_1 = b_0$ et $\alpha_1 = \frac{a_1 + b_1}{2}$

et on recommence avec α_1

Si $\alpha_0 < \beta_1$

alors α_0 ne vérifié pas Goldstein 2, on prend $a_1 = \alpha_0, b_1 = b_0$ et $\alpha_1 = \frac{a_1 + b_1}{2}$ et on teste de

nouveau α_1

A l'itération k

Supposons qu'on ait $[a_k, b_k]$ et $\alpha_k = \frac{a_k + b_k}{2}$

Si α_k vérifie Goldstein 1 et Goldstein 2, $\alpha_k \in]\beta_1, \beta_2[$. Stop.

Si α_k ne vérifié pas Goldstein 1 alors $\alpha_k > \beta_2$

On prend $b_{k+1} = \alpha_k, a_{k+1} = a_k, \alpha_{k+1} = \frac{a_{k+1} + b_{k+1}}{2}$.

Si α_k ne vérifie pas Goldstein 2 alors $\alpha_k < \beta_1$. On prend $a_{k+1} = \alpha_k, b_{k+1} = b_k, \alpha_{k+1} = \frac{a_{k+1} + b_{k+1}}{2}$.

On obtient ainsi l'algorithme suivant

Algorithme de Goldstein

Etape 1 (Initialisation)

Choisir $\alpha_0 \in [0, 10^{100}]$ et $\rho \in]0, 1[$. Poser $a_0 = 0, b_0 = 10^{100}$

Poser $k = 0$ et aller a Etape 2

Etape 2 (Test Goldstein 1)

Iteration k on a $[a_k, b_k]$ et α_k , calculez $\varphi_k(\alpha_k)$

Si $\varphi_k(\alpha_k) \leq \varphi_k(0) + \rho\alpha_k\varphi'_k(0)$, allez à Etape 3

Sinon

Poser $b_{k+1} = \alpha_k, a_{k+1} = a_k$, et allez à Etape 4.

Etape 3 (Test Gold 02)

Si $\varphi_k(\alpha_k) \geq \varphi_k(0) + (1 - \rho)\alpha_k\varphi'_k(0)$ stop. $\alpha^* = \alpha_k$

Sinon

Poser $a_{k+1} = \alpha_k, b_{k+1} = b_k$ et allez à Etape 4.

Etape4

Poser $\alpha_{k+1} = \frac{a_{k+1} + b_{k+1}}{2}$

Poser $k = k + 1$ et, allez à Etape 2 .

2.6 Recherche linéaire de Wolfe

2.6.1 Recherche linéaire de Wolfe

α_k est acceptable par la recherche linéaire inexacte de Wolfe si α_k , vérifie les deux condition (Wolfe1) et (Wolfe2) suivantes

$$\varphi_k(\alpha_k) \leq \varphi_k(0) + \rho \alpha_k \varphi'_k(0), \quad 0 < \rho < \frac{1}{2} \quad (\text{Wolfe1})$$

$$\varphi'_k(\alpha_k) \geq \sigma \varphi'_k(0), \quad 0 < \sigma < 1 \quad \text{et} \quad \sigma > \rho \quad (\text{Wolfe2})$$

ou en remplaçant $\varphi_k(\alpha_k)$, $\varphi_k(0)$, $\varphi'_k(0)$, $\varphi'_k(\alpha_k)$ par leurs expressions, on a

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq f(x_k) + \rho \alpha_k \nabla f(x_k)^T d_k, \quad 0 < \rho < \frac{1}{2} \quad (\text{Wolfe3})$$

$$\nabla f(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k \geq \sigma \nabla f(x_k)^T d_k, \quad 0 < \sigma < 1, \quad \sigma > \rho. \quad (\text{Wolfe4})$$

2.6.2 Recherche linéaire de Wolfe forte

α_k vérifie les condition de Wolfe forte si les deux conditions suivantes sont vérifiées

$$\varphi_k(\alpha_k) \leq \varphi_k(0) + \rho \alpha_k \varphi'_k(0), \quad 0 < \rho < \frac{1}{2} \quad (\text{Wolfe forte1})$$

$$|\varphi'_k(\alpha_k)| \leq -\sigma \varphi'_k(0), \quad 0 < \sigma < 1, \quad \sigma > \rho. \quad (\text{Wolfe forte2})$$

Théorème 2.2. *Si α_k vérifie (Wolfe forte 1) et (Wolfe forte 2), alors α_k vérifie (Wolfe1) et (Wolfe2).*

Preuve

(Wolfe forte 1) et (Wolfe1) sont les mêmes propositions. Reste à monter que

$$(\text{Wolfe forte 2}) \implies (\text{Wolfe 2}).$$

En effet. Supposons que α_k vérifie (Wolfe forte 2), alors on a

$$\sigma \varphi'_k(0) \leq \varphi'_k(\alpha_k) \leq -\sigma \varphi'_k(0),$$

par conséquent on a

$$\varphi'_k(\alpha_k) \geq \sigma \varphi'_k(0).$$

Ceci implique que α_k vérifie (Wolfe 2). ■

2.6.3 L'algorithme de Wolfe

Etape1 Initialisation

Prendre $\alpha_0 \in [0, 10^{99}]$, calculez $\varphi(0), \varphi'(0)$. Prendre $\rho = 0.1$ (ou $\rho = 0.1$ ou $\rho = 0.001$ ou $\rho = 10^{-4}$)

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

Poser $a_0 = 0, b_0 = 10^{99}, k = 0$ et allez à Etape 2.

Etape2 (test de (Wolfe1))

Calculez $\varphi(\alpha_k)$. Si $\varphi(\alpha_k) \leq \varphi(0) + \rho\alpha_k\varphi'(0)$, aller à Etape3. Sinon

Poser $a_{k+1} = a_k, b_{k+1} = \alpha_k$ et allez à Etape3.

Etape3 (test de (Wolfe2) ou (Wolfe forte 2))

Calculez $\varphi'(\alpha_k)$. Si $\varphi'(\alpha_k) \geq \sigma\varphi'(0)$ ($|\varphi'_k(\alpha_k)| \leq -\sigma\varphi'_k(0)$). STOP

Prendre $\bar{\alpha} = \alpha_k$. Sinon Poser $a_{k+1} = \alpha_k, b_{k+1} = b_k$ et allez à Etape 4.

Etape4 (calcul de α_{k+1})

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

Poser $k = k + 1$ et allez à Etape 2 .

CHAPITRE 3

MÉTHODE DU GRADIENT CONJUGUÉ

3.1 Optimisation quadratique sans contraintes

3.1.1 Définitions et théorèmes fondamentaux

Définition 3.1. Soit Q est une matrice (n, n) symétrique et définie positive et $b \in \mathbb{R}^n$. On appelle problème de minimisation quadratique sans contraintes, le problème noté (PQSC) suivant

$$\left\{ \min_{x \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} x^T Q x - b^T x \right\}. \quad (\text{PQSC})$$

Théorème 3.1. Le problème (PQSC) a une solution unique \hat{x} , solution de système linéaire $Qx = b$, c'est à dire que \hat{x} vérifie

$$\hat{x} = Q^{-1}b. \quad (3.1)$$

Preuve

Considérons $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx - b^T x$, notons $H(x)$ la matrice hessienne de f au point x . On a

$$H(x) = Q, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

Soit $f : S \rightarrow \mathbb{R}$ et $S \subset \mathbb{R}^n$ convexe. Alors f est convexe sur S si et seulement si $H(x)$ est semi définie positive pour tout $x \in S$. De plus si f est quadratique de la forme $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx - b^T x$.

