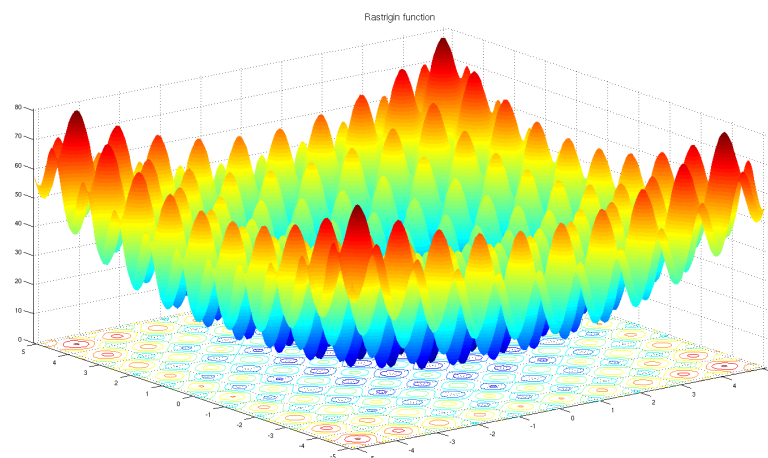


# ANALYSE NUMÉRIQUE

## Notes de cours



Jean-Philippe Gayon et Viet Hung Nguyen (ISIMA - Université Clermont Auvergne)

1<sup>er</sup> février 2022

# Table des matières

<b>I</b>	<b>Analyse spectrale</b>	<b>3</b>
<b>1</b>	<b>Préambule</b>	<b>4</b>
<b>2</b>	<b>Rappels</b>	<b>5</b>
2.1	Déterminants . . . . .	5
2.2	Éléments propres . . . . .	6
2.3	Quelques propriétés des éléments propres . . . . .	8
2.4	Matrices semblables . . . . .	8
2.5	Diagonalisation . . . . .	9
<b>3</b>	<b>Méthode de la puissance itérée</b>	<b>12</b>
3.1	Principe . . . . .	12
3.2	Quotient de Rayleigh . . . . .	13
3.3	Algorithmes . . . . .	13
3.4	Vitesse de convergence . . . . .	14
3.5	Calcul de la plus petite valeur propre . . . . .	15
3.6	Méthode de déflation . . . . .	15
3.7	Généralisation du théorème à des matrices non diagonalisables . . . . .	15
<b>II</b>	<b>Optimisation non linéaire</b>	<b>16</b>
<b>4</b>	<b>Introduction</b>	<b>17</b>
<b>5</b>	<b>Optimisation à une variable</b>	<b>18</b>
5.1	Conditions d’optimalité . . . . .	18
5.2	Fonction convexe . . . . .	21
5.3	Méthode de dichotomie . . . . .	23
5.4	Fonction unimodale . . . . .	23

<b>6</b>	<b>Optimisation à plusieurs variables</b>	<b>25</b>
6.1	Différentiation . . . . .	27
6.2	Formes quadratiques . . . . .	29
6.3	Matrices définies positives . . . . .	29
6.4	Conditions d'optimalité . . . . .	30
6.5	Fonction convexe . . . . .	30
6.6	Fonction quadratique . . . . .	31
6.7	Méthodes de descente . . . . .	32
6.8	Méthode du gradient . . . . .	32
6.9	Méthode de Newton . . . . .	34
6.10	Méthode du gradient conjugué pour des fonctions quadratiques . . . . .	35
6.11	Problèmes de maximisation . . . . .	35

Première partie

**Analyse spectrale**

# Chapitre 1

## Préambule

L'objectif de ce chapitre est de déterminer les valeurs propres et les vecteurs propres d'une matrice carrée  $A$  d'ordre  $n$  à l'aide de méthodes numériques efficaces. Rappelons que le scalaire  $\lambda$  est une valeur propre de  $A$  si il existe un vecteur  $x \neq 0$  tel que

$$Ax = \lambda x$$

Le vecteur  $x$  est alors appelé vecteur propre associé à la valeur propre  $\lambda$ .

# Chapitre 2

## Rappels

Les quelques rappels qui suivent ne remplacent en aucun cas un cours d'algèbre linéaire mais doivent pouvoir permettre à un étudiant de suivre ce qui suit.

### 2.1 Déterminants

Soit  $A = (a_{ij})$  une matrice carrée d'ordre  $n$ . On utilisera les notations suivantes pour le déterminant de la matrice  $A$ .

$$\text{Déterminant de } A = \det(A) = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix}$$

#### Matrice $1 \times 1$

$$A = (a_{11}) \\ \det(A) = |a_{11}| = a_{11}$$

#### Matrice $2 \times 2$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u & v \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \det(A) &= \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} \\ &= \text{Aire orientée du parallélogramme formé par } u \text{ et } v \\ &= \|u\| \|v\| \sin(\theta) \end{aligned}$$

où  $\theta$  désigne l'angle orienté formé par les vecteurs  $u$  et  $v$ .

**Propriété 1.**  $\det(A) = 0$  ssi  $u$  et  $v$  sont colinéaires (aire du parallélogramme nulle) ssi  $u$  et  $v$  sont linéairement dépendants.

#### Matrice $3 \times 3$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u & v & w \end{pmatrix}$$

Développement du déterminant suivant la 1ère ligne :

$$\begin{aligned} \det(A) &= \begin{vmatrix} a_{11}^+ & a_{12}^- & a_{13}^+ \\ a_{21}^- & a_{22}^+ & a_{23}^- \\ a_{31}^+ & a_{32}^- & a_{33}^+ \end{vmatrix} = a_{11} \begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} - a_{12} \begin{vmatrix} a_{11} & a_{13} \\ a_{21} & a_{23} \end{vmatrix} + a_{13} \begin{vmatrix} a_{21} & a_{22} \\ a_{31} & a_{32} \end{vmatrix} \\ &= \text{Aire orientée du volume formé par } u, v, w \end{aligned}$$

**Propriété 2.**  $\det(A) = 0$  ssi  $u, v, w$  sont coplanaires (volume nul) ssi  $u, v, w$  sont linéairement dépendants

#### Matrice $n \times n$

Soit  $A = (a_{ij})$  une matrice  $n \times n$ . On note  $A_{ij}$  la sous-matrice de  $A$  où l'on supprime la ligne  $i$  et la colonne  $j$ .

On peut développer le déterminant de  $A$  comme suit : Développement suivant la  $i$ -ème

ligne ou suivant la  $j$ -ème colonne :

$$\begin{aligned} \det(A) &= \sum_{j=1}^n (-1)^{i+j} a_{ij} \det(A_{ij}) && \text{(développement suivant la } i\text{-ème ligne)} \\ &= \sum_{i=1}^n (-1)^{i+j} a_{ij} \det(A_{ij}) && \text{(développement suivant la } j\text{-ème ligne)} \end{aligned}$$

Une manière de calculer un déterminant quelconque est d'itérer le développement en ligne ou en colonne jusqu'à obtenir des matrices  $1 \times 1$ . On parle alors de méthode de Laplace. Malheureusement, cette méthode a une complexité exponentielle en  $n \times (n-1) \times \dots \times 1 = n!$  et ne permet pas de calculer le déterminant de grandes matrices.

**Exercice 1.** Développer suivant la 3-ème colonne le déterminant de la matrice suivante.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 4 & 6 & 7 & 8 \\ 9 & 10 & 11 & 12 \\ 13 & 14 & 15 & 16 \end{pmatrix}$$

## Quelques propriétés des déterminants

Voici quelques propriétés classiques du déterminant :

- Matrice diagonale ou triangulaire :  $\det(A) = \prod_{i=1}^n a_{ii}$
- $\det(A^T) = \det(A)$
- $\det(AB) = \det(A)\det(B)$
- $\det(A^{-1}) = \frac{1}{\det(A)}$  si  $A$  est inversible
- $A$  est inversible si et seulement si  $\det(A) \neq 0$ 
  - Si  $\det(A) = 0$ , les vecteurs colonne (ou ligne) sont linéairement dépendant
  - Si  $\det(A) \neq 0$ , les vecteurs colonne (ou ligne) sont linéairement indépendants

Voici par ailleurs l'effet sur le déterminant de quelques transformations élémentaires :

1.  $L_i \leftrightarrow L_j$  ou  $C_i \leftrightarrow C_j$  (permutation deux lignes ou deux colonnes) : le déterminant change de signe ;
2.  $L_i \leftarrow L_i + \alpha L_j$  ou  $C_i \leftarrow C_i + \alpha C_j$  : déterminant est inchangé ;
3.  $L_i \leftarrow \alpha L_i$ , le déterminant est multiplié par  $\alpha$  ;
4.  $B = \alpha A$  : chaque ligne est multiplié par  $\alpha$  d'où  $\det(B) = \alpha^n \det(A)$  avec  $n$  l'ordre de  $A$ .

L'algorithme du Pivot de Gauss n'utilisant que des opérations de type 1 et 2, la matrice obtenue à la fin a le même déterminant que  $A$  au signe près. Ainsi,

$$\det(A) = (-1)^k \prod_{i=1}^n p_i$$

où les  $p_i$  sont les pivots et  $k$  le nombre de permutations de lignes (ou de colonnes). On peut donc utiliser l'algorithme du pivot de Gauss pour calculer le déterminant d'une matrice, avec une complexité en  $O(n^3)$ .

**Exercice 2.** Calculer à la main les déterminants des matrices suivantes

$$A = \begin{pmatrix} 10 & 20 & 30 & 40 \\ 10 & 10 & 10 & 10 \\ 5 & 6 & 0 & 2 \\ 0 & 3 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$B = \begin{pmatrix} 10 & 20 & 30 & 40 \\ 10 & 10 & 10 & 10 \\ 5 & 6 & 4 & 2 \\ 2 & 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

Correction :  $\det(A) = -2000$ ,  $\det(B) = 0$ . *Astuce :*  $L_3 \leftarrow L_3 - 2L_4$ .

**Exercice 3.** Donner les polynômes caractéristiques de l'exercice 1 de la feuille de TD.

**Exercice 4.** La matrice de Hilbert  $\mathcal{H}_n$  est la matrice définie par  $\mathcal{H}_n(i, j) = \frac{1}{i+j-1}$  pour  $i, j = 1, \dots, n$ . Montrer que

$$\det(\mathcal{H}_n) = \prod_{k=0}^{n-1} \frac{(k!)^3}{(n+k)!}.$$

## 2.2 Éléments propres

**Définition 1.** Soit  $A$  une matrice carrée d'ordre  $n$ . Un scalaire  $\lambda \in \mathbb{R}$  est valeur propre de  $A$  ssi il existe  $x \neq 0$  tel que

$$Ax = \lambda x \Leftrightarrow (A - \lambda I)x = 0$$

On dira qu'un tel  $x$  est vecteur propre associé à la valeur propre  $\lambda$ .

On appelle spectre de  $A$  (noté  $\text{Sp}(A)$ ) l'ensemble des valeurs propres de  $A$ . On appelle par ailleurs rayon spectral de  $A$  (noté  $\rho(A)$ ) le plus grand module des valeurs propres de  $A$  :

$$\rho(A) = \max_{\lambda \in \text{Sp}(A)} |\lambda|.$$

Enfin, on appelle espace propre associé à  $\lambda$  (noté  $\text{SEP}(A, \lambda)$ ) l'ensemble des vecteurs propres associés la valeur propre  $\lambda$ .

*Exemple.* Soit  $A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & -4 \end{pmatrix}$  On peut vérifier que  $A \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 3 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ . Donc 3 est valeur propre de  $A$  et  $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}^T$  est un vecteur propre associé.

On peut montrer que les valeurs propres de  $A$  sont 2, 3 et -4. Ainsi, le spectre de  $A$  est  $\text{Sp}(A) = \{2, 3, -4\}$  et le rayon spectral est  $\rho(A) = 4$ .

Cherchons les sous-espace propre associé à la valeur propre 3 en résolvant le système linéaire suivant.

$$Ax = 3x \Leftrightarrow \begin{cases} 2x_1 = 3x_1 \\ 3x_2 = 3x_2 \\ 4x_3 = 3x_3 \end{cases} \Leftrightarrow x_1 = x_3 = 0$$

Ainsi,

$$\text{SEP}(A, 3) = \left\{ x_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, x_2 \in \mathbb{R} \right\} = \text{Vect} \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\}$$

## Interprétation géométrique

**Exercice 5.** Pour les transformations suivantes du plan  $(\mathbb{R}^2)$ , donner la matrice  $A$  associée, les valeurs propres et les sous-espaces propres :

- Identité
- Symétrie centrale
- Homothétie
- Symétrie axiale
- Projection orthogonale sur une droite
- Rotation

*Astuce : ne pas faire de calculs mais des raisonnements géométriques, en s'aidant de figures.*

Correction :

- Identité

$$\begin{aligned} A &= I \\ \text{Sp}(A) &= \{1\} \\ \text{SEP}(A, 1) &= \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

- Symétrie centrale

$$\begin{aligned} A &= I \\ \text{Sp}(A) &= \{-1\} \\ \text{SEP}(A, 1) &= \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

- Homothétie de rapport  $\alpha$

$$\begin{aligned} A &= \alpha I \\ \text{Sp}(A) &= \{\alpha\} \\ \text{SEP}(A, \alpha) &= \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

- Projection orthogonale sur  $\text{Vect}(u)$ , la droite portée par le vecteur  $u$

$$\begin{aligned} A &= \frac{uu^\top}{u^\top u} \\ \text{Sp}(A) &= \{1, 0\} \\ \text{SEP}(A, 1) &= \text{Vect}(u) \\ \text{SEP}(A, 0) &= \text{Vect}(u)^\perp \end{aligned}$$

- Symétrie axiale par rapport à la droite portée par le vecteur  $u$  :

$$\begin{aligned} \text{Sp}(A) &= \{-1, 1\} \\ \text{SEP}(A, 1) &= \text{Vect}(u) \\ \text{SEP}(A, -1) &= \text{Vect}(u)^\perp \end{aligned}$$

- Rotation dans  $\mathbb{R}^2$  d'angle  $\theta$

$$A = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix}$$

Il n'y a pas de valeur propre réelle mais il y a des valeurs propres complexes, par exemple  $e^{i\theta}$ .