Alors f est strictement convexe si et seulement si $H(x)$ est définie positive pour tout $x \in \mathbb{R}^n$.

Pour $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx - b^T x$, on a $H(x) = Q$ et $\forall x \in \mathbb{R}^n$. Par hypothèse Q est définie positive, donc $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx - b^T x$ est strictement convexe dans \mathbb{R}^n .

Rappelons maintenant ce deuxième résultat de l'optimisation convexe. Soit $S \subset \mathbb{R}^n$ convexe et

ouvert et $f : S \rightarrow \mathbb{R}$, strictement convexe et (PC) le problème d'optimisation convexe suivant

$$\min_{x \in S} f(x). \quad (PC)$$

Alors $\hat{x} \in S$ est solution optimale de (PC) si et seulement si on a

$$\nabla f(\hat{x}) = 0. \quad (3.2)$$

De plus si \hat{x} existe, alors elle est unique.

Appliquons ce résultat à notre problème. $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx - b^T x$ est strictement convexe. $S = \mathbb{R}^n$ est convexe et ouvert. $x \in \mathbb{R}^n$ est solution optimale de (PQSC) si et seulement si $\nabla f(x) = 0$. Or $\nabla f(x) = Qx - b$. Donc

$$\nabla f(x) = 0 \iff Qx - b = 0 \iff Qx = b. \quad (3.3)$$

Donc \hat{x} solution optimale de (PQSC) si et seulement \hat{x} vérifie

$$Q\hat{x} = b. \quad (3.4)$$

Q étant définie positive, alors Q est inversible. Par conséquent \hat{x} solution de (3.4) est donnée par

$$\hat{x} = Q^{-1}b. \quad (3.5)$$

■

3.1.2 Calcul du pas obtenu par une recherche linéaire exacte

Soit Q est une matrice (n, n) symétrique et définie positive et $b \in \mathbb{R}^n$ et $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx - b^T x$.
Considérons le problème (PQSC)

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \left\{ \frac{1}{2}x^T Qx - b^T x \right\}. \quad (PQSC)$$

Les méthodes à directions de recherches linéaires génèrent des suites $\{x_k\}_{k=1,2,\dots}$ de la manière suivante. On démarre par $x_1 \in \mathbb{R}^n$. A l'itération k si on a $x_k \in \mathbb{R}^n$. Le successeur x_{k+1} de x_k est donné par la relation suivante

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k, \quad (3.6)$$

où $d_k \in \mathbb{R}^n$ est une direction de recherche et $\alpha_k \in \mathbb{R}^+$ est le pas de recherche obtenu par une recherche linéaire exacte ou inexacte. Dans le cas d'une recherche linéaire exacte α_k vérifie

$$f(x_k + \alpha_k d_k) = \min_{\alpha > 0} f(x_k + \alpha d_k). \quad (3.7)$$

Notons

$$g_k = \nabla f(x_k) = Qx_k - b. \quad (3.8)$$

Théorème 3.2. Soit Q est une matrice (n, n) symétrique et définie positive et $b \in \mathbb{R}^n$ et $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx - b^T x$. Considérons le problème (PQSC)

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \left\{ \frac{1}{2}x^T Qx - b^T x \right\}. \quad (\text{PQSC})$$

Supposons qu'à l'itération k on a une direction d_k de descente, c'est à dire que d_k vérifie

$$g_k^T d_k = (Qx_k - b)^T d_k < 0. \quad (3.9)$$

Soit $\alpha_k > 0$ obtenu par une recherche linéaire exacte que α_k vérifie

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

Alors

$$\alpha_k = -\frac{g_k^T d_k}{d_k^T Q d_k}. \quad (3.10)$$

Preuve

Considérons

$$\varphi(\alpha) = f(x_k + \alpha d_k). \quad (3.11)$$

Donc α_k est la solution optimale du problème unidimensionnel suivant

$$\varphi(\alpha_k) = \min_{\alpha > 0} \varphi(\alpha). \quad (3.12)$$

Q définie positive, alors $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx - b^T x$ est strictement convexe sur \mathbb{R}^n . Par conséquent $\varphi(\alpha) = f(x_k + \alpha d_k)$ est strictement convexe sur $]0, +\infty[$ qui est un ouvert convexe. Donc α_k solution optimale de (3.12) si et seulement si α_k vérifie $\varphi'(\alpha_k) = 0$. Or

$$\begin{aligned} \varphi'(\alpha) &= \nabla f(x_k + \alpha d_k)^T d_k = [Q(x_k + \alpha d_k) - b]^T d_k \\ &= [Qx_k - b + \alpha Qd_k]^T d_k = [g_k + \alpha Qd_k]^T d_k \\ &= g_k^T d_k + \alpha d_k^T Q d_k. \end{aligned}$$

Donc

$$\varphi'(\alpha) = 0 \iff \alpha d_k^T Q d_k = -g_k^T d_k,$$

ou encore

$$\alpha_k = -\frac{g_k^T d_k}{d_k^T Q d_k}.$$

■

Remarque 3.1. Si Q n'est pas définie positive mais seulement semi-définie positive, alors f n'est pas strictement convexe, et $d_k^T Q d_k$ peut être égale à zéro. Par conséquent α_k ne sera plus définie par (3.10).

3.2 Méthode des gradient conjugué

3.2.1 Définition et propriété générale

Définition 3.2. Soit Q une matrice (n, n) symétrique. Les directions d_0, d_1, \dots, d_k sont dites Q conjuguées si on a

$$d_i^T Q d_j = 0, \quad 0 \leq i, j \leq k. \quad (3.13)$$

Théorème 3.3. Soit Q une matrice (n, n) symétrique et définie positive. Si les directions d_0, d_1, \dots, d_k avec $k \leq n - 1$, sont non nuls et Q conjuguées, alors ils sont linéairement indépendantes.

Preuve

Supposons que

$$\alpha_0 d_0 + \alpha_1 d_1 + \dots + \alpha_k d_k = 0. \quad (3.14)$$

Multiplions l'égalité (3.14) par $d_j^T Q$, $0 \leq j \leq k$, on obtient

$$0 = \sum_{i=1}^k \alpha_i d_j^T Q d_i = \alpha_j d_j^T Q d_j, \quad (3.15)$$

or

$$\alpha_j d_j^T Q d_j = 0 \implies \alpha_j = 0$$

car Q est définie positive et par conséquent $d_j^T Q d_j > 0$. Donc le système $\{d_0, d_1, \dots, d_k\}$ est libre. ■

Remarque 3.2. On n'a pas unicité des vecteurs d_0, d_1, d_2 Q conjugués.