## Déterminer les valeurs propres

Le système linéaire  $(A - \lambda I)x = 0$  admet des solutions non nulles si et seulement si

$$\det(A - \lambda I) = 0.$$

On appelle polynôme caractéristique le polynôme  $\chi_A(\lambda) = \det(A - \lambda I)$ .

**Propriété 3.** Le polynôme caractéristique d'une matrice d'ordre  $n$  est de degré  $n$ .

**Théorème 1.** Les valeurs propres de  $A$  sont les racines (éventuellement complexes) du polynôme caractéristique de  $A$ .

On appelle multiplicité algébrique d'une valeur propre l'ordre de multiplicité en tant que zéro du polynôme caractéristique.

## Déterminer les vecteurs propres

Pour déterminer les vecteurs propres associés à une valeur propre  $\lambda$ , il suffit de résoudre le système linéaire

$$Ax = \lambda x \Leftrightarrow (A - \lambda I)x = 0 \Leftrightarrow x \in \text{Ker}(A - \lambda I)$$



Ainsi, nous avons  $\text{SEP}(A, \lambda) = \text{Ker}(A - \lambda I)$ . On appelle multiplicité géométrique de la valeur propre  $\lambda$  la dimension de l'espace propre associé, soit  $\dim(\text{SEP}(A, \lambda))$ .

**Exercice 6.** *Exercice 1 de la feuille de TD (sauf question sur la diagonalisabilité).*

## 2.3 Quelques propriétés des éléments propres

- Les valeurs propres d'une matrice diagonale ou triangulaire sont les éléments diagonaux.
- 0 est valeur propre de  $A$  si et seulement si  $\det(A) = 0$
- Si  $\lambda \neq 0$  est valeur propre de  $A$ , alors  $\frac{1}{\lambda}$  est valeur propre de  $A^{-1}$ .
- La trace de  $A$  est égale à la somme des valeurs propres :  $\text{Trace}(A) = \sum_{i=1}^n a_{ii} = \sum_{i=1}^n \lambda_i$ .
- Le déterminant de  $A$  est égal au produit des valeurs propres :  $\det(A) = \prod_{i=1}^n \lambda_i$ .

**Exercice 7.** *Démontrer les trois premières propriétés.*

## 2.4 Matrices semblables

Deux matrices  $A$  et  $B$  sont semblables si elles représentent la même application linéaire  $f$  dans deux bases différentes  $\mathcal{B}$  et  $\mathcal{B}'$ .

**Propriété 4.**  *$A$  et  $B$  sont semblables ssi il existe  $S$  inversible telle que*

$$\underbrace{B}_{\mathcal{B}'} = \underbrace{S^{-1}}_{\mathcal{B}' \rightarrow \mathcal{B}} \underbrace{A}_{\mathcal{B}} \underbrace{S}_{\mathcal{B} \rightarrow \mathcal{B}'} \quad (2.1)$$

La matrice  $S$  est la matrice de passage de la base  $\mathcal{B}$  à  $\mathcal{B}'$  et la matrice  $S^{-1}$  est la matrice de passage de  $\mathcal{B}'$  à  $\mathcal{B}$ .

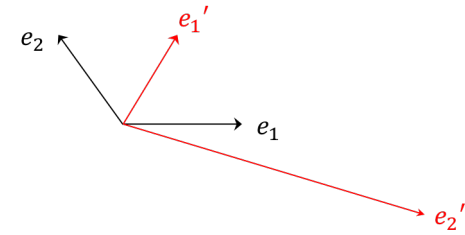
**Propriété 5.** *Les valeurs propres de deux matrices semblables sont identiques.*

**Exercice 8.** *Démontrer cette propriété.*

### Exemple

Prenons un exemple dans  $\mathbb{R}^2$ . Soit les bases  $\mathcal{B} = (e_1, e_2)$  et  $\mathcal{B}' = (e'_1, e'_2)$  telles que

$$\begin{cases} e'_1 = e_1 + e_2 \\ e'_2 = 2e_1 - e_2 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} e_1 = \frac{1}{3}e'_1 + \frac{1}{3}e'_2 \\ e_2 = \frac{2}{3}e'_1 - \frac{1}{3}e'_2 \end{cases}$$



La matrice de passage de  $\mathcal{B}$  à  $\mathcal{B}'$  s'écrit alors

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

et la matrice de passage de  $\mathcal{B}'$  à  $\mathcal{B}$  est alors l'inverse de  $S$  :

$$S^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ \frac{1}{3} & -\frac{1}{3} \end{pmatrix}.$$

Soit l'application linéaire  $f$  telle que

$$\begin{aligned} f(e_1) &= e_1 + 2e_2 \\ f(e_2) &= 3e_1 + 4e_2 \end{aligned}$$

La représentation matricielle de  $f$  dans  $\mathcal{B}$  est

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}.$$

D'après la propriété 4, nous avons alors immédiatement la représentation matricielle de  $f$  dans  $\mathcal{B}'$  :

$$B = S^{-1}AS = \begin{pmatrix} \frac{16}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} \end{pmatrix}$$

Vérifions que cela est vrai sur cet exemple :

$$\begin{aligned}
 f(e'_1) &= f(e_1 + e_2) = f(e_1) + f(e_2) \\
 &= 4e_1 + 6e_2 \\
 &= 4 \left( \frac{1}{3}e'_1 + \frac{1}{3}e'_2 \right) + 6 \left( \frac{2}{3}e'_1 - \frac{1}{3}e'_2 \right) \\
 &= \frac{16}{3}e_1 - \frac{2}{3}e_2 \\
 f(e'_2) &= f(2e_1 - e_2) = 2f(e_1) - f(e_2) \\
 &= -e_1 = -\frac{1}{3}e'_1 - \frac{1}{3}e'_2
 \end{aligned}$$

$B$  est donc bien la matrice représentative de  $f$  dans la base  $\mathcal{B}'$ .

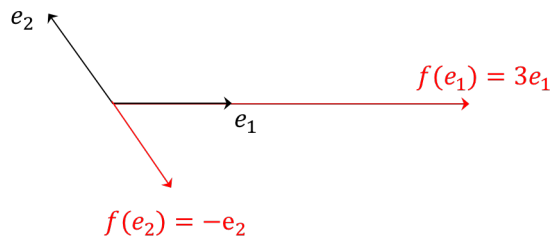
Prenons maintenant l'exemple d'une matrice diagonale de valeurs propres 2 et -1 :

$$D = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

$D$  est la représentation matricielle de  $f$  dans  $\mathcal{B} = (e_1, e_2)$  :

$$\begin{aligned}
 f(e_1) &= 3e_1 \\
 f(e_2) &= -e_2
 \end{aligned}$$

Son interprétation géométrique est très simple :



La matrice représentative  $C$  de  $f$  dans  $\mathcal{B}'$  est alors

$$C = S^{-1}DS = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{8}{3} \\ \frac{4}{3} & \frac{5}{3} \end{pmatrix}$$

et son interprétation géométrique est moins immédiate, de même que le calcul de ses valeurs propres.

## 2.5 Diagonalisation

On dit que  $A$  est diagonalisable si elle est semblable à une matrice diagonale  $D$  et qu'on peut donc l'écrire sous la forme

$$A = PDP^{-1}$$

Diagonaliser une matrice  $A$ , c'est trouver les matrices  $P$ ,  $D$  et  $P^{-1}$ .

On dit que  $A$  est trigonalisable si elle est semblable à une matrice triangulaire  $T$

$$A = PTP^{-1}$$

Trigonaliser  $A$ , c'est trouver  $P$ ,  $T$  et  $P^{-1}$ . Trouver les valeurs propres d'une matrice diagonale ou triangulaire est trivial.

### Polynôme scindé

Soit un polynôme

$$P(x) = a_0 + a_1x + \cdots + a_nx^n.$$

On dit que  $P(x)$  est scindé si il peut s'écrire sous la forme de polynômes du premier degré, c'est-à-dire si il existe  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$  tels que

$$P(x) = (x - \lambda_1)(x - \lambda_2) \cdots (x - \lambda_n).$$

Un polynôme est toujours scindé dans  $\mathbb{C}$  mais pas nécessairement dans  $\mathbb{R}$ . Par exemple, le polynôme

$$P(x) = (x^2 + 1)(x - 2)^3 = (x - i)(x + i)(x - 2)^3$$

est scindé dans  $\mathbb{C}$  mais pas dans  $\mathbb{R}$ .

### 2.5.1 Diagonalisabilité

**Théorème 2** (Conditions nécessaires et suffisantes de diagonalisabilité).  *$A$  est diagonalisable dans  $\mathbb{R}$*

- ssi la somme des espaces propres est égale à  $\mathbb{R}^n$
- ssi il existe une base constituée de vecteurs propres de  $\mathbb{R}^n$
- ssi

1.  $\chi_A$  est scindé sur  $\mathbb{R}$

2. et, pour chaque valeur propre de  $A$ , la multiplicité algébrique est égale à la multiplicité géométrique

**Corollaire 1** (Condition suffisante de diagonalisabilité). *Si  $A$  admet  $n$  valeurs propres distinctes, alors  $A$  est diagonalisable.*

## 2.5.2 Comment diagonaliser une matrice diagonalisable ?

1. Trouver les valeurs propres  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$
2. Trouver les vecteurs propres  $v_1, \dots, v_n$  associés
3.  $D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$
4.  $P = (v_1, \dots, v_n)$
5. Inverser  $P$

Par exemple, soit  $A$  une matrice d'ordre 6 diagonalisable telle que

$$\begin{aligned} Sp(A) &= \{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\} \\ SEP(A, \lambda_1) &= Vect\{v_1, v_2\} \\ SEP(A, \lambda_2) &= Vect\{v_3\} \\ SEP(A, \lambda_3) &= Vect\{v_4, v_5, v_6\} \end{aligned}$$

Alors

$$\begin{aligned} D &= \text{diag}(\lambda_1, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_3, \lambda_3) \\ P &= (v_1, \dots, v_6) \end{aligned}$$

**Exercice 9.** Diagonaliser les matrices diagonalisables de l'exercice 1.

## 2.5.3 Applications de la diagonalisation

### Puissance d'une matrice

Nous cherchons à calculer la puissance  $k$ -ième d'une matrice  $A$ . En général, la complexité pour calculer  $A^k$  est en  $O(kn^3)$ . Si la matrice est diagonalisable, nous avons

$$A^k = (PDP^{-1})^k = PD^kP^{-1} = P \begin{pmatrix} \lambda_1^k & & (0) \\ & \ddots & \\ (0) & & \lambda_n^k \end{pmatrix} P^{-1}$$

et la complexité est en  $O(n^3)$ .

### Suites récurrentes linéaires

Soit une suite linéaire récurrente linéaire d'ordre 2 :

$$u_{n+2} = au_{n+1} + bu_n.$$

En notant  $U_n = \begin{pmatrix} u_{n+1} \\ u_n \end{pmatrix}$  et  $A = \begin{pmatrix} a & b \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ , nous avons alors

$$\begin{aligned} U_{n+1} &= AU_n \\ U_n &= A^n U_0. \end{aligned}$$

Le même principe peut être appliqué à des suites linéaires d'ordre  $p$  :

$$u_{n+p} = a_0 u_n + a_1 u_{n+1} + \dots + a_{p-1} u_{n+p-1}$$

Deux exemples de suites classiques :

- Fibonacci :  $u_{n+2} = u_{n+1} + u_n$  (cf exercice)
- Tribonacci :  $u_{n+3} = u_{n+2} + u_{n+1} + u_n$

### Autres applications

- Systèmes d'équations différentielles linéaires
- Analyse de données
- Résistance des matériaux
- ...

## 2.5.4 Matrices symétriques réelles

**Théorème 3** (Théorème fondamental). Une matrice  $A$  symétrique réelle est diagonalisable à l'aide d'une matrice de passage orthogonale  $\Omega$ .

$$A = \Omega D \Omega^T$$

De plus, toutes les valeurs propres de  $A$  sont réelles et les sous-espaces propres sont orthogonaux.

**Exercice 10.** Vérifier, pour l'exercice 1, que ce théorème est cohérent avec les résultats obtenus pour les matrices symétriques réelles :

- Les matrices sont bien diagonalisables ?
- Les sous-espaces propres sont-ils bien orthogonaux ?
- Pour la 3ème matrice, construire une matrice de passage orthogonale.

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 11 & -5 & 5 \\ -5 & 3 & -3 \\ 5 & -3 & 3 \end{pmatrix}$$

## Matrices orthogonales

Soit  $A$  une matrice carrée.  $A$  est orthogonale

- ssi  $A^T A = I$  ssi  $A A^T = I$
- ssi ses vecteurs colonnes (ou lignes) sont orthonormés ( $c_i^T c_j = 0$ ,  $c_i^T c_i = 1$ )
- ssi  $A$  conserve la norme euclidienne, c'est-à-dire si  $\forall x \in \mathbb{R}^n$ ,  $\|Ax\| = \|x\|$

$$\|Ax\| = (Ax)^T Ax = x^T A^T A x = x^T x = \|x\|$$

Quelques exemples de matrices orthogonales :

- rotations
- symétrie centrale

- symétrie axiale
- permutations

Propriétés des matrices orthogonales :

- Une matrice orthogonale est inversible et facile à inverser :  $A^{-1} = A^T$
- Si  $A$  et  $B$  orthogonales, alors  $AB$  orthogonale.
- $\det(A) \in \{-1, +1\}$
- Les valeurs propres d'une matrice orthogonale sont de module 1

Un exemple de matrice orthogonale non diagonalisable dans  $\mathbb{R}$  (rotation de  $\pi/2$  ) mais diagonalisable dans  $\mathbb{C}$ .

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

$\det(R - \lambda I) = \lambda^2 + 1$ . D'où  $Sp(R) = \{i, -i\}$ , puis

$$SEP(R, i) = Vect \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \right\}$$

$$SEP(R, -i) = Vect \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \right\}$$

Au final, la diagonalisation est la suivante :

$$R = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -i & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2i} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2i} \end{pmatrix}$$

## Projection orthogonale

On dit que  $P$  est une matrice de projection si  $P^2 = P$ . On dit par ailleurs que  $P$  est une matrice de projection orthogonale si  $P^2 = P = P^T$ .

Soit  $P$  la matrice de projection orthogonale sur le s.e.v. (sous-espace vectoriel)  $L$  de  $\mathbb{R}^n$ .

Etant symétrique,  $P$  est diagonalisable. De plus :

- 1 est valeur propre d'espace propre  $= L$
- 0 est valeur propre d'espace propre  $= L^\perp$

Notons qu'une matrice de projection (non orthogonale) est diagonalisable et a aussi pour valeurs propres 0 et 1.

# Chapitre 3

## Méthode de la puissance itérée

Pour simplifier l'exposé de la méthode de la puissance itérée, nous supposons dans toute ce chapitre que :

- La matrice  $A$  est diagonalisable et peut donc se mettre sous la forme

$$A = PDP^{-1}$$

avec  $D$  une matrice diagonale d'ordre  $n$  et  $P$  une matrice inversible d'ordre  $n$ .

- Les valeurs propres de  $A$ , notées  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ , sont réelles et distinctes en module

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots > |\lambda_n|$$

### 3.1 Principe

La méthode de la puissance itérée consiste à calculer la suite

$$x_{k+1} = \frac{Ax_k}{\|Ax_k\|} \quad (3.1)$$

qui va converger vers un vecteur propre associé à  $\lambda_1$ , la valeur propre de plus grand module, sous une condition que nous allons détailler plus loin.

Afin de démontrer ce résultat, nous allons d'abord établir un lemme qui exprime  $x_k$  en fonction de  $x_0$ .

**Lemme 1.** Pour  $k \geq 1$ ,

$$x_k = \frac{A^k x_0}{\|A^k x_0\|}$$

.

*Démonstration.* Montrons par récurrence cette propriété. Elle est vraie par construction

pour  $k = 1$ . Supposons la vraie pour  $k > 1$ . Nous avons alors

$$x_{k+1} = \frac{Ax_k}{\|Ax_k\|} = \frac{A \frac{A^k x_0}{\|A^k x_0\|}}{\left\| \frac{A \frac{A^k x_0}{\|A^k x_0\|}}{\|A^k x_0\|} \right\|} = \frac{A^{k+1} x_0}{\|A^{k+1} x_0\|}$$

et la propriété est vraie pour  $k + 1$  et donc pour tout entier  $k \geq 1$ .  $\square$

Soit  $x_0$  un vecteur quelconque de  $\mathbb{R}^n$ .  $A$  étant diagonalisable,  $x_0$  peut être décomposé dans une base de vecteurs propres sous la forme

$$x_0 = \sum_{i=1}^n z_i$$

où  $z_i$  appartient à l'espace propre associé à la valeur propre  $\lambda_i$ , noté  $\text{SEP}(A, \lambda_i)$ .

Nous avons alors

$$Ax_0 = \sum_{i=1}^n \lambda_i z_i$$

puis, par récurrence,

$$A^k x_0 = \sum_{i=1}^n \lambda_i^k z_i$$

Il vient alors

$$\begin{aligned} A^k x_0 &= \sum_{i=1}^n \lambda_i^k z_i = \lambda_1^k \underbrace{\left( z_1 + \sum_{i=2}^n \left( \frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^k z_i \right)}_{w_k} \\ &= \lambda_1^k w_k \end{aligned}$$

Comme  $|\lambda_i/\lambda_1| < 1$ , nous avons  $\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^k$  qui tend vers 0 quand  $k$  tend vers l'infini. Il suit que

$$w_k = z_1 + \sum_{i=2}^n \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^k z_i \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} z_1.$$

Par ailleurs, nous avons d'après le lemme 1

$$\begin{aligned} x_k &= \frac{A^k x_0}{\|A^k x_0\|} = \frac{\lambda_1^k w_k}{\|\lambda_1^k w_k\|} \\ &= \frac{\lambda_1^k}{|\lambda_1^k|} \frac{w_k}{\|w_k\|} = \text{signe}(\lambda_1^k) \frac{w_k}{\|w_k\|}. \end{aligned}$$

Ainsi  $x_{2k} \xrightarrow[k \rightarrow +\infty]{} \frac{z_1}{\|z_1\|} (\equiv v_1)$  et  $x_{2k+1} \xrightarrow[k \rightarrow +\infty]{} \text{signe}(\lambda_1) v_1$

Le signe de  $\lambda_1^k$  est positif si  $k$  est paire et du même signe que  $\lambda$  si  $k$  est impair. D'où

$$x_{2k} \xrightarrow[k \rightarrow +\infty]{} \frac{z_1}{\|z_1\|}$$

$$x_{2k+1} \xrightarrow[k \rightarrow +\infty]{} \text{signe}(\lambda_1) \frac{z_1}{\|z_1\|}$$

Nous avons montré que les suites  $x_{2k}$  et  $x_{2k+1}$  convergeaient vers un vecteur propre normé associé à la valeur propre  $\lambda_1$ . Nous pouvons maintenant énoncer le principal théorème de ce chapitre.

**Théorème 4.** *Soit  $A$  une matrice diagonalisable de valeurs propres  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$  distinctes en module et rangées par modules décroissants :  $|\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots > |\lambda_n|$ .*

*Soit la suite de vecteurs  $(x_k)$  définie par*

$$x_{k+1} = \frac{Ax_k}{\|Ax_k\|} \quad (3.2)$$

*Si  $x_0$  est de composante non nulle dans la direction des vecteurs propres associées à  $\lambda_1$ , alors les suites extraites  $x_{2k}$  et  $x_{2k+1}$  convergent vers un vecteur propre de norme 1, associé à la valeur propre  $\lambda_1$ .*

## 3.2 Quotient de Rayleigh

Nous avons donc une méthode itérative pour obtenir une approximation d'un vecteur propre associé à  $\lambda_1$ . Afin de calculer une approximation de  $\lambda_1$ , nous allons utiliser le quotient de Rayleigh.

**Définition 2** (Quotient de Rayleigh). *Soit  $A$  une matrice d'ordre  $n$  et  $x \in \mathbb{R}^n$ . On définit le quotient de Rayleigh de la matrice  $A$  relativement au vecteur  $x \neq 0$  par*

$$\rho_A(x) = \frac{x^\top Ax}{x^\top x}$$

**Proposition 1.** *Si  $x$  est un vecteur propre associé à la valeur propre  $\lambda$ , alors  $\rho_A(x) = \lambda$ .*

*Démonstration.*

$$\rho_A(x) = \frac{x^\top Ax}{x^\top x} = \frac{x^\top \lambda x}{x^\top x} = \lambda \frac{x^\top x}{x^\top x} = \lambda$$

□

Une fois un vecteur propre obtenu par la méthode de la puissance itérée, on en déduit immédiatement la valeur propre associée en calculant le quotient de Rayleigh.

## 3.3 Algorithmes

L'algorithme 1 reproduit bêtement la suite définie dans l'équation (3.1), en fournissant en sortie une approximation de  $\lambda_1$  et d'un vecteur propre normé associé. Plus le paramètre  $\epsilon$  est petit, meilleure est l'approximation.

**Données :**  $A, x_0, \epsilon$

**Résultat :**  $\lambda$  et  $x$

initialisation :  $x \leftarrow x_0, \lambda_{anc} \leftarrow 1, \lambda \leftarrow 0$ ;

**tant que**  $|\lambda - \lambda_{anc}| > \epsilon$  **faire**

$\lambda_{anc} \leftarrow \lambda$ ;

$x \leftarrow \frac{Ax}{\|Ax\|}$ ;

$\lambda \leftarrow \frac{x^\top Ax}{x^\top x}$ ;

**fin**

**Algorithme 1 :** Version naïve de la méthode de ma puissance itérée

Dans ce premier algorithme, on constate qu'on calcule plusieurs fois  $Ax$ . Afin d'éviter cela, introduisons la suite  $(y_k)$  :

$$y_{k+1} = Ax_k$$

$$x_k = \frac{y_k}{\|y_k\|}$$

Avec cette reformulation, on peut écrire un 2ème algorithme plus efficace.

**Données :**  $A, y_0, \epsilon$   
**Résultat :**  $\lambda$  et  $x$   
initialisation :  $y \leftarrow y_0, \lambda_{anc} \leftarrow 1, \lambda \leftarrow 0$ ;  
**tant que**  $|\lambda - \lambda_{anc}| > \epsilon$  **faire**  
     $\lambda_{anc} \leftarrow \lambda$ ;  
     $x \leftarrow \frac{y}{\|y\|}$ ;  
     $y \leftarrow Ax$  ;  
     $\lambda \leftarrow \frac{x^\top y}{x^\top x}$ ;  
**fin**

**Algorithme 2 :** Version améliorée de la méthode de ma puissance itérée

### 3.4 Vitesse de convergence

La vitesse de convergence de la suite  $(x_k)$  dépend de la vitesse de convergence de la suite  $\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^k$  et donc de  $\frac{\lambda_2}{\lambda_1}$ , c'est-à-dire du quotient entre les deux plus grandes valeurs propres en module. La vitesse de convergence sera lente si les deux plus grandes valeurs propres sont proches en module.

Afin d'atteindre une précision  $\epsilon$ , il faut que

$$\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^k \leq \epsilon \Leftrightarrow k \geq \frac{\log \epsilon}{\log \left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|}.$$

Précision souhaitée $\epsilon$	Nb itérations $(\lambda_1/\lambda_2 = 0.5)$	Nb itérations $(\lambda_1/\lambda_2 = 0.99)$
$10^{-1}$	4	230
$10^{-2}$	7	459
$10^{-3}$	10	688
$10^{-4}$	14	917
$10^{-5}$	17	1146
$10^{-6}$	20	1375
$10^{-7}$	24	1604

On gagne donc (au moins) un chiffre significatif toutes les 4 itérations lorsque  $\lambda_1/\lambda_2 = 0.5$  et toutes les 230 itérations lorsque  $\lambda_1/\lambda_2 = 0.99$ .

**Définition 3** (Convergence linéaire (ou géométrique)). *On dit qu'une suite  $(u_k)$  converge linéairement vers  $u^*$  si il existe un réel  $\alpha \in [0, 1[$  et un entier  $k_1$  tel que*

$$\forall k \geq k_1, \|u_{k+1} - u^*\| \leq \alpha \|u_k - u^*\|$$

*Le réel  $\alpha$  est appelé le taux de convergence.*

Dans le cas d'une convergence linéaire, on peut montrer que l'on gagne 1 chiffre significatif toutes les  $q$  itérations où  $q$  est une constante.

La suite géométrique  $b_k = a^k$ , avec  $a = \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^k$ , converge linéairement vers 0 si  $|a| < 1$ .

En effet :

$$|b_{k+1} - u^*| = |b^{k+1}| = |a||a^k| = |a||b_k - b^*|$$

On peut aussi définir la notion de convergence quadratique pour laquelle il existe  $q$  tel que la précision soit doublée toutes les  $q$  itérations. Par exemple, la suite ci-dessous converge quadratiquement vers 0.

$$\left(\frac{1}{2^{2^k}}\right) = \{5.10^{-1}, 2.5.10^{-1}, 6.3.10^{-2}, 3.9.10^{-3}, 1.5, 2.3.10^{-10}, 5.4.10^{-20}, 2.9.10^{-39}\}$$

### Un exemple d'algorithme quadratique : la méthode de Newton

Pour trouver la racine d'une fonction continue, la méthode de dichotomie a une vitesse de convergence linéaire. Pour une fonction dérivable, on peut utiliser la méthode de Newton qui consiste à calculer la suite

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}.$$

Sous certaines hypothèses, cet algorithme converge vers un zéro de  $f$  de manière quadratique. Cherchons par exemple à résoudre  $x^2 = 2$  dont les solutions sont

$$\pm\sqrt{2} \approx \pm 1.4142135624.$$

En prenant  $x_0 = 10$ , l'algorithme obtient une précision de 10 décimales en 8 itérations pour  $\sqrt{2}$  :

$$(x_k) = \{10, 5.1, 2.7460784314, 1.7371948744, 1.4442380949, 1.4145256551, 1.4142135968, 1.4142135624\}.$$

Quelle est l'idée de la méthode de Newton ? La méthode de Newton consiste à approcher la fonction  $f$  par son développement limité à l'ordre 1 en  $x_n$  :

$$f(x) \approx f(x_n) + f'(x_n)(x - x_n)$$

Nous cherchons alors un zéro de cette approximation

$$f(x_n) + f'(x_n)(x - x_n) = 0 \Leftrightarrow x = x_{n+1} - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

La méthode de Newton consiste à approcher la fonction  $f$  par son développement limité à l'ordre 1 en  $x_n$  :

$$f(x) \approx f(x_n) + f'(x_n)(x - x_n)$$

Nous cherchons alors un zéro de cette approximation

$$f(x_n) + f'(x_n)(x - x_n) = 0 \Leftrightarrow x = x_{n+1} - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

Le zéro obtenu est alors le point  $x_{n+1}$ .