3.2.2 L'algorithme du gradient conjugué

Soit Q est une matrice (n, n) symétrique et définie positive et $b \in \mathbb{R}^n$. Considérons le problème de minimisation quadratique sans contraintes (PQSC) suivant

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \left\{ \frac{1}{2} x^T Q x - b^T x \right\}, \quad (PQSC).$$

Algorithme

a) Initialisation

On se donne $x_0 \in \mathbb{R}^n$ quelconque et d_0, d_1, \dots, d_{n-1} Q conjugués. Poser $k = 0$ et allez à b) Etape principale.

b) Etape principale

Pour $k \geq 0$

Calculez

$$g_k = \nabla f(x_k) = Qx_k - b.$$

Si $g_k = 0$, stop. Sinon calcule

$$\alpha_k = -\frac{g_k^T d_k}{d_k^T Q d_k},$$

et

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

Poser $k = k + 1$ et allez à **b) Etape principale.**

Théorème 3.4. *Partant d'un point initial $x_0 \in \mathbb{R}^n$ quelconque, l'algorithme des directions conjuguées précédentes converge vers la solution optimale unique \hat{x} du problème (PQSC) dans n itérations, c'est à dire qu'on a*

$$x_n = \hat{x} \text{ et } Qx_n = Q\hat{x} = b. \tag{3.16}$$

Preuve

Considérons le vecteur $\hat{x} - x_0 \in \mathbb{R}^n$. D'autre part $\{d_0, \dots, d_{n-1}\}$ est un système libre et contient n vecteurs. Donc $\{d_0, \dots, d_{n-1}\}$ est une base de \mathbb{R}^n . Par conséquent il existe $\beta_0, \dots, \beta_{n-1}$ scalaires réels tels que

$$\hat{x} - x_0 = \beta_0 d_0 + \dots + \beta_{n-1} d_{n-1}. \tag{3.17}$$

Multiplions les 2 membres de (3.17) par $d_k^T Q$, $0 \leq k \leq n - 1$, on obtient

$$d_k^T Q (\hat{x} - x_0) = \beta_k d_k^T Q d_k. \tag{3.18}$$

Donc

$$\beta_k = \frac{d_k^T Q (\hat{x} - x_0)}{d_k^T Q d_k}. \tag{3.19}$$

Montrons maintenant que le numérateur de (3.19) est égal à $-d_k^T g_k$. En effet, d'après l'algorithme des directions conjuguées

$$\begin{aligned} x_k &= x_{k-1} + \alpha_{k-1} d_{k-1} \\ &= x_{k-2} + \alpha_{k-2} d_{k-2} + \alpha_{k-1} d_{k-1} \\ &= \dots \\ &= x_0 + \alpha_0 d_0 + \dots + \alpha_{k-1} d_{k-1}. \end{aligned}$$

Par conséquent

$$x_k - x_0 = \alpha_0 d_0 + \dots + \alpha_{k-1} d_{k-1}, \quad k = 1, 2, \dots, n-1. \quad (3.20)$$

Écrivons maintenant : $\hat{x} - x_0$ sous la forme

$$\hat{x} - x_0 = (\hat{x} - x_k) + (x_k - x_0). \quad (3.21)$$

Multiplions (3.21) par $d_k^T Q$, on obtient

$$d_k^T Q (\hat{x} - x_0) = d_k^T Q (\hat{x} - x_k) \quad (3.22)$$

car

$$d_k^T Q (x_k - x_0) = \alpha_0 d_k^T Q d_0 + \dots + \alpha_{k-1} d_k^T Q d_{k-1} = 0.$$

Calculons maintenant $d_k^T Q (\hat{x} - x_k)$. On a

$$d_k^T Q (\hat{x} - x_k) = d_k^T [Q\hat{x} - Qx_k] = d_k^T [b - Qx_k] = -d_k^T (Qx_k - b) = -d_k^T g_k \quad (3.23)$$

donc (3.23) et (3.19) impliquent

$$\beta_k = -\frac{d_k^T g_k}{d_k^T Q d_k} = \alpha_k. \quad (3.24)$$

En conclusion on a

$$\hat{x} - x_0 = \beta_0 d_0 + \dots + \beta_{n-1} d_{n-1}$$

et

$$x_n - x_0 = \alpha_0 d_0 + \dots + \alpha_{n-1} d_{n-1},$$

or

$$\alpha_k = \beta_k \quad k = 0, \dots, n-1.$$

Donc

$$\hat{x} - x_0 = x_n - x_0.$$

Ce qui implique

$$\hat{x} = x_n. \quad \blacksquare$$

Remarque 3.3. Si on démarre du point x_1 , alors la solution optimale est atteinte au point x_{n+1} , c'est à dire qu'on aura

$$\hat{x} = x_{n+1}.$$

Théorème 3.5. Soit Q une matrice (n, n) symétrique et définie positive et $b \in \mathbb{R}^n$ et $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx - b^T x$. Considérons la suite $\{x_k\}_{k=1,2,\dots}$ de la manière suivante. On démarre par $x_1 \in \mathbb{R}^n$. A l'itération k , Le successeur x_{k+1} de x_k est donné par la relation suivante

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

où $d_k \in \mathbb{R}^n$ est une direction de recherche et $\alpha_k \in \mathbb{R}^+$ est le pas de recherche obtenu par une recherche linéaire exacte, α_k vérifie

$$f(x_k + \alpha_k d_k) = \min_{\alpha > 0} f(x_k + \alpha d_k). \quad (3.25)$$

Notons

$$g_{k+1} = \nabla f(x_{k+1}) = Qx_{k+1} - b. \quad (3.26)$$

Alors

$$g_{k+1} = g_k + \alpha_k Qd_k. \quad (3.27)$$

et

$$g_{k+1}d_k = 0, \quad k = 0, 1, \dots, n-1. \quad (3.28)$$

Preuve

En effet, on a

$$Q(x_{k+1} - x_k) = (Qx_{k+1} - b) - (Qx_k - b) = g_{k+1} - g_k. \quad (3.29)$$

D'un autre côté, on a

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

Donc

$$(x_{k+1} - x_k) = \alpha_k d_k, \quad (3.30)$$

(3.29) et (3.30) impliquent

$$g_{k+1} - g_k = \alpha_k Qd_k.$$

D'autre part et comme on l'a vu dans la preuve du théorème 3.2, considérons la fonction suivante

$$\varphi :]0, +\infty[\rightarrow \mathbb{R} : \alpha \rightarrow \varphi(\alpha) = f(x_k + \alpha d_k) \quad (3.31)$$

et le problème d'optimisation unidimensionnel suivant

$$\varphi(\alpha_k) = \min\{\varphi(\alpha) : \alpha \in]0, +\infty[\}. \quad (3.32)$$

Q est définie positive. Alors $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx - b^T x$ est strictement convexe sur \mathbb{R}^n . Par conséquent $\varphi(\alpha) = f(x_k + \alpha d_k)$ est strictement convexe sur $]0, +\infty[$ qui est un ouvert convexe. Donc α_k solution optimale de (3.32) si et seulement si α_k vérifie $\varphi'(\alpha_k) = 0$. Or

$$\varphi'(\alpha) = \nabla f(x_k + \alpha d_k)^T d_k. \quad (3.33)$$

Donc

$$\varphi'(\alpha_k) = \nabla f(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k = \nabla f(x_{k+1})^T d_k = g_{k+1}^T d_k. \quad (3.34)$$