### 3.5 Calcul de la plus petite valeur propre

Soit  $A$  une matrice inversible. Les valeurs propres de  $A^{-1}$  sont les inverses des valeurs propres de  $A$  et peuvent être triées par module croissant :

$$|\lambda_1^{-1}| < \dots < |\lambda_n^{-1}|$$

Si l'on applique la méthode de la puissance itérée à  $A^{-1}$ , on obtiendra  $\lambda_n^{-1}$  qu'il suffira d'inverser pour obtenir la plus petite valeur propre de  $A$ .

### 3.6 Méthode de déflation

Dans cette partie, nous allons chercher à éliminer de  $A$  la valeur propre dominante  $\lambda_1$  obtenue par la méthode de la puissance itérée. Notons  $v_1$  un vecteur propre associé à  $\lambda_1$ , obtenu par exemple par la méthode de la puissance itérée.

Pour faire simple, nous allons nous placer dans le cas d'une matrice symétrique réelle  $A$  mais il existe une méthode pour des matrices non symétriques.

**Proposition 2.** Soit  $A$  une matrice symétrique réelle de valeurs propres  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$  distinctes en module et rangées par modules décroissants :  $|\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots > |\lambda_n|$ . Alors  $B$  définie par

$$B = A - \lambda_1 \frac{v_1 v_1^\top}{v_1^\top v_1}$$

a les mêmes vecteurs propres  $v_1, v_2, \dots, v_n$  que  $A$  et pour valeurs propres associées  $0, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ .

*Démonstration.* La matrice  $A$  est symétrique réelle et est diagonalisable d'après le théorème fondamental. Ses espaces propres sont par ailleurs orthogonaux :  $v_i^\top v_j = 0$  pour  $i \neq j$ .

Appliquons  $B$  au vecteur propre  $v_1$  :

$$\begin{aligned} Bv_1 &= \left( A - \lambda_1 \frac{v_1 v_1^\top}{v_1^\top v_1} \right) v_1 \\ &= Av_1 - \lambda_1 \frac{v_1 (v_1^\top v_1)}{v_1^\top v_1} \\ &= \lambda_1 v_1 - \lambda_1 v_1 \\ &= 0 \end{aligned}$$

Ainsi  $v_1$  est vecteur propre de  $B$  associé à la valeur propre 0.

Appliquons maintenant  $B$  à un vecteur propre  $v_i$ ,  $i \neq 1$  :

$$Bv_i = Av_i - \lambda_1 \frac{v_1 (v_1^\top v_i)}{v_1^\top v_1} = \lambda_i v_i - 0 = \lambda_i v_i$$

Donc  $v_i$  est vecteur propre de  $B$  associé à la valeur propre  $\lambda_i$ . □

Une méthode pour calculer l'ensemble des valeurs propres de  $A$  consiste à utiliser la méthode de la puissance itérée pour calculer la plus grande valeur propre en module puis d'effectuer le changement de matrice  $A \leftarrow B$  et de recommencer.

### 3.7 Généralisation du théorème à des matrices non diagonalisables

Le théorème 4 s'étend à des matrices non diagonalisables possédant une valeur propre dominante. La preuve repose sur la décomposition de Jordan et est hors programme.



Deuxième partie

# Optimisation non linéaire

# Chapitre 4

## Introduction

Dans cette deuxième partie du cours, nous allons nous intéresser à une fonction  $f$  à plusieurs variables :  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ . Notre objectif sera de trouver le minimum de  $f(x)$  où  $x = (x_1, \dots, x_n)$ .

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{s.c.} & x \in \mathbb{R}^n \end{array}$$

Nous considérerons dans un deuxième temps une version avec contraintes de ce problème, où l'espace des solutions est restreint à un sous-ensemble  $X$  de  $\mathbb{R}^n$ .

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{s.c.} & x \in X \end{array}$$

Ce cours est complémentaire à celui de programmation linéaire. En programmation linéaire, la fonction objectif et les contraintes sont linéaires :

- Fonction objectif linéaire :  $f(x) = \sum_{i=1}^n c_i x_i$  où les  $c_i$  sont des réels
- Contrainte linéaire :  $\sum_{i=1}^n a_i x_i \leq b_i$  où les  $a_i$  sont des réels

Pour notre part, nous considérerons des fonction  $f$  pouvant être non linéaires. En voici quelques exemples :

$$f(x) = \sum_{i=1}^n x_i^2, \quad f(x) = \sum_{i=1}^n |x_i|, \quad f(x) = \prod_{i=1}^n x_i$$

Les contraintes pourront elles aussi être non linéaires.

# Chapitre 5

## Optimisation à une variable

Nous allons considérer dans ce chapitre le cas le plus simple d’une fonction à une variable :  $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  .

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{s.c.} & x \in \mathbb{R} \end{array}$$

Nous supposons, la plupart du temps, que la fonction  $f$  est deux fois dérivables et nous noterons ses dérivées  $f'$  et  $f''$ .

**Définition 4** (Minimum global). *On dit que  $f$  atteint en  $x^*$  un minimum global si  $f(x^*) \leq f(x)$  pour tout  $x \in \mathbb{R}$ .*

On peut aussi définir la notion de minimum de manière locale, au voisinage d’un point  $x$ , c’est-à-dire ”à proximité” de ce point. La notion de voisinage en mathématiques est relativement abstraite. Retenons simplement la propriété suivante.

**Propriété 6** (Voisinage d’un réel). *Soit  $x$  un réel tel que  $a < x < b$ . Les intervalles  $[a, b]$ ,  $]a, b[$ ,  $[a, b[$  et  $]a, b]$  sont des voisinages de  $x$ .*

**Définition 5** (Minimum local). *On dit que  $f$  atteint un minimum local en  $x^*$  si il existe un voisinage  $V$  de  $x^*$  tel que  $f(x^*) \leq f(x)$  pour tout  $x \in V$ .*

Les notions de minimum local et de minimum global sont illustrées en figure 5.1.

Une manière de trouver les minimums d’une fonction à une variable est d’établir son tableau de variation, comme vous le faisiez au lycée. Considérons par exemple la fonction  $f(x) = x^2 - 2x + 3 = (x - 1)^2 + 2$ . Sa dérivée  $f'(x) = 2x - 2$  est croissante et s’annule en  $x = 1$ .

$x$	$-\infty$	1	$+\infty$
$f'(x)$	-	0	+
$f(x)$	$+\infty$	2	$+\infty$

Le minimum global de cette fonction est donc atteint en  $x^* = 1$  et vaut  $f(x^*) = 2$ .

Cet exemple est simple à résoudre pour deux raisons : 1) la fonction  $f$  est convexe et a un unique minimum local, 2) l’équation  $f'(x) = 0$  se résoud à la main. En pratique, ces deux conditions ne sont souvent pas réunies. Il peut y avoir plusieurs minimums locaux et l’équation  $f'(x) = 0$  peut ne pas avoir de solution triviale. Nous devrons alors recourir à des méthodes numériques pour déterminer le minimum d’une fonction.

### 5.1 Conditions d’optimalité

Nous allons établir des conditions nécessaires, puis suffisantes, d’optimalité, pour une fonction  $f$  deux fois dérivables. Avant cela, nous allons faire quelques rappels sur le développement de Taylor.

#### Développement de Taylor

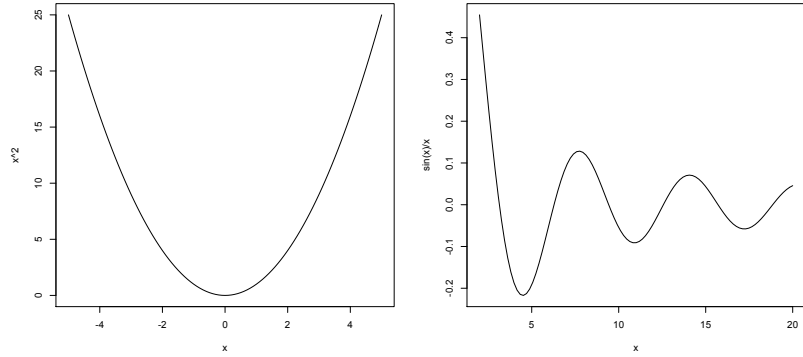
Le théorème de Taylor nous dit qu’une fonction  $f$  dérivable  $n$  fois peut être approchée par un polynôme d’ordre  $n$  au voisinage d’un point  $x^*$ . Les coefficients de ce polynôme dépendent uniquement des dérivées de la fonction  $f$  en  $x^*$ .

#### Développement de Taylor à l’ordre 1

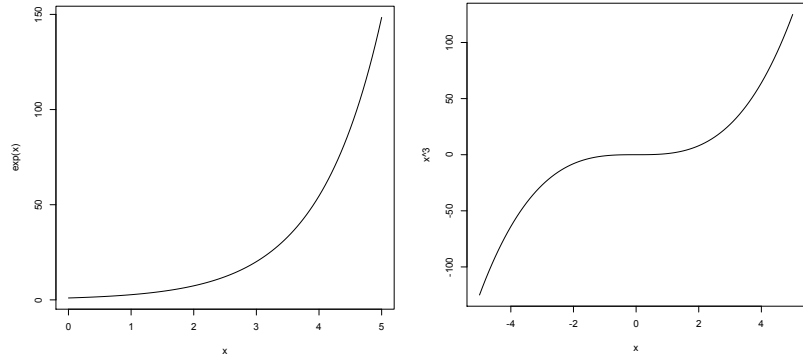
Considérons une fonction  $f$  dérivable en  $x^*$ . Le développement de Taylor a l’ordre 1 s’écrit

$$f(x) = \underbrace{f(x^*) + f'(x^*)(x - x^*)}_{\text{Approximation affine de } f(x) \text{ au voisinage de } x^*} + \underbrace{o(x - x^*)}_{\text{Négligeable au voisinage de } x^*}$$

où le reste  $o(x - x^*)$  est une fonction négligeable devant  $(x - x^*)$  au voisinage de  $x^*$ , c’est-à-dire que  $\frac{o(x - x^*)}{x - x^*}$  tend vers zéro quand  $x$  tend vers  $x^*$ .



- (a)  $f(x) = x^2$  pour  $x \in \mathbb{R}^2$ . Un minimum local et global atteint en  $x = 0$ .
- (b)  $f(x) = \sin(x)/x$  pour  $x \in [2, 20]$ . Un unique minimum global et trois minimums locaux.



- (c)  $f(x) = e^x$  pour  $x \geq 0$ . Un minimum local et global est atteint en  $x = 0$ .
- (d)  $f(x) = x^3$  pour  $x \in \mathbb{R}$ . Pas de minimum local car  $\lim_{x \rightarrow -\infty} f(x) = -\infty$ .

FIGURE 5.1 – Mimimum local et minimum global

En posant  $h = x - x^*$ , on peut ré-écrire le développement de Taylor à l'ordre 1 comme

$$f(x^* + h) = f(x^*) + f'(x^*)h + o(h).$$

où  $o(h)$  est une fonction négligeable devant  $h$  quand  $h$  tend vers 0.

## Développement de Taylor à l'ordre 2

Considérons une fonction  $f$  deux fois dérivable en  $x^*$ . Le développement de Taylor à l'ordre 2 de  $f$  s'écrit

$$f(x) = \underbrace{f(x^*) + f'(x^*)(x - x^*) + \frac{f''(x^*)}{2}(x - x^*)^2}_{\text{Approximation de } f(x) \text{ par un polynôme du second degré au voisinage de } x^*} + \underbrace{o((x - x^*)^2)}_{\text{Négligeable au voisinage de } x^*}$$

Le reste  $o((x - x^*)^2)$  est une fonction négligeable devant  $(x - x^*)^2$  au voisinage de  $x^*$ , c'est-à-dire que  $\frac{o((x - x^*)^2)}{(x - x^*)^2}$  tend vers zéro quand  $x$  tend vers  $x^*$ .

A nouveau, un simple changement de variable donne

$$f(x^* + h) = f(x^*) + f'(x^*)h + \frac{f''(x^*)}{2}h^2 + o(h^2).$$

où  $o(h^2)$  est une fonction négligeable devant  $h^2$  quand  $h$  tend vers 0.

## Développement de Taylor à l'ordre $n$

Considérons une fonction  $f$  dérivable  $n$  fois en  $x^*$ . Le développement de Taylor a l'ordre  $n$  s'écrit

$$f(x) = \underbrace{\sum_{k=0}^n \frac{f^{(k)}(x^*)}{k!}(x - x^*)^k}_{\text{Approximation par un polynôme de degré } n \text{ au voisinage de } x^*} + \underbrace{o((x - x^*)^n)}_{\text{Négligeable au voisinage de } x^*}$$

où  $f^{(k)}$  désigne la dérivée  $k$ -ième de  $f$ .

On peut aussi l'écrire

$$f(x^* + h) = \sum_{k=0}^n \frac{f^{(k)}(x^*)}{k!}h^k + o(h^n)$$

$o(h^n)$  est une fonction négligeable devant  $h^n$  quand  $h$  tend vers 0.