Par conséquent

$$\varphi'(\alpha_k) = 0 \iff g_{k+1}^T d_k = 0.$$

■

Une des propriétés fondamentales de la méthode des direction conjuguées est théorème suivant

Théorème 3.6. *Dans la méthode des direction conjuguées, on a*

$$g_{k+1}^T d_i = 0, \quad k = 0, 1, \dots, n-1, \quad i = 0, \dots, k. \quad (3.35)$$

Preuve

$$\left\{ \begin{array}{l} g_{k+1}^T d_0 = 0 \\ g_{k+1}^T d_1 = 0 \\ \dots\dots\dots \\ g_{k+1}^T d_k = 0. \end{array} \right. \quad (3.36)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} k = 0(1 \text{ relations}) : \quad g_1 d_0 = 0, \\ k = 1(2 \text{ relations}) : \quad g_2 d_0 = 0, \quad g_2 d_1 = 0 \\ k = 2(3 \text{ relations}) : \quad g_3 d_0 = 0, \quad g_3 d_1 = 0, \quad g_3 d_2 = 0 \\ \dots\dots\dots \\ k = n-1(n \text{ relations}) : \quad g_n d_0 = 0, \quad g_n d_1 = 0, \dots, \quad g_n d_{n-1} = 0. \end{array} \right. \quad (3.37)$$

La preuve se fait par récurrence. Pour $k = 0$, (3.35) est vraie. En effet, d'après le théorème 3.5 et en prenant $k = 0$ dans (3.28), on obtient

$$g_1 d_0 = 0. \quad (3.38)$$

Supposons que (3.35) soit vraie à l'ordre $k-1$, c'est à dire que nous avons

$$g_k^T d_i = 0 \quad i = 0, 1, \dots, k-1. \quad (3.39)$$

Montrons que (3.35) reste vraie a l'ordre k , c'est à dire, montrons que

$$g_{k+1}^T d_i = 0, \quad i = 0, 1, \dots, k. \quad (3.40)$$

En effet, en utilisant (3.27) on a

$$g_{k+1}^T d_i = (g_k + \alpha_k Q d_k)^T d_i = g_k^T d_i + \alpha_k d_k^T Q d_i, \quad i = 0, \dots, k. \quad (3.41)$$

a) $0 \leq i \leq k - 1$

(3.39) implique que

$$g_k^T d_i = 0. \quad (3.42)$$

D'autre part, et d'après la Q conjugaison des vecteurs d_0, d_1, \dots, d_{n-1} , on a

$$d_k^T Q d_i = 0, \quad (3.43)$$

(3.42) et (3.43) impliquent (3.41) pour $0 \leq i \leq k - 1$.

b) $i = k$

Reste a prouver (3.35) pour $i = k$, c'est à dire montrons que

$$g_{k+1}^T d_k = 0.$$

Cette relation a été prouvée dans le théorème 3.5 (voir (3.28)). En conclusion (3.35) a été démontrée pour tout $k \leq n - 1$. ■

3.3 Méthode du gradient conjugué, cas quadratique

Soit Q une matrice (n, n) , symétrique et définie positive. On considère dans ce paragraphe le problème (PQSC) suivant

$$\min \{f(x) : x \in \mathbb{R}^n\} = \min \left\{ \frac{1}{2} x^T Q x - b^T x : x \in \mathbb{R}^n \right\}. \quad (PQSC)$$

Dans la méthode des directions conjugués, les directions d_0, \dots, d_{n-1} sont données a l'avance.

Dans la méthode du gradient conjugué, On démarre d'un point $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $d_0 = -g_0 = \nabla f(x_0) = Qx_0 - b$, les directions $d_k, k = 1, \dots, n - 1$ sont calculés a chaque itération.

A l'itération k

$$d_k = -g_k + \beta_{k-1} d_{k-1},$$

β_{k-1} est obtenu de sorte que d_k soit Q conjugué avec les autres vecteurs $d_i, i = 0, \dots, k - 1$. En d'autres termes on doit avoir

$$d_k^T Q d_i = 0 \quad i = 0, \dots, k - 1. \quad (3.44)$$

3.3.1 Algorithme de la méthode du gradient conjugué, cas quadratique

Principe de l'algorithme

On démarre d'un point quelconque $x_0 \in \mathbb{R}^n$.

Calculer $d_0 = -g_0 = b - Qx_0$, $\alpha_0 = -\frac{g_0^T d_0}{d_0^T Q d_0}$.

Supposons qu'à l'itération k on a x_k et d_k . Ceci nous permettra de calculer

$$g_k = Qx_k - b, \quad \alpha_k = -\frac{g_k^T d_k}{d_k^T Q d_k}, \quad x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k, \quad g_{k+1} = Qx_{k+1} - b, \quad d_{k+1} = -g_{k+1} + \beta \quad (3.45)$$

β_k est choisi de sorte que

$$d_{k+1}^T Q d_k = 0. \quad (3.46)$$

Puisque $d_{k+1} = -g_{k+1} + \beta_k d_k$, alors (3.46) donne

$$(-g_{k+1} + \beta_k d_k)^T Q d_k = 0,$$

ou encore

$$\beta_k d_k^T Q d_k = g_{k+1}^T Q d_k, \quad (3.47)$$

et finalement

$$\beta_k = \frac{g_{k+1}^T Q d_k}{d_k^T Q d_k}. \quad (3.48)$$

Algorithme

Algorithme du gradient conjugué. Cas quadratique

1. choisir $x_0 \in \mathbb{R}^n$.
2. Calculez $g_0 = Qx_0 - b$. Si $g_0 = 0$ stop. Sinon poser $d_0 = -g_0$. Poser $k = 0$
3. Calculez $\alpha_k = -\frac{g_k^T d_k}{d_k^T Q d_k}$.
- 4 Calculez $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$.
5. Calculez $g_{k+1} = Qx_{k+1} - b$. si $g_{k+1} = 0$ stop.
6. Calculez $\beta_k = \frac{g_{k+1}^T Q d_k}{d_k^T Q d_k}$.
7. Calculez $d_{k+1} = -g_{k+1} + \beta_k d_k$.
8. Poser $k = k + 1$ et allez à 3 .

3.3.2 Propriétés du gradient conjugué quadratique

La propriété fondamentale du gradient conjugué cas quadratique est que les directions $\{d_k\}_{k=0}^{n-1}$ sont Q conjugués. Ces directions vérifient comme on l'a vu dans l'algorithme

$$d_{k+1} = -g_{k+1} + \beta_k d_k$$

avec

$$\beta_k = \frac{g_{k+1}^T Q d_k}{d_k^T Q d_k}.$$

D'après le théorème 3.4, l'algorithme du gradient conjugué, version quadratique converge vers la solution optimale en n itérations.

Lemme 3.1. *Notons par*

$$g_k = \nabla f(x_k) = Qx_k - b$$

où $x_k, k = 0, \dots, n-1$ sont obtenus par l'algorithme du gradient conjugué quadratique. Alors on a

$$g_{k+1}^T g_j = 0, \quad k = 0, 1, \dots, n-1, \quad j = 0, 1, \dots, k$$

Preuve

D'après le théorème 3.5 et le théorème 3.6 on a

$$g_{k+1}^T d_j = 0, \quad k = 0, 1, \dots, n-1, j = 0, \dots, k, \quad (3.49)$$

et

$$g_{k+1} = g_k + \alpha_k Q d_k, \quad k = 0, \dots, n-1. \quad (3.50)$$

Fixons $k : 0 \leq k \leq n-1$ et considérons $0 \leq j \leq k$. D'après l'algorithme du gradient conjugué, on a

$$d_j = -g_j + \beta_{j-1} d_{j-1}, \quad 0 \leq j \leq k \quad (3.51)$$

(3.49) implique

$$0 = g_{k+1}^T (-g_j + \beta_{j-1} d_{j-1}) = -g_{k+1}^T g_j + \beta_{j-1} g_{k+1}^T d_{j-1}. \quad (3.52)$$

Or

$$g_{k+1}^T d_{j-1} = 0. \quad (3.53)$$

Par conséquent

$$g_{k+1}^T g_j = 0, \quad 0 \leq k \leq n-1, \quad 0 \leq j \leq k. \quad (3.54)$$

■

Théorème 3.7. *Les directions $\{d_0, d_1, \dots, d_{n-1}\}$ engendrées par l'algorithme du gradient conjugué quadratique sont Q conjuguées.*

3.3.3 Convergence de l'algorithme de la méthode du gradient conjugué quadratique

Théorème 3.8. Soit Q une matrice (n, n) , symétrique et définie positive et (PQSC) le problème de minimisation sans contraintes quadratique suivant

$$\min \{f(x) : x \in \mathbb{R}^n\} = \min \left\{ \frac{1}{2}x^T Qx - b^T x : x \in \mathbb{R}^n \right\}. \quad (\text{PQSC})$$

Démarrant d'un point $x_0 \in \mathbb{R}^n$ quelconque, considérons la suite $\{x_k\}$ générée par l'algorithme du gradient conjugué quadratique définie par

$$q_k = \nabla f(x_k) = Qx_k - b, \quad k = 0, 1, \dots$$

$$\beta_k = \frac{g_{k+1}^T Q d_k}{d_k^T Q d_k}, \quad k = 0, 1, \dots \quad (3.55)$$

$$d_k = \begin{cases} -g_0 & \text{si } k = 0 \\ -g_k + \beta_{k-1} d_{k-1} & \text{si } k \geq 1, \end{cases} \quad (3.56)$$

$$\alpha_k = -\frac{g_k^T d_k}{d_k^T Q d_k} \quad (3.57)$$

et

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k. \quad (3.58)$$

Alors la suite $\{x_k\}$ converge en n itérations vers la solution optimale \hat{x} du problème (PQSC), c'est à dire que x_n vérifie $x_n = \hat{x}$ et

$$Q\hat{x} = Qx_n = b. \quad (3.59)$$

Preuve

D'après le théorème 3.7, les directions $\{d_0, d_1, \dots, d_{n-1}\}$ engendrées par l'algorithme du gradient conjugué quadratique, sont Q conjuguées. L'algorithme de gradient conjugué est donc une méthode à directions conjuguées. D'autre part la fonction $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx - b^T x$ est strictement convexe et \mathbb{R}^n est un convexe ouvert. Donc d'après le théorème 3.4, la suite $\{x_k\}$ converge en n itérations vers la solution optimale \hat{x} du problème (PQSC), c'est à dire que x_n vérifie $x_n = \hat{x}$ et

$$Q\hat{x} = Qx_n = b.$$

■

3.4 Méthode du gradient conjugué, cas non-quadratique

3.4.1 Différentes formes du gradient conjugué

Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ non quadratique. On cherche à résoudre le problème non quadratique sans contraintes (PNQSC) suivant

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

Parmi les plus anciennes méthodes utilisées pour résoudre les problèmes du type (PNQSC), on peut citer la méthode du gradient conjugué, cette méthode est surtout utilisée pour les problèmes de grande taille.

Cette méthode a été découverte en 1952 par Hestenes et Steifel [1], pour la minimisation des fonctions quadratiques strictement convexes.

Plusieurs mathématiciens ont étendu cette méthode pour le cas non quadratique. Ceci a été réalisé pour la première fois, en 1964 par Fletcher et Reeves [2] (méthode de Fletcher-Reeves) puis en 1969 par Polak, d'autres variantes ont été étudiées plus tard [4], [5], [6], [7], [8], [9], [10].

Toutes ces méthodes génèrent une suite $\{x_k\}_{k \in \mathbb{N}}$ de la façon suivante

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k. \tag{3.60}$$

Le pas $\alpha_k \in \mathbb{R}$ est déterminé par une optimisation unidimensionnelle ou recherche linéaire du type Armijo, Goldstein ou Wolfe.

Les directions d_k sont calculées de façon récurrente par les formules suivantes

$$d_k = \begin{cases} -g_0 & \text{si } k = 0 \\ -g_k + \beta_{k-1} d_{k-1} & \text{si } k \geq 1, \end{cases} \tag{3.61}$$

avec $g_k = \nabla f(x_k)$ et $\beta_k \in \mathbb{R}$.

Les différentes valeurs attribuées à β_k définissent les différentes formes du gradient conjugué.

Si on note

$$y_{k-1} = g_k - g_{k-1}, \quad s_k = x_{k+1} - x_k \tag{3.62}$$

on obtient les variantes suivantes

- Gradient conjugué variante Fletcher - Reeves(FR)[2]

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

- Gradient conjugué variante Polak-Ribière(PR)[3]

$$\beta_k^{PRP} = \frac{g_k^T (g_k - g_{k-1})}{\|g_{k-1}\|^2}.$$

- Gradient conjugué variante Hestenes-Stiefel(HS)[1]

$$\beta_k^{HS} = \frac{g_k^T (g_k - g_{k-1})}{d_{k-1}^T (g_k - g_{k-1})}.$$

- Gradient conjugué variante Conjugate Descent Method(CD)[4]

$$\beta_k^{CD} = \frac{\|g_k\|^2}{-d_{k-1}^T g_{k-1}}.$$

où $\|\cdot\|$ est la norme Euclidienne. Récemment Dai et Yuan ont aussi introduit la forme suivante

$$\beta_k^{DY} = \frac{\|g_k\|^2}{d_{k-1}^T (g_k - g_{k-1})}.$$

Remarque 3.4. Dans le cas où f n'est pas quadratique on a

$$\beta_k^{HS} \neq \beta_k^{FR} \neq \beta_k^{PRP} \neq \beta_k^{CD} \neq \beta_k^{DY}. \quad (3.63)$$

Par conséquent, en appliquant l'algorithme du gradient conjugué non quadratique, en utilisant les coefficients β_k figurant dans (3.63), on obtient des suites $\{x_k\}_{k \in \mathbb{N}}$ différentes.

Théorème 3.9. Si $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx - b^T x$, avec Q symétrique définie positive, $x \in \mathbb{R}^n, b \in \mathbb{R}^n$ et si α_k est obtenue par une recherche linéaire. Notons,

$$\beta_k = \frac{q_{k+1}^T Q d_k}{d_k^T Q d_k},$$

alors on a

$$\beta_k = \beta_k^{HS} = \beta_k^{FR} = \beta_k^{PRP} = \beta_k^{CD} = \beta_k^{DY} \quad (3.64)$$

et l'algorithme du gradient conjugué quadratique génère la même suite $\{x_k\}_{k \in \mathbb{N}}$.