Dans le cadre des démonstrations qui suivent, nous n'aurons besoin que des développements de Taylor à l'ordre 1 et 2.

## Points stationnaires

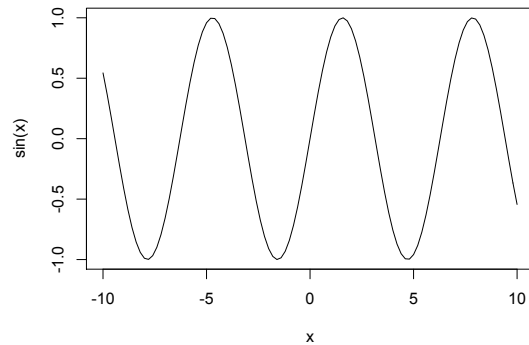
**Définition 6.** On dit que  $x^*$  est un point stationnaire si  $f'(x^*) = 0$ .

**Exercice 11.** Déterminer les points stationnaires de  $f(x) = \sin(x)$ .

Correction :

$$f'(x) = 0 \Leftrightarrow \cos(x) = 0 \Leftrightarrow x = \frac{\pi}{2} + k\pi \text{ avec } k \in \mathbb{Z}$$

Les points stationnaires de  $f$  valent donc  $x_k = \frac{\pi}{2} + k\pi$  avec  $k \in \mathbb{Z}$ .



## Conditions nécessaires

**Théorème 5** (Condition nécessaire du 1er ordre). Soit  $f$  une fonction dérivable. Si  $x^*$  est un minimum local de  $f$ , alors  $x^*$  est un point stationnaire (et donc  $f'(x^*) = 0$ ).

*Démonstration.* Supposons que  $x^*$  est un minimum local. D'après le développement de Taylor à l'ordre 1, nous avons

$$f(x^* + h) - f(x^*) = f'(x^*)h + o(h)$$

Le reste  $o(h)$  devient négligeable devant  $h$  quand  $h$  tend vers 0. Il existe donc un voisinage  $V$  de 0 tel que  $f'(x^*)h \geq 0$  pour tout  $h \in V$ . Ceci implique que  $f'(x^*) = 0$ . En effet, si  $(f'(x^*) > 0 \text{ et } h < 0)$  ou si  $(f'(x^*) < 0 \text{ et } h > 0)$ , alors  $f'(x^*)h < 0$ , ce qui contredirait l'hypothèse d'un minimum local.

□

**Théorème 6** (Condition nécessaire du 2nd ordre). Soit  $f$  une fonction deux fois dérivables. Si  $x^*$  est un minimum local de  $f$ , alors  $f''(x^*) \geq 0$ .

*Démonstration.* Supposons que  $x^*$  est un minimum local. D'après le théorème 5, nous avons  $f'(x^*) = 0$ , puis en utilisant le développement de Taylor à l'ordre 2 :

$$\begin{aligned} f(x^* + h) - f(x^*) &= \underbrace{f'(x^*)}_{=0} h + \frac{f''(x^*)}{2} h^2 + o(h^2) \\ &= \underbrace{\frac{f''(x^*)}{2} h^2}_{\geq 0} + o(h^2) \end{aligned}$$

Comme  $x^*$  est un minimum local, il existe un voisinage  $V$  de 0 tel que  $\frac{f''(x^*)}{2} h^2 \geq 0$  pour tout  $h \in V$ . Ceci implique que  $f''(x^*) \geq 0$ . □

Les deux conditions

1.  $f'(x^*) = 0$  (condition nécessaire 1er ordre)
2.  $f''(x^*) \geq 0$  (condition nécessaire du 2nd ordre)

sont nécessaires mais pas suffisantes pour que  $x$  soit un minimum local. Par exemple, la fonction  $f(x) = x^3$  satisfait ces deux conditions en  $x^* = 0$  qui n'est pas un minimum local.

## Conditions suffisantes

**Théorème 7** (Conditions suffisantes). Soit  $f$  une fonction deux fois dérivable. Si les deux conditions suivantes sont réunies, alors  $x^*$  est un minimum local.

1.  $f'(x^*) = 0$  (condition du 1er ordre), c'est-à-dire  $x^*$  est un point stationnaire
2.  $f''(x^*) > 0$  (condition du 2nd ordre) :

*Démonstration.* Soit  $x^*$  vérifiant les deux conditions du théorème. Nous avons alors, d'après le développement de Taylor à l'ordre 2 :

$$\begin{aligned} f(x^* + h) - f(x^*) &= \underbrace{f'(x^*)}_{=0} h + \frac{f''(x^*)}{2} h^2 + o(h^2) \\ &= \underbrace{\frac{f''(x^*)}{2} h^2}_{>0} + o(h^2) \end{aligned}$$

Comme  $o(h^2)$  est négligeable devant  $\frac{f''(x^*)}{2} h^2$  quand  $f$  tend vers 0, il existe un voisinage  $V$  de 0 tel que  $f(x^* + h) - f(x^*) \geq 0$  pour tout  $h \in V$ . Donc  $x^*$  est un minimum local. □

La condition  $f''(x^*) > 0$  n'est pas une condition nécessaire. En effet, la fonction  $f(x) = x^4$  atteint son minimum en  $x^* = 0$  et  $f''(0) = 0$ .

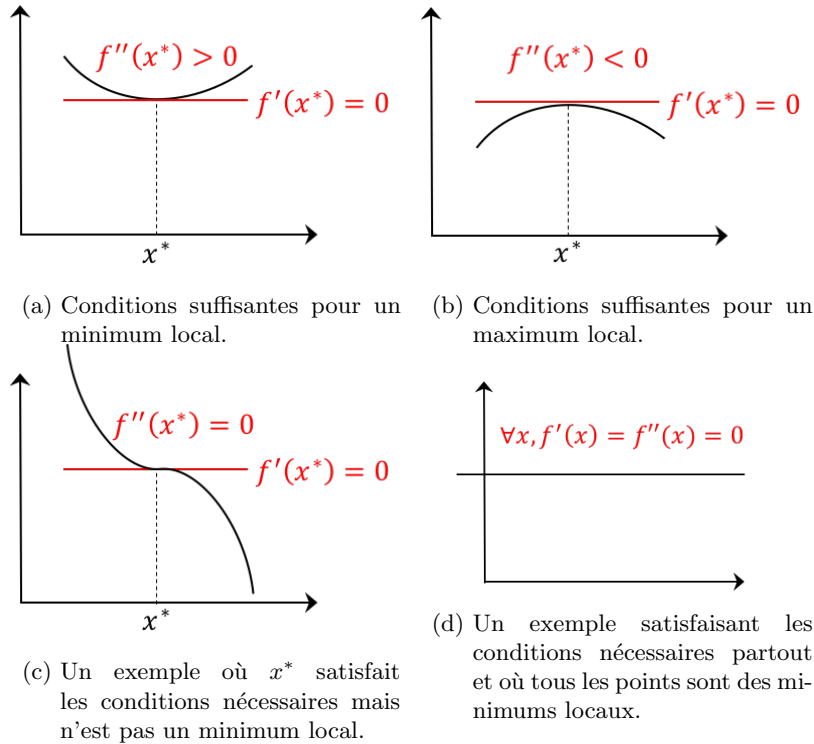


FIGURE 5.2 – Conditions suffisantes d'optimalité et conditions nécessaires

**Exercice 12.** Déterminer les minimums locaux de  $\sin(x)$ .

Correction : Les candidats potentiels à être des minimums locaux sont les points stationnaires  $x_k = \frac{\pi}{2} + k\pi$  avec  $k \in \mathbb{Z}$ . Nous avons par ailleurs  $f''(x) = -\sin(x)$  et

$$f''(x_k) = -\sin\left(\frac{\pi}{2} + k\pi\right) = \begin{cases} -1 & \text{si } k \text{ est pair} \\ +1 & \text{si } k \text{ est impair} \end{cases}$$

Les minimums locaux sont donc atteints en  $x_k$  avec  $k$  impair. La valeur de fonction objectif en ces points est  $f(-\pi/2) = \sin(-\pi/2) = -1$ .

## 5.2 Fonction convexe

**Définition 7.** On dit qu'une fonction  $f : I \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  est

— convexe sur  $I$  si

$$\forall (a, b) \in I^2, \quad \forall \lambda \in ]0, 1[, \quad f(\lambda a + (1 - \lambda)b) \leq \lambda f(a) + (1 - \lambda)f(b)$$

— strictement convexe sur  $I$  si

$$\forall (a, b) \in I^2, \quad a \neq b, \quad \forall \lambda \in ]0, 1[, \quad f(\lambda a + (1 - \lambda)b) < \lambda f(a) + (1 - \lambda)f(b)$$

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

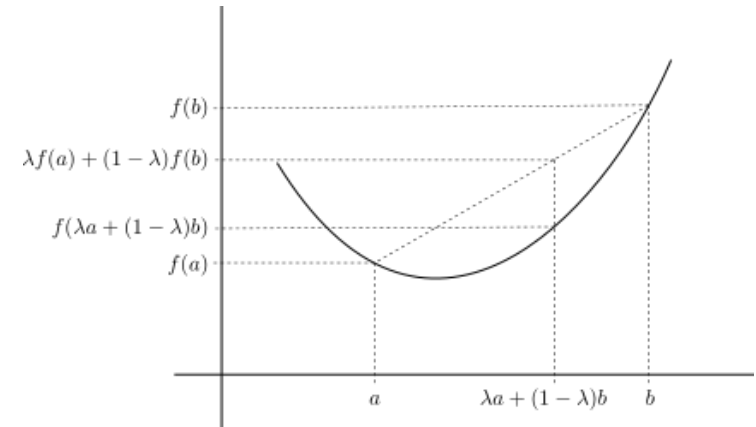


FIGURE 5.3 – Interprétation graphique de la définition d'une fonction convexe  
[https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Fonction\\_convexe.png](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Fonction_convexe.png)

**Propriété 7** (Interprétation graphique). Une fonction  $f$  est convexe si et seulement si pour tous points  $A$  et  $B$  de sa courbe représentative, l'arc  $\widehat{AB}$  est en-dessous de la corde  $[AB]$ .

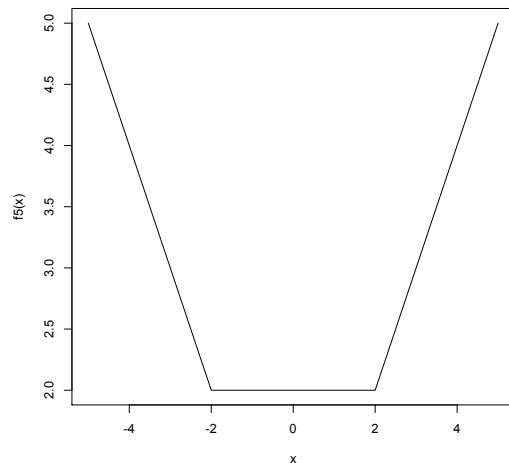


FIGURE 5.4 – Un exemple de fonction convexe mais non strictement convexe. Cette fonction n'est par ailleurs pas dérivable en -2 et 2.

**Propriété 8** (Continuité). *Une fonction convexe sur un intervalle ouvert  $I$  est continue sur  $I$ .*

Une fonction convexe sur un intervalle fermé peut être discontinue aux extrémités. Par exemple, la fonction  $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^+$  telle que  $f(x) = 0$  pour  $x > 0$  et  $f(0) = 1$ .

**Propriété 9.** *Quelques propriétés supplémentaires :*

- Si  $f$  convexe et  $a \geq 0$ , alors  $af$  est convexe
- La somme de fonctions convexes est convexe
- La somme d'une fonction convexe et d'une fonction strictement convexe est strictement convexe
- La fonction composée de deux fonctions convexes est convexe : si  $f$  et  $g$  sont convexes, alors  $f \circ g$  est convexe.
- Une fonction à la fois convexe et concave est une fonction affine (de la forme  $ax + b$ )

Voici quelques exemples de fonctions convexes et concaves :

- Strictement convexes :  $x^2$ ,  $e^x$ ,  $1/x$  pour  $x > 0$
- Convexes mais non strictement convexes :  $|x|$ , fonction affine  $ax + b$ , fonction illustrée en figure 5.4
- Strictement concaves :  $1/x$  pour  $x < 0$ ,  $\sqrt{x}$  pour  $x \geq 0$ ,  $\ln(x)$  pour  $x > 0$
- Ni convexes, ni concaves :  $\sin(x)$ ,  $\cos(x)$ ,  $x^3$

## Fonction convexe dérivable

**Propriété 10.** *Soit  $f$  une fonction dérivable sur  $I$ .*

- $f$  est convexe sur  $I$  si et seulement si sa dérivée est croissante sur  $I$ .
- $f$  est strictement convexe sur  $I$  si et seulement si sa dérivée est strictement croissante sur  $I$ .

On peut utiliser ces propriétés pour vérifier que les exemples de fonctions dérivables données ci-dessus sont bien convexes, concaves ou ni l'un ni l'autre. Par exemple,  $x^4$  est strictement convexe car sa dérivée  $3x^3$  est strictement croissante. De même,  $ax + b$  est convexe car sa dérivée  $a$  est constante (donc croissante).

## Fonction convexe dérivable deux fois

**Propriété 11.** *Soit  $f$  une fonction deux fois dérivable sur un intervalle  $I \subset \mathbb{R}$  :*

- $f$  est convexe sur  $I$  si et seulement si sa dérivée seconde est positive sur  $I$ .
- Si la dérivée seconde est strictement positive sur  $I$ , alors  $f$  est strictement convexe sur  $I$ .