3.4.2 Méthode du gradient conjugué non quadratique

Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ non quadratique et (PNQSC) le problème de minimisation non quadratique sans contraintes suivant

$$\min \{f(x) : x \in \mathbb{R}^n\}. \quad (PNQSC)$$

Pour construire l'algorithme du gradient conjugué cas non quadratique, on peut s'inspirer de l'algorithme du gradient conjugué quadratique établi au chapitre précédent. Contrairement au cas quadratique, on n'a pas de matrice Q . Par conséquent on n'a pas de directions Q conjuguées. Comme dans le cas quadratique, l'algorithme du gradient conjugué cas non quadratique génère une suite $\{x_k\}_{k \in \mathbb{N}}$ de la manière suivante

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

L'algorithme démarre d'un point $x_0 \in \mathbb{R}^n$ quelconque.

A l'itération k

Supposons qu'on ait le vecteur $x_k \in \mathbb{R}^n$ et la direction d_{k-1} . Ceci nous permet de calculer $\nabla f(x_k)$ au lieu $g_k = Qx_k - b$ dans le cas quadratique. Pour avoir x_{k+1} , on a besoin de calculer α_k et d_k .

Calcul de d_k :

$$d_k = -\nabla f(x_k) + \beta_{k-1} d_{k-1}. \quad (3.65)$$

On a huit façons pour calculer β_{k-1}

$$\begin{aligned} \beta_{k-1}^{HS} &= \frac{\nabla f(x_k)^T (\nabla f(x_k) - \nabla f(x_{k-1}))}{d_{k-1}^T (\nabla f(x_k) - \nabla f(x_{k-1}))}, \\ \beta_{k-1}^{PRP} &= \frac{\nabla f(x_k)^T (\nabla f(x_k) - \nabla f(x_{k-1}))}{\|\nabla f(x_{k-1})\|^2}, \\ \beta_{k-1}^{FR} &= \frac{\|\nabla f(x_k)\|^2}{\|\nabla f(x_{k-1})\|^2}, \\ \beta_{k-1}^{DY} &= \frac{\|\nabla f(x_k)\|^2}{d_{k-1}^T (\nabla f(x_k) - \nabla f(x_{k-1}))}, \\ \beta_{k-1}^{CD} &= \frac{\|\nabla f(x_k)\|^2}{d_{k-1}^T \nabla f(x_{k-1})}, \end{aligned}$$

Calcul de α_k

Ayant obtenu d_k , rappelons que α_k vérifie

$$f(x_k + \alpha_k d_k) = \min \{f(x_k + \alpha d_k) : \alpha \in]0, +\infty[\}. \quad (3.66)$$

Dans le cas où $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx - b$, Q est matrice symétrique définie positive, α_k solution de (3.66) est donnée par la relation suivante

$$\alpha_k = -\frac{g_k^T d_k}{d_k^T Q d_k}. \quad (3.67)$$

Dans le cas où f n'est pas quadratique, α_k ne peut pas être calculée par la formule (3.67). Calculez dans ce cas α_k par d'autres méthodes α_k peut être calculée par une recherche linéaire inexacte d'Armijo ou Goldstein ou Wolfe.

Algorithme

Etape1

Choisir $x_0 \in \mathbb{R}^n$ Quelconque et $\epsilon > 0$.

Etape2

Poser $k = 0$

Calculez $g_0 = \nabla f(x_0)$. Posez $d_0 = -g_0$.

Etape3

Calculez α_k en utilisant une recherche linéaire exacte ou inexacte d'Armijo ou de Goldstein ou de Wolfe ou de Wolfe Forte

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

Etape4

Si $\|\nabla f(x_{k+1})\| < \epsilon_1$ Stop, $x^* = x_{k+1}$ Sinon allez à Etape 5.

Etape5

Calculez $g_{k+1} = \nabla f(x_{k+1})$

Calculez β_k par l'une des manières suivantes

$$\beta_k = \beta_k^{HS} \text{ ou } \beta_k = \beta_k^{FR} \text{ ou } \beta_k = \beta_k^{PRP} \text{ ou } \beta_k = \beta_k^{CD} \text{ ou } \beta_k = \beta_k^{DY}.$$

Calculez

$$d_{k+1} = -g_{k+1} + \beta_k d_k$$

Posez $k = k + 1$ et allez a Etape 3.

Projet de TP

Considérons la fonction $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, dite d'Orne suivante

$$(x_1, x_2, \dots, x_n) \rightarrow f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \left[\sum_{i=1}^n i x_i^2 \right]^2$$

Remarquons d'abord que la solution optimale est $x^* = (0, \dots, 0)$ et $f(x^*) = 0$.

On applique l'algorithme du gradient conjugué versions HS, FR et PRP avec la recherche linéaire inexacte de Wolfe. On démarre du point $x_0 = (1, 1, \dots, 1)$. On arrête l'algorithme lorsque

$$\|\nabla f(x_k)\| < 10^{-5}.$$

Écrire le programme en Fortran. Donner les résultats numériques pour $n = 100$, $n = 1000$, $n =$

10000. Donner le nombre d'itérations nécessaires pour arriver a de tels résultats ($\|\nabla f(x_k)\| < 10^{-5}$).

Conclure.

Le programme en Fortran 95 pour la fonction de Oren

```

program CGWP
implicit none
integer, parameter : n = 1000
integer ik,j,k.cont,test.
double precision y(n),g(n),gp(n)
double precision d(n), eps
double precision alphd,alph0
double precision b, w, alphg, f0, f1
print*, "ENTRER Yi "
do ik=1,n
y(ik)=1
enddo
print*, "ENTRER EPS "
read*,eps
b=0.7 ;w=0.1 ;cont=1 ;test=0
g=df(y) ;f0=f(y) ;d=-g ;j=1 ;k=1
do while(sqrt(dot_product(g, g)) > eps)
alphg=0 ;alphd=100 ;alph0=1
gp=g
do
cont=cont+1
f1=f(y+alph0*d)
if(f1 <= f0 + w*alph0*dot_product(gp, d))then
g=df(y + alph0*d)
if(dot_product(g, d) >= b*dot_product(gp, d))then
exit
else
alphg=alph0 ;alph0=(alphg+alphd)/2.
endif
else

```

```

alphd=alph ;alph0=(alphg+alphd)/2.
endif
enddo
y = y + alph0*d
k=k+1
if(j<n)then
d = -g + (dot_product(g, g)/dot_product(gp, gp)) * d
j=j+1
if(dot_product(g, d) >= 0)then
j=1 ;test=test+1
d=-g
endif
else
d=-g
j=1
endif
if(f0-f1<1.e-14)then
print*
print*,'LA NORME DU GRADIENT '
print*,'(e20.2) ',sqrt(dot_product(g, g))
g=0
endif
f0=f1
enddo
print*
print*,'LE NOMBRE D ITÉRATIONS '
print*,k
print*,'LA VALEUR DE LA FUNCTIONS '
print '(e20.2) ',f(y)
print*,'NOMBRE D EVALUATIONS FONCTIONNELLES ',cont
contains
function f(u)
double precision f,u(n)