La réciproque n'est pas vraie pour une fonction strictement convexe. Par exemple, la fonction  $x^4$  est strictement convexe et sa dérivée seconde  $f''(x) = 12x^2$  vaut 0 en  $x = 0$ . On peut montrer que si la dérivée seconde est strictement positive, sauf en un nombre fini de points, alors la fonction  $f$  est strictement convexe.

## Minimum d'une fonction convexe

Les fonctions convexes sont des fonctions "faciles" à optimiser en raison des propriétés suivantes.

**Théorème 8.** (admis) *Si  $f$  est convexe, alors un minimum local est aussi un minimum global.*

Notons qu'une fonction convexe n'a pas de minimum global si elle n'a pas de borne inférieure (exemple :  $-\log(x)$  sur  $\mathbb{R}_+^*$ ).

**Théorème 9.** *Si  $f$  est convexe et dérivable, alors  $f$  atteint un minimum global en  $x^*$  si et seulement si  $f'(x^*) = 0$ .*

*Démonstration.* Supposons que  $f$  atteint un minimum global en  $x^*$ , alors  $x^*$  est aussi un minimum local et  $f'(x^*) = 0$ .

Réciproquement, supposons que  $f'(x^*) = 0$ . La fonction  $f$  étant convexe, nous avons  $f'$  croissante d'après la propriété 10. Il suit que  $f'(x) \leq 0$  pour  $x \leq x^*$  et  $f'(x) \geq 0$  pour  $x \geq x^*$ . Ainsi,  $f$  est décroissante pour  $x \leq x^*$  et croissante pour  $x \geq x^*$ . On conclut que  $x^*$  est un minimum global.  $\square$

Minimiser une fonction convexe dérivable revient donc à trouver un zéro de la fonction  $f'$ , ce qui peut être fait par exemple par une méthode de dichotomie.

## 5.3 Méthode de dichotomie

Trouver les zéros d'une fonction est un problème classique qui n'est pas pour autant toujours simple. La méthode de dichotomie permet d'obtenir une approximation d'un zéro (mais pas tous les zéros) d'une fonction continue.

Rappelons le principe rapidement de la méthode de dichotomie. Soit  $g$  une fonction continue sur l'intervalle  $[a, b]$  pour laquelle on cherche à résoudre  $g(x) = 0$ . Si  $g(a)$  et  $g(b)$  sont de signes opposés, alors l'algorithme 3 va fournir un zéro de  $g(x)$ , c'est-à-dire une solution de  $g(x) = 0$ .

**Données :**  $a, b, \epsilon$

**Résultat :**  $a, b$

**tant que**  $b - a > \epsilon$  **faire**

$m \leftarrow \frac{a + b}{2};$

**si**  $g(a) \times g(m) \leq 0$  **alors**

$b \leftarrow m;$

**sinon**

$a \leftarrow m;$

**fin**

**fin**

**Algorithme 3 :** Méthode de dichotomie permettant de trouver un zéro d'une fonction continue sur un intervalle  $[a, b]$

Si l'on applique cet algorithme à  $f'$ , on trouvera donc une approximation d'un point stationnaire de  $f$ , si il en existe un sur l'intervalle  $[a, b]$ . Si la fonction  $f$  est convexe, le point stationnaire trouvé sera un minimum global d'après le théorème 9.

**Exercice 13.** Implémenter l'algorithme de dichotomie en Python et trouver un point stationnaire de  $f(x) = e^x + 1/x$  sur l'intervalle  $[0.1, 10]$ . Ce point stationnaire est-il un minimum local ? Un minimum global ?

Correction : Nous avons  $f'(x) = e^x - 1/x^2$  et  $f''(x) = e^x + 2/x^3$ .

On peut appliquer l'algorithme de dichotomie à  $f'$  car  $f'$  continue,  $f'(0.1) < 0$  et  $f'(10) > 0$ . L'algorithme de dichotomie fournit comme point stationnaire  $x^* \simeq 0.703467$ . Comme  $f''(x^*) \simeq 7.77$ , le point  $x^*$  remplit bien les conditions suffisantes du théorème 13 et est donc bien un minimum local.

Par ailleurs, la fonction  $f$  étant convexe, ce minimum local est aussi un minimum global.

## 5.4 Fonction unimodale

Les fonctions unimodales constituent une autre classe de fonctions "faciles" à optimiser. Donnons tout d'abord une définition intuitive d'une fonction unimodale sur un intervalle  $[a, b]$  pour un problème de minimisation. Une fonction unimodale est une fonction qui est

strictement décroissante puis strictement croissante. Il peut ne pas y avoir de phase de croissance (ou de décroissance). Ainsi, une fonction strictement croissante est unimodale. De même, une fonction strictement décroissante sur  $[a, b]$  est unimodale. La figure 5.5 donne plusieurs exemples de fonctions unimodales.

**Définition 8.** Soit  $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$  une fonction continue. On dit que  $f$  est unimodale sur l'intervalle  $[a, b]$  si il existe  $x^* \in [a, b]$  tel que  $f$  est strictement décroissante sur  $[a, x^*]$  et strictement croissante sur  $[x^*, b]$ .

Le minimum de  $f$  sur l'intervalle  $[a, b]$  est donc atteint en  $x^*$  et il n'y a pas d'autres minimums locaux.

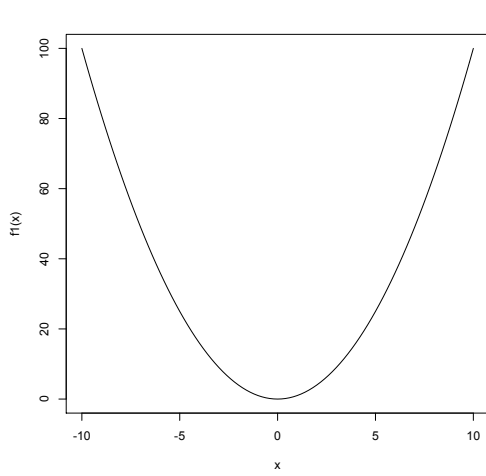
**Propriété 12.** Une fonction strictement convexe est unimodale.

La réciproque n'est pas vraie (voir par exemple les figures 5.5b, 5.5c et 5.5d).

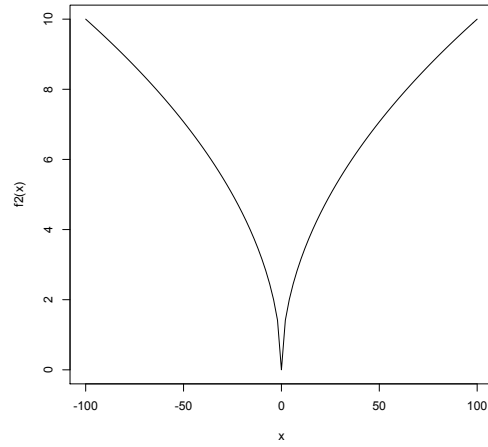
Dans le TP qui vous sera distribué, plusieurs méthodes sont présentées pour trouver le minimum de fonctions unimodales.

Pour un problème de maximisation, une fonction unimodale pourra être définie comme une fonction strictement décroissante, puis croissante.

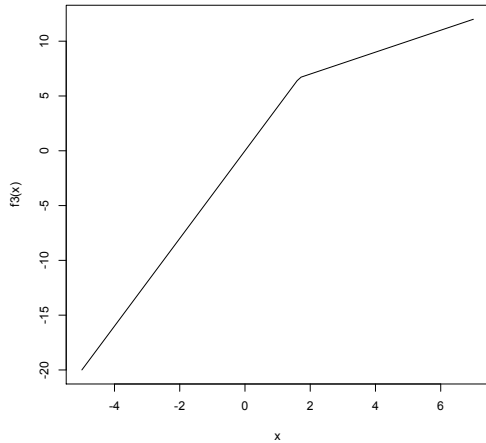




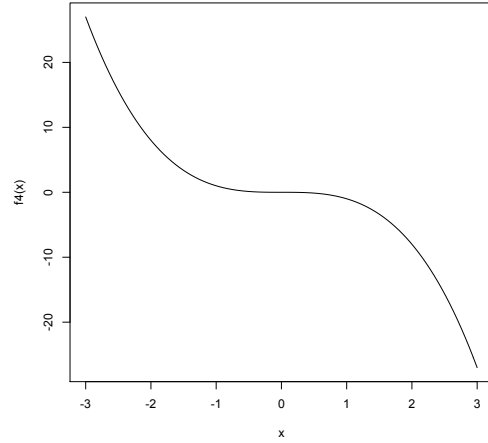
- (a)  $f_1(x) = x^2$ . Le minimum est atteint en  $x^* = 0$  et vaut  $f(x^*) = 0$ . Cette fonction est strictement convexe.



- (b)  $f_2(x) = \sqrt{-x}$  si  $x < 0$  et  $f_2(x) = \sqrt{x}$  si  $x \geq 0$ . Le minimum est atteint en  $x^* = 0$  et vaut  $f(x^*) = 0$ . Cette fonction n'est ni convexe, ni concave.



- (c)  $f_3(x) = \min(4x, x+5)$  pour  $x \in [-5, 7]$ . Le minimum est atteint en  $x^* = -5$  et vaut  $f_3(-5) = -20$ . Cette fonction est strictement croissante et strictement concave.



- (d)  $f_4(x) = -x^3$  pur  $x \in [-3, +3]$ . Le minimum est atteint en  $x^* = 3$  et vaut  $f(3) = -27$ . Cette fonction est strictement croissante mais n'est ni convexe, ni concave.

FIGURE 5.5 – Exemples de fonctions unimodales

# Chapitre 6

## Optimisation à plusieurs variables

Nous allons maintenant considérer le problème de la minimisation d'une fonction à  $n$  variables  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ .

$$\begin{array}{ll} \min & f(x_1, \dots, x_n) \\ \text{s.c.} & (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n \end{array}$$

La fonction  $f$  sera appelée la fonction objectif.

En notant  $x = (x_1, \dots, x_n)^\top$ , ce problème de minimisation s'écrit alors

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{s.c.} & x \in \mathbb{R}^n \end{array}$$

Les notions de minimum local et de minimum global s'étendent naturellement au cas d'une fonction à plusieurs variables :

- On dit que  $f$  atteint en  $x^*$  un minimum global si  $f(x^*) \leq f(x)$  pour tout  $x \in \mathbb{R}^n$
- On dit que  $f$  atteint un minimum local en  $x^*$  si il existe un voisinage  $V$  de  $x^*$  tel que  $f(x^*) \leq f(x)$  pour tout  $x \in V$ .

Les figures qui suivent illustrent graphiquement pour des fonctions à deux variables les notions de minimum local, minimum global et point selle.

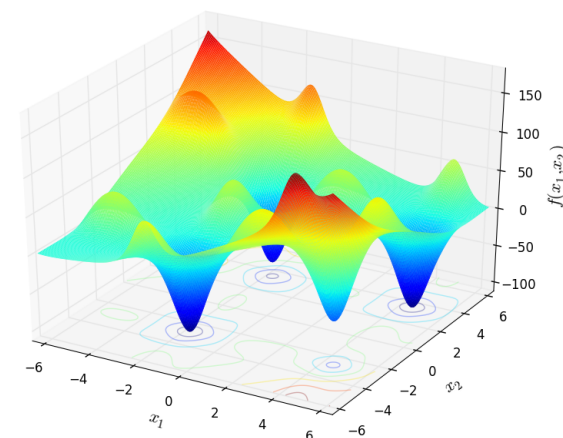


FIGURE 6.1 – Un exemple de fonction à deux variables  $f(x_1, x_2)$

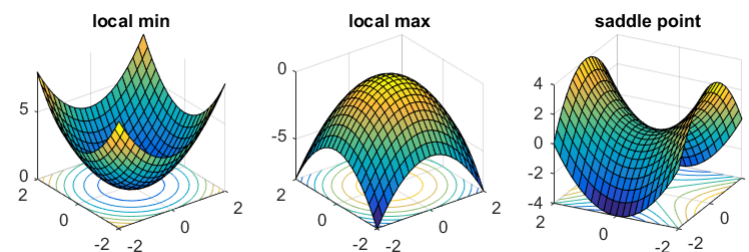


FIGURE 6.2 – Minimum local (local min), maximum local (local max) et point selle (saddle point)

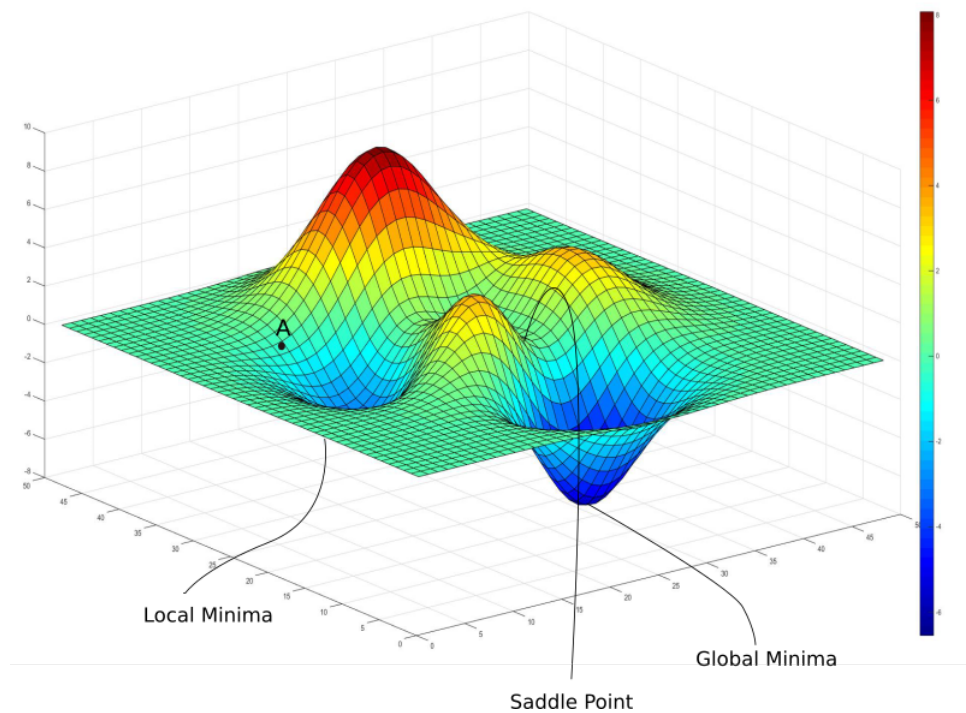


FIGURE 6.3 – Minimum local (local minima) versus minimum global (global minima)