```

```

integer i
f=0
do i=1,n
f=f+i*u(i)**2
enddo
f=f**2
endfunction
function df(u)
double precision df(n),u(n),sm
integer i
sm=0
do i=1,n
sm=sm+i*u(i)**2
enddo
do i=1,n
df(i)=4*i*u(i)*sm
enddo
endfunction
end
    
```

Résultats numériques

n	k : nombre itérations	$f(x_k)$
100	64	0.80×10^{-8}
1000	183	0.18×10^{-7}
10000	620	0.85×10^{-8}

Tableau 1. ($\beta = \beta^{HS}$)

n	k : nombre itérations	$f(x_k)$
100	69	0.29×10^{-7}
1000	223	0.12×10^{-7}
10000	746	0.16×10^{-7}

Tableau 2. ($\beta = \beta^{PR}$)

n	k : nombre itérations	$f(x_k)$
100	64	0.78×10^{-8}
1000	174	0.20×10^{-7}
10000	833	0.95×10^{-9}

Tableau 3. ($\beta = \beta^{FR}$)

Avant tout rappelons que les différentes variantes du gradient conjugué génèrent une suite $\{x_k\}_{k \in \mathbb{N}}$ dans \mathbb{R}^n définie par $x_0 \in \mathbb{R}^n$ quelconque et les itérations

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (GC1)$$

avec α_k est le résultat d'une recherche linéaire exacte ou inexacte du type Armijo ou Goldstein ou Wolfe ou Wolfe forte. Les directions sont calculées itérativement par la formule

$$d_k = \begin{cases} -g_0 & \text{si } k = 0 \\ -g_k + \beta_{k-1} d_{k-1}, & k \geq 1 \end{cases} \quad (GC2)$$

avec $g_k = \nabla f(x_k)$ et

$$\beta_k = \beta_k^{HS} \quad \text{ou} \quad \beta_k = \beta_k^{FR} \quad \text{ou} \quad \beta_k = \beta_k^{PRP} \quad \text{ou} \quad \beta_k = \beta_k^{CD} \quad \text{ou} \quad \beta_k = \beta_k^{DY} \quad (GC3)$$

3.5 Théorème de Zoutendijk

Hypothèses C1 et C2

Rappelons dans ce qui suit les deux conditions suivantes que toutes les méthodes du gradient conjugué doivent vérifier (ou au moins l'une d'entre elles) pour prouver les résultats de convergence.

Condition C1

Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. On dit que f vérifie la condition C1 si f est continuellement différentiable dans un voisinage $V(\Gamma)$ de $\Gamma = \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leq f(x_1) : x_1 \in \mathbb{R}^n \text{ point initial}\}$ et si $\nabla f(x)$ vérifie la condition de Lipschitz dans $V(\Gamma)$, c'est à dire, il existe une constante L telle que

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \leq L\|x - y\| = \text{pour tout } x, y \in V(\Gamma).$$

Condition C2

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

$$\|x\| \leq B : \forall x \in \Gamma.$$

L'outil de base utilisé par les différentes variantes du gradient conjugué avec une recherche linéaire inexacte est le théorème suivant du a Zoutendijk.

Théorème 3.10. (Théorème de Zoutendijk) *Considérons une méthode itérative quelconque générant une suite $\{x_k\}$ de la forme*

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

d_k étant une direction de descente et α_k est une recherche linéaire inexacte de Wolfe. Supposons aussi que f vérifie la Condition C1 , alors on a

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2} < \infty. \quad (3.68)$$

3.6 Utilisation du théorème de Zoutendijk pour démontrer la convergence globale

La condition $\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2} < \infty$ est équivalente à $\sum_{k=1}^{\infty} \cos^2(\theta_k) \|g_k\|^2 < \infty$ où θ_k est l'angle que fait d_k avec $-g_k$. Il est évident de voir que si

$$\cos(\theta_k) \geq \delta > 0,$$

pour tout k , alors on a

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

Dans les différentes méthodes du gradient conjugué on n'arrive pas à démontrer le résultat précédent i.e, $\lim_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0$, mais seulement

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0. \quad (3.69)$$

La condition (3.69) implique qu'il existe une sous suite de $\{\|g_k\|\}$ qui tend vers zéro.

Conditions suffisantes associés au théorème de Zoutendijk pour démontrer (3.69)

Pour démontrer (3.69) on associe au théorème de Zoutendijk les 2 hypothèses suivantes

Hypothèse 1

La descente suffisante est assurée i.e, il existe une constante c indépendante de k telle que

$$g_k^T d_k \leq -c \|g_k\|^2.$$

Hypothèse 2

Il existe une constante β telle que

$$\|d_k\|^2 \leq \beta k.$$

Donc on a

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{relation de Zoutendijk } \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2} < \infty \right) \\ \text{Hypothèse 1} \\ \text{Hypothèse 2} \end{array} \right\} \implies \left\{ \liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0 \right\}.$$

Remarque importante

La condition Hypothèse 1 est plus forte que la descente. En effet

$$g_k^T d_k \leq -c \|g_k\|^2 \implies g_k^T d_k < 0.$$

La condition Hypothèse 1 n'est pas nécessaire pour avoir $\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0$. Dai-Yuan ont montré la convergence globale seulement avec la condition de descente : $g_k^T d_k < 0$.

D'autre part la condition Hypothèse 1 i.e. $g_k^T d_k \leq -c \|g_k\|^2$ n'est pas suffisante toute seule, pour avoir la convergence globale.

Définition 3.3. *Nous dirons qu'une méthode du gradient conjugué converge globalement si l'une des deux conditions suivantes est vérifiée*

- a) $g_{k_0} = 0$, pour un certain $k_0 \in \mathbb{N}$
- b) $\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0$

Une autre version du théorème de Zoutendijk se trouve dans (Théorème 3.10). Ce sera l'objet du théorème suivant

Théorème 3.11. *Considérons une méthode itérative quelconque générant une suite $\{x_k\}$ de la forme*

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

d_k étant une direction de descente et α_k est une recherche linéaire inexacte de Wolfe forte. Supposons aussi que f vérifie la Condition C1. Alors ou bien

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0,$$

ou

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

3.7 Convergence de méthode du gradient conjugué

Les méthodes FR, DY et CD ont toutes comme numérateur commun le terme $\|g_{k+1}\|^2$. Une différence fondamentale qui caractérise ces méthodes par rapport aux autres méthodes du gradient conjugué où β_k est calculé différemment, est que les théorèmes de convergence globale nécessitent seulement la condition de Lipschitz Condition C1 et n'ont pas besoin de la condition de bornétude Condition C2.