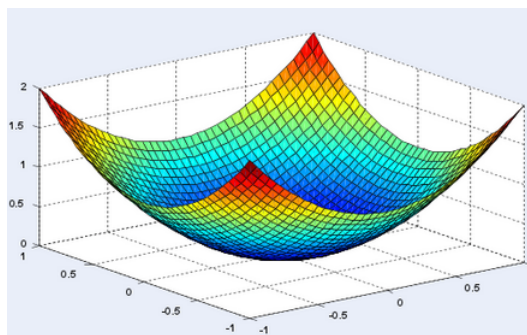


FIGURE 6.4 – Un exemple de fonction à deux variables convexe, "facile" à minimiser : un minimum local est aussi un minimum global

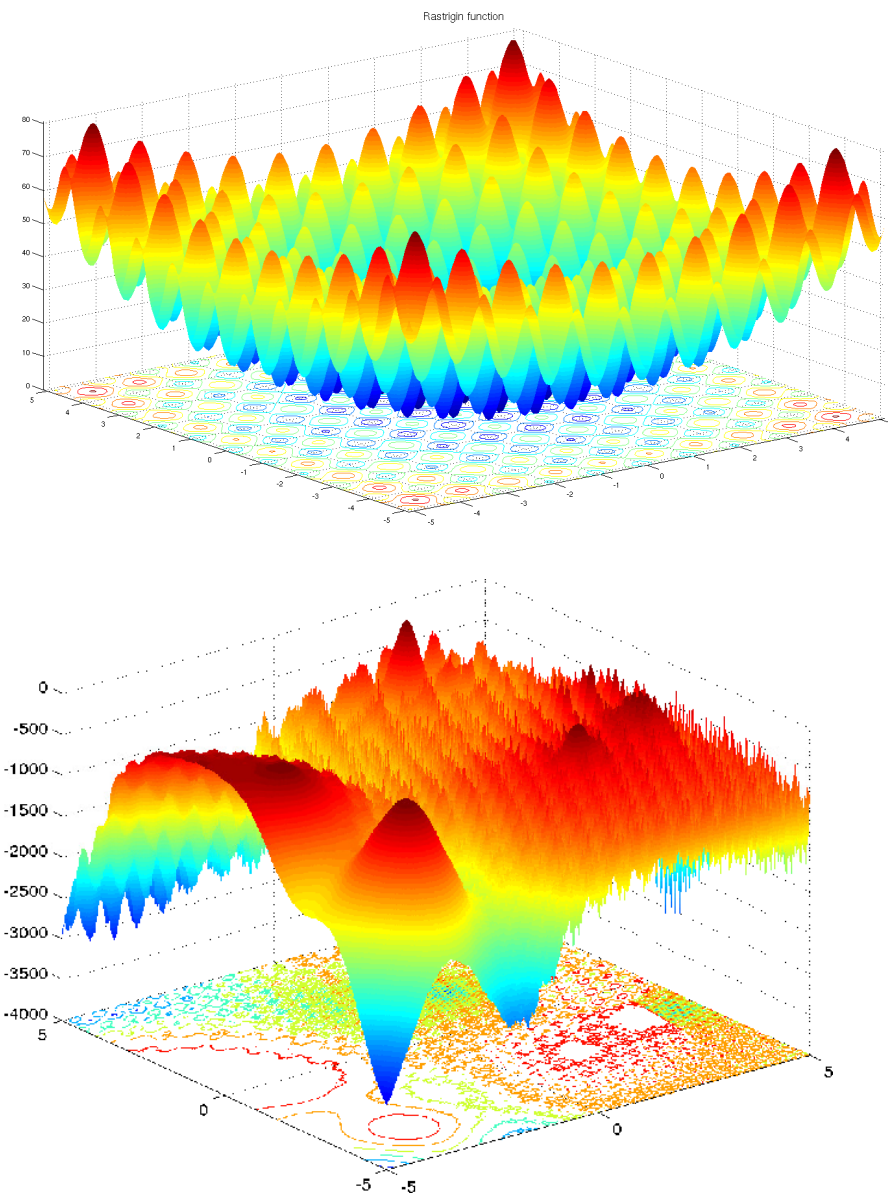


FIGURE 6.5 – Deux exemples de fonctions à deux variables avec de nombreux minimums locaux. Il est "difficile" de trouver le minimum global pour de telles fonctions.

## 6.1 Différentiation

La notion de différentiabilité généralise la notion de dérivabilité à des fonctions de plusieurs variables. La fonction  $f$  est différentiable en un point  $x$  si il existe une approximation linéaire de la fonction  $f$  au voisinage de  $x$ . Pour simplifier l'exposé de ce cours, nous supposons que toutes les fonctions considérées sont deux fois différentiables.

### 6.1.1 Gradient

Le gradient de  $f$ , noté  $\nabla f$ , est la généralisation de la dérivée à une fonction à plusieurs variables :

$$\nabla f = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

Rappelons que  $\frac{\partial f}{\partial x_i}$  désigne la dérivée de  $f$  par rapport à la variable  $x_i$ .

Le gradient définit un champ de vecteurs comme représenté sur la figure 6.6. Le gradient en un point indique la direction vers laquelle la fonction  $f$  augmente le plus (localement). Sa norme indique l'intensité de cette variation locale.

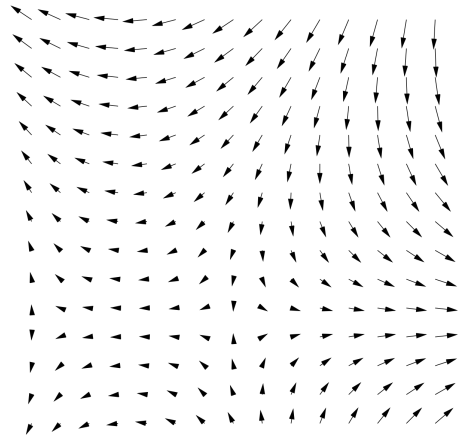


FIGURE 6.6 – Gradient pour une fonction à deux variables (figure tirée de Wikipedia, article "Champ de vecteurs")

**Exercice 14.** Soit la fonction  $f(x_1, x_2, x_3) = x_1 e^{x_2} \sin(x_3)$ . Quel est le gradient de  $f$  ?

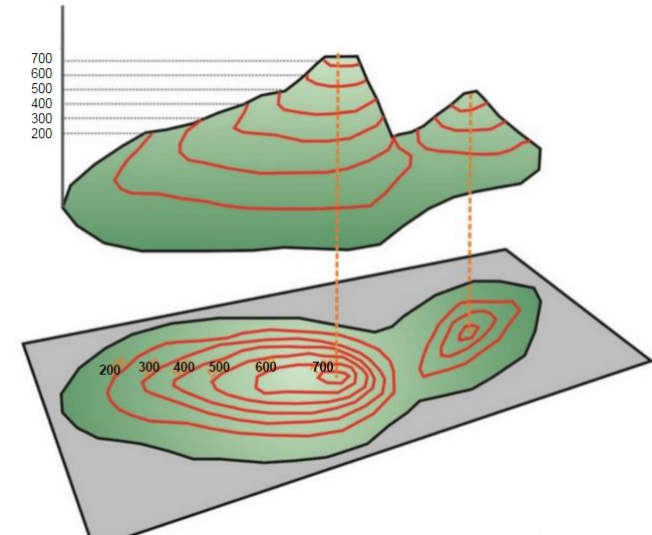
Correction :

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} e^{x_2} \sin(x_3) \\ x_1 e^{x_2} \sin(x_3) \\ x_1 e^{x_2} \cos(x_3) \end{pmatrix}$$

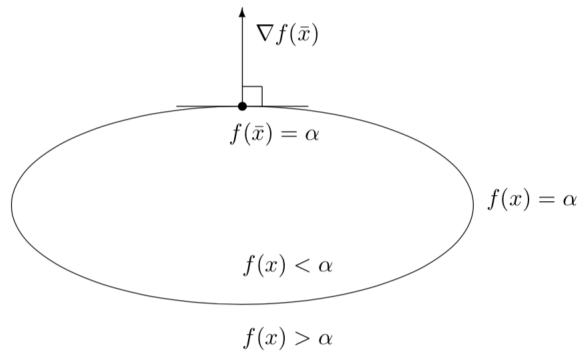
**Exercice 15.** Soit la fonction  $f(x) = \|x\|^2$  (norme euclidienne). Montrer que  $\nabla f(x) = 2x$ .

### 6.1.2 Courbes de niveau

On appelle courbe de niveau l'ensemble  $\{(x_1, \dots, x_n) | f(x_1, \dots, x_n) = \alpha\}$  où  $\alpha$  est une constante. Sur les cartes IGN représentent par exemple, les courbes de niveau représentent l'altitude en fonction de la latitude et de la longitude.



**Propriété 13.** Le gradient en  $x$  est orthogonal à la courbe de niveau en  $x$  et pointe vers la région où la valeur de  $f$  est la plus grande.



Examinons le cas particulier des courbes de niveau d'une fonction quadratique.

### 6.1.3 Fonction vectorielle

Une fonction  $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^p$  est appelée fonction vectorielle car elle transforme un vecteur en un autre vecteur. Une telle fonction est définie par ses  $p$  composantes  $F_1, \dots, F_p$  allant de  $\mathbb{R}^n$  dans  $\mathbb{R}$ .

$$F : \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} F_1(x_1, \dots, x_n) \\ \vdots \\ F_p(x_1, \dots, x_n) \end{pmatrix}$$

Le gradient d'une fonction vectorielle est définie comme la matrice  $n \times p$  dont les colonnes sont les gradients des fonctions  $F_i$ .

$$\nabla F(x) = [\nabla F_1(x) \ \nabla F_2(x) \ \dots \ \nabla F_p(x)]$$

On définit par ailleurs le jacobien comme étant la transposée du gradient :

$$J_F(x) = \nabla F(x)^\top = \begin{bmatrix} \nabla F_1(x)^\top \\ \nabla F_2(x)^\top \\ \vdots \\ \nabla F_p(x)^\top \end{bmatrix}.$$

**Exercice 16.** Soit la fonction vectorielle  $F : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$  telle que

$$F(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} x_1 - x_2 \\ 2x_1 + 3x_2 \\ x_1 x_2 \end{pmatrix}$$

Donner le gradient et le Jacobien de  $F$ .

Correction : Nous avons  $F(x_1, x_2) = (F_1(x_1, x_2), F_2(x_1, x_2), F_3(x_1, x_2))^\top$  avec  $F_1(x_1, x_2) = x_1 - x_2$ ,  $F_2(x_1, x_2) = 2x_1 + 3x_2$  et  $F_3(x_1, x_2) = x_1 x_2$ .

$$\nabla F(x) = [\nabla F_1(x) \ \nabla F_2(x) \ \nabla F_3(x)] = \begin{pmatrix} 1 & 2 & x_2 \\ -1 & 3 & x_1 \end{pmatrix}$$

$$J_F(x) = \nabla F(x)^\top = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 2 & 3 \\ x_2 & x_1 \end{pmatrix}$$

### 6.1.4 Matrice hessienne

Nous allons généraliser la notion de dérivée seconde à une fonction à plusieurs variables  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ . Remarquons tout d'abord que  $\nabla f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  est une fonction vectorielle. On appellera hessienne le gradient du gradient de  $f$  :

$$\begin{aligned} \nabla^2 f &= \nabla(\nabla f) \\ &= \left( \nabla \left( \frac{\partial f}{\partial x_1} \right) \quad \dots \quad \nabla \left( \frac{\partial f}{\partial x_n} \right) \right) \\ &= \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Ainsi, la hessienne de  $f$ , notée  $\nabla^2 f(x)$ , est la matrice des dérivées secondes de  $f$  :

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

Nous savons que  $\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}$  (sous certaines conditions que nous supposons vérifiées dans ce cours). La hessienne est donc une matrice symétrique.

**Exercice 17.** Soit la fonction  $f(x_1, x_2, x_3) = x_1 e^{x_2} \sin(x_3)$ . Donner la hessienne de  $f$ .

Correction :

$$\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} 0 & e^{x_2} \sin(x_3) & e^{x_2} \cos(x_3) \\ e^{x_2} \sin(x_3) & x_1 e^{x_2} \sin(x_3) & x_1 e^{x_2} \cos(x_3) \\ e^{x_2} \cos(x_3) & x_1 e^{x_2} \cos(x_3) & -x_1 e^{x_2} \sin(x_3) \end{pmatrix}$$

### 6.1.5 Développement de Taylor

Le développement de Taylor se généralise à des fonctions à plusieurs variables. Nous noterons  $d = (d_1, \dots, d_n)$  une direction et  $t$  un réel.

Pour une fonction différentiable, le développement de Taylor à l'ordre 1 s'écrit

$$f(x + td) = f(x) + td^\top \nabla f(x) + o(t).$$

Pour une fonction différentiable deux fois, le développement de Taylor à l'ordre 2 s'écrit

$$f(x + td) = f(x) + td^\top \nabla f(x) + \frac{t^2}{2} d^\top \nabla^2 f(x) d + o(t^2).$$

### 6.1.6 Règles de différentiation

On peut établir les règles de différentiation suivantes :

1.  $\nabla(A) = 0$  avec  $A$  matrice  $(n \times p)$
2.  $\nabla(af) = a\nabla f$  avec  $a$  un réel et  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^p$
3.  $\nabla(f_1 + f_2) = \nabla f_1 + \nabla f_2$  avec  $f_1$  et  $f_2$  allant de  $\mathbb{R}^n$  dans  $\mathbb{R}^p$
4. Si  $B$  est une matrice  $(p \times n)$ , alors

$$\nabla(Bx) = B^\top$$

5. Fonction affine avec  $a$  un vecteurs colonne de  $\mathbb{R}^n$  et  $b \in \mathbb{R}$  :

$$\nabla(a^\top x + b) = a$$

Ce résultat se déduit des propriétés 1, 3 et 4.

6. Forme quadratique avec  $A$  matrice carrée  $(n \times n)$

$$\nabla(x^\top Ax) = (A + A^\top)x \quad (= 2Ax \text{ si } A \text{ est symétrique})$$

### Règle de chainage

Soit  $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^p$  et  $g : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}^q$ . Soit  $\phi = g \circ h$  leur composition :

$$\phi(x) = g[h(x)]$$

Alors

$$\nabla \phi(x) = \nabla h(x) \nabla g[h(x)]$$

**Exercice 18.** Soit  $f(x) = \|Ax - b\|^2$  (norme euclidienne) où  $A$  est une matrice  $(p \times n)$  et  $b$  un vecteur colonne de  $\mathbb{R}^p$ . Montrer que  $\nabla f(x) = 2A^\top(Ax - b)$  et  $\nabla^2 f(x) = 2A^\top A$ .

**Exercice 19.** Soit  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $t \in \mathbb{R}$  et  $d \in \mathbb{R}^n$ . Soit la fonction  $\theta(t) = f(x + td)$ . Montrer que

$$\theta'(t) = d^\top \nabla f(x + td)$$

Correction : Nous avons  $\theta = f \circ h$  avec  $h(t) = x + td = \begin{pmatrix} x_1 + td_1 \\ \vdots \\ x_n + td_n \end{pmatrix}$ . De plus  $\nabla h(t) =$

$(d_1, \dots, d_n) = d^\top$ . En utilisant la règle de chaînage, il vient

$$\theta'(t) = \nabla h(t) \nabla f[h(t)] = d^\top \nabla f(x + td)$$

## 6.2 Formes quadratiques

Une forme quadratique  $q(x)$  est un polynôme à plusieurs variables ne comprenant que des termes de type  $x_i x_j$  de degré total égal à 2. Voici quelques exemples :

$$q(x_1) = 3x_1^2$$

$$q(x_1, x_2) = 2x_1^2 - 3x_2^2 + 7x_1 x_2$$

$$q(x_1, x_2, x_3) = 2x_1^2 - 3x_2^2 + x_3^2 + 6x_1 x_2 + 2x_1 x_3 - 5x_2 x_3$$

Une forme quadratique de degré  $n$  peut s'écrire sous la forme

$$q(x) = x^\top A x = \sum_i a_{ii} x_i^2 + 2 \sum_{1 \leq i < j \leq n} a_{ij} x_i x_j$$

où  $A$  est une matrice symétrique d'ordre  $n$ .

Par exemple, nous avons pour les exemples ci-dessus :

$$2x_1^2 - 3x_2^2 + 7x_1 x_2 = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 7/2 \\ 7/2 & -3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

$$2x_1^2 - 3x_2^2 + x_3^2 + 3x_1 x_2 + 2x_1 x_3 - 5x_2 x_3 = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 6 & 1 \\ 6 & -3 & -5/2 \\ 1 & -5/2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

## 6.3 Matrices définies positives

**Définition 9** (Matrice définie positive). Soit  $A$  une matrice carrée d'ordre  $n$ . On dit que  
—  $A$  est définie positive ( $A > 0$ ) si

$$\forall x \in \mathbb{R}^n, x \neq 0, x^\top A x > 0$$

—  $A$  est semi-définie positive ( $A \geq 0$ ) si

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

**Exercice 20.** Soit  $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ . Montrer que  $A$  est définie positive.

$$x^\top A x = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = x_1^2 + x_1 x_2 + 2x_2^2 = (x_1 + 0.5x_2)^2 + 1.75x_2^2$$

qui est strictement positif si  $(x_1, x_2) \neq 0$ .

**Théorème 10** (Admis). Soit  $A$  une matrice carrée symétrique d'ordre  $n$ . Alors

- $A$  est définie positive si et seulement si les valeurs propres de  $A$  sont strictement positives
- $A$  est semi-définie positive si et seulement si les valeurs propres de  $A$  sont positives

## 6.4 Conditions d'optimalité

**Définition 10.** On dit que  $x^*$  est un point stationnaire si  $\nabla f(x^*) = 0$ .

**Théorème 11** (Condition nécessaire du 1er ordre). Soit  $f$  une fonction différentiable. Si  $x^*$  est un minimum local de  $f$ , alors  $\nabla f(x^*) = 0$ .

*Démonstration.* En observant le développement de Taylor à l'ordre 1 en  $x^*$ , il faut nécessairement, pour que  $x^*$  soit un minimum local, que  $d^\top \nabla f(x^*) \geq 0$  pour toute direction  $d$ . Ceci implique que  $\nabla f(x^*) = 0$ .  $\square$

**Théorème 12** (Condition nécessaire du 2nd ordre). Soit  $f$  une fonction deux fois différentiables. Si  $x^*$  est un minimum local de  $f$ , alors  $\nabla^2 f(x^*)$  est semi-définie positive.

*Démonstration.* En observant le développement de Taylor à l'ordre 2 en  $x^*$ , il faut nécessairement que  $d^\top \nabla f(x^*) d \geq 0$  pour toute direction  $d$ , ce qui revient à ce que  $\nabla^2 f$  soit semi-définie positive.  $\square$

**Théorème 13** (Conditions suffisantes). Soit  $f$  une fonction deux fois différentiables. Si les deux conditions suivantes sont réunies, alors  $x^*$  est un minimum local.

1.  $\nabla f(x^*) = 0$  (point stationnaire)
2.  $\nabla^2 f(x^*) > 0$  (hessienne définie positive)

*Démonstration.* En observant le développement de Taylor, les conditions ci-dessus impliquent immédiatement que  $x^*$  est un minimum local.  $\square$

**Exercice 21.** Soit  $f(x_1, x_2) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$ . Déterminer les points stationnaires, les minimums locaux et les minimums globaux de  $f$ .

Correction : Calculons le gradient de  $f$  :

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} -400x_1(x_2 - x_1^2) + 2(x_1 - 1) \\ 200(x_2 - x_1^2) \end{pmatrix}$$

$$\nabla f(x) = 0 \Leftrightarrow x = (1, 1)^\top$$

Le point  $x^* = (1, 1)^\top$  est donc le seul point stationnaire.

$$\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} -400x_2 + 1200x_1^2 + 2 & -400x_1 \\ -400x_1 & 200 \end{pmatrix}$$

D'où

$$\nabla^2 f(x^*) = \nabla^2 f(x^*) = \begin{pmatrix} 802 & -400 \\ -400 & 200 \end{pmatrix}$$

On a alors  $\text{Trace}(\nabla^2 f(x^*)) = \lambda_1 + \lambda_2 = 1000 > 0$  et  $\det(\nabla^2 f(x^*)) = \lambda_1 \lambda_2 = 400 > 0$ , ce qui implique que les valeurs propres  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  sont strictement positives. La hessienne est donc définie positive en  $x^*$  et  $x^*$  est un minimum local.

On remarque par ailleurs que  $f(x_1, x_2) \geq 0$  pour tout  $(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2$ . Comme  $f(1, 1) = 0$ , on peut conclure que  $x^*$  est un minimum global.

## 6.5 Fonction convexe

**Définition 11** (Ensemble convexe). Un sous-ensemble  $C$  de  $\mathbb{R}^n$  est un ensemble convexe si

$$\forall (a, b) \in C^2, \quad \forall \lambda \in ]0, 1[, \quad \lambda a + (1 - \lambda)b \in C$$

La figure 6.7 donne des exemple d'ensembles convexes et non convexes.



FIGURE 6.7 – Ensembles convexes ou non

**Définition 12** (Fonction convexe). Une fonction  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  est convexe sur un ensemble convexe  $C$  de  $\mathbb{R}^n$  si

$$\forall (a, b) \in C^2, \quad \forall \lambda \in ]0, 1[, \quad f(\lambda a + (1 - \lambda)b) \leq \lambda f(a) + (1 - \lambda)f(b)$$



La figure 6.8 représente une fonction convexe à deux variables.

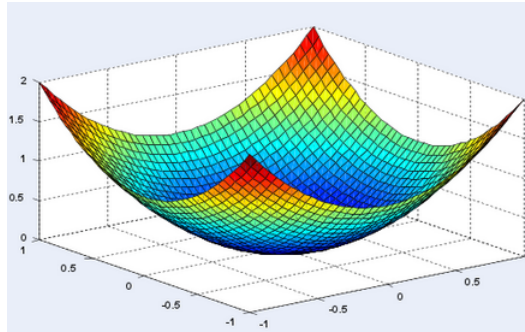


FIGURE 6.8 – Un exemple de fonction à deux variables convexe, "facile" à minimiser : un minimum local est aussi un minimum global

Une fonction  $f$  est concave si  $-f$  est convexe. La notion de stricte convexité est définie de manière similaire avec une inégalité stricte.

**Définition 13** (Fonction strictement convexe). Une fonction  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  est strictement convexe sur un ensemble convexe  $C$  de  $\mathbb{R}^n$  si

$$\forall (a, b) \in C^2, \quad \forall \lambda \in ]0, 1[, \quad f(\lambda a + (1 - \lambda)b) < \lambda f(a) + (1 - \lambda)f(b)$$

Quelques exemples de fonctions convexes :

- $f(x) = a^\top x + \alpha$  (fonction affine)
- $f(x) = x^\top Hx$  (fonction quadratique) avec  $H$  matrice carrée semi-définie positive
- $f(x) = e^{c(x)}$ , où  $c$  est une fonction convexe
- $f(x) = \|x\|$ , où  $\|\cdot\|$  est une norme vectorielle quelconque
- $f(x) = af_1(x)$ , où  $f_1$  est convexe et  $a \geq 0$
- $f(x) = f_1(x) + f_2(x)$ , où  $f_1$  et  $f_2$  sont deux fonctions convexes
- $f(x) = \max\{f_1(x), f_2(x)\}$ , où  $f_1$  et  $f_2$  sont deux fonctions convexes.

**Propriété 14** (Convexité et hessienne). Soit  $f$  une fonction deux fois différentiable. Alors  $f$  est convexe si et seulement si la hessienne  $\nabla^2 f(x)$  est semi-définie positive pour tout  $x \in \mathbb{R}^n$ .

**Propriété 15** (Stricte convexité et hessienne). Soit  $f$  une fonction deux fois différentiable. Alors  $f$  est strictement convexe si la hessienne  $\nabla^2 f(x)$  est définie positive pour tout  $x \in \mathbb{R}^n$ .

**Théorème 14** (admis). Soit  $f$  une fonction convexe. Alors un minimum local est aussi un minimum global. Si, de plus,  $f$  est strictement convexe, il existe alors au plus un minimum local.

**Théorème 15** (admis). Soit  $f$  une fonction convexe et différentiable. Alors  $x^*$  est un minimum global de  $f$  si et seulement si  $\nabla f(x^*) = 0$ .

## 6.6 Fonction quadratique

Une fonction quadratique est l'extension à  $\mathbb{R}^n$  d'un polynôme du second degré. Elle peut s'écrire sous la forme  $x^\top Ax + b^\top x + c$  avec  $A$  matrice symétrique,  $b \in \mathbb{R}^n$  et  $c \in \mathbb{R}$ . Voici des exemples de fonctions quadratiques dans  $\mathbb{R}^2$  et dans  $\mathbb{R}^3$

$$f(x_1, x_2) = x_1^2 + 2x_2^2 - 3x_1x_2 + 7x_1 - 8x_2 + 2$$

$$f(x_1, x_2, x_3) = x_1^2 + 2x_2^2 - x_3^2 - 3x_1x_2 - 2x_1x_3 + 4x_2x_3 + 7x_1 - 8x_2 + x_3 + 1$$

Une fonction quadratique est donc la somme (pondérée) de termes quadratiques  $x_i x_j$ , de termes linéaires  $x_i$  et d'une constante.

Pour simplifier les résultats qui suivront, nous écrirons une fonction quadratique sous la forme

$$f(x) = \frac{1}{2}x^\top Ax - b^\top x + c$$

Grâce aux règles de différentiation, nous pouvons aisément calculer le gradient et la hessienne d'une fonction quadratique.

$$\nabla f(x) = Ax - b$$

$$\nabla^2 f(x) = A$$

Ainsi, si  $A$  est définie positive (et donc inversible), la fonction  $f$  est strictement convexe et possède un unique minimum solution de

$$\nabla f(x) = 