3.7.1 Méthode de Dai-Yuan

Cette méthode été découverte par Y. H. Dai et Y. Yuan [24] , β_k est égale à

$$\beta_k^{DY} = \frac{\|g_{k+1}\|^2}{d_k^T y_k}, \quad y_k = g_{k+1} - g_k \quad (DY)$$

Cette méthode est fondamentalement différente de la méthode Fletcher Reeves et aussi de la méthode CD. Avec une recherche linéaire de Wolfe, la méthode de DY génère toujours des directions de descente. En plus elle est globalement convergente avec des hypothèses très générales sur la fonction objectif f . On exige seulement que f soit continuellement différentiable et que le gradient soit Lipschitzien, c'est à dire que f vérifie l'hypothèse Condition C1

Théorèmes de convergence de Dai et Yuan exigeant seulement la condition de Wolfe et la condition de Lipschitz C1

Supposons que la condition de Lipschitz C1 soit satisfaite. Considérons une méthode du type GC1, GC2, GC3 où β_k satisfait à $\beta_k^{DY} = \frac{\|g_{k+1}\|^2}{d_k^T y_k}$, $y_k = g_{k+1} - g_k$ et le pas α_k satisfait aux conditions de (Wolfe 1) et (Wolfe 2) suivantes

$$\begin{aligned} f(x_k + \alpha_k d_k) &\leq f(x_k) + \rho d_k^T g_k \\ d_k^T g_{k+1} &\geq \sigma d_k^T g_k, \end{aligned}$$

avec $0 < \rho < \sigma < 1$. Alors toutes les directions générées par ces méthodes sont de descente, autrement dit

$$d_k^T g_k < 0, \quad \forall k \geq 1. \quad (3.70)$$

Algorithme de la méthode de Dai-Yuan

Etape 0 (initialisation)

Soit x_0 le point de départ, $g_0 = \nabla f(x_0)$, poser $d_0 = -g_0$.

Poser $k = 0$ et aller à l'étape 1.

Etape 1

Si $g_k = 0$, stop ($x^* = x_k$), test d'arrêt.

Sinon aller à l'étape 2 .

Etape 2

Définir $x_{k+1} = x_k + \lambda_k d_k$ avec

$$d_{k+1} = -g_{k+1} + \beta_{k+1}^{DY} d_k,$$

où

$$\beta_{k+1}^{DY} = \frac{\|g_{k+1}\|^2}{d_k^T [g_{k+1} - g_k]} = \frac{\|g_{k+1}\|^2}{d_k^T y_k}.$$

Poser $k = k + 1$ et aller a l'étape 1 .

CONCLUSION

A travers ce travail nous avons voulu montrer comment les recherches linéaires inexactes pouvaient contribuer dans la convergence des algorithmes des méthodes du gradient conjugué. Nous avons explicité les recherches linéaires inexactes d'Armijo, Goldstein et Wolfe et nous les avons étendu aux recherches linéaires inexacte en particulier d'Armijo et Wolfe.

Nous avons aussi présenté important résultat de convergence de la méthode du gradient conjugué avec les recherches linéaires inexactes d'Armijo, Goldstein et Wolfe, nous avons fait des tests numériques.

- [1] M. Al-Baali, Descent property and global convergence of the FletcherReeves method with inexact line search, IMA J. Numer. Anal., 5(1985), pp. 121 – 124
- [2] L. Armijo, Minimization of function having lipschitz continuous first partial derivatives, Pacific Journal of Mathematics, Vol. 16(1966), pp. 1 – 3.
- [3] L. Andrieu, Optimisation sous contrainte en probabilité, THESE présentée pour l'obtention du titre de Docteur de l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, décembre (2004)
- [4] M. Belloufi, R. Benzine, and Y. Laskri, Modification of the Armijo line search to satisfy the convergence properties of HS method, An International Journal of Optimization and Control : Theories & Applications (IJOCTA), 141(2013), 145 – 152.
- [5] M. Belloufi and R. Benzine, Global Convergence Properties of the HS Conjugate Gradient Method. Applied Mathematical Sciences, Vol. 7 , 142(2013), 7077 – 7091
- [6] E. M. L. Beale, A derivative of conjugate gradients, in Numerical Methods for Nonlinear Optimization, F. A. Lootsma, ed., Academic Press, London, (1972), pp. 39-43.
- [7] M. S. Bazaraa and H. D. Sherali, et C. M. Shetty, Nonlinear Programming. Theory and Algorithms, Wiley-Interscience(1993).

- [8] I. Bongartz, A. R. Conn, N. I. M. Gould, and P. L. Toint. CUTE : constrained and unconstrained testing environments, *ACM Trans. Math. Software*, 21(1995), pp. 123 – 160.
- [9] C. G. Broyden, The convergence of a class of doublerank minimization algorithms 1. general considerations, *J. Inst. Math. Appl.*, 6(1970), pp. 76 – 90.
- [10] A. Buckley, Conjugate gradient methods, in *Nonlinear Optimization 1981*, M. J. D. Powell, ed., Academic Press, London, (1982), pp. 1722.
- [11] C. W. Carroll, The created reponse surface technique for optimizing nonlinear restrained systems, *Operations Res.*, Vol. 9(1961), pp. 169 – 84.
- [12] H. P. Crowder and P. Wolfe, Linear convergence of the conjugate gradient method, *IBM J. Res. Dev.*, 16(1969), pp. 431 – 433.
- [13] X.D. Chen and J. Sun, Global convergence of a two-parameter family of conjugate gradient methods without line search, *Journal of Computational and Applied Mathematics* 146(2002)37 – 45.
- [14] A. Cauchy, Analyse mathématique, Méthode générale pour la résolution des systèmes d'équations simultanées, *Comptes Réntus de l 'Academie des Sciences de Paris*, (1847) t-25, pp.536 – 538.
- [15] Y. H. Dai, Analyses of conjugate gradient methods, Ph.D. thesis, Institute of Computational Mathematics and Scientific/Engineering Computing, Chinese Academy of Sciences, 1997.
- [16] Y. H. Dai, New properties of a nonlinear conjugate gradient method, *Numer. Math.* 89(2001), pp. 83 – 98.
- [17] Y. H. Dai, A nonmonotone conjugate gradient algorithm for unconstrained optimization, *J. Syst. Sci. Complex.*, 15(2002), pp. 139 – 145.

- [18] Y. H. Dai, J. Y. Han, G. H. Liu, D. F. Sun, H. X. Yin, and Y. Yuan. Convergence properties of nonlinear conjugate gradient methods, *SIAM J. Optim.*, 10 (1999). pp. 345 – 358.
- [19] Y. H. Dai and L. Z. Liao, New conjugacy conditions and related nonlinear conjugate gradient methods, *Appl. Math. Optim.*, 43(2001), pp. 87 – 101
- [20] Y. H. Dai and Q. Ni, Testing different conjugate gradient methods for large-scale unconstrained optimization, *J. Comput. Math.*, 21 (2003), pp. 311 – 320.
- [21] Y. H. Dai and Y. Yuan, Convergence properties of the Fletcher-Reeves method, *IMA J. Numer. Anal.*, 16 (1996), pp. 155 – 164.
- [22] Y. H. Dai and Y. Yuan, Convergence properties of the conjugate descent method, *Adv. Math. (China)*, 26(1996), pp. 552 – 562.
- [23] Y. H. Dai and Y. Yuan, Further studies on the Polak-Ribière-Polyak method, Research report ICM-95-040, Institute of Computational Mathematics and Scientific/Engineering Computing, Chinese Academy of Sciences, 1995 .
- [24] J.J.Moré, B.S.Garbow and K.E. Hillstrom, *Testing Unconstrained Optimization Software*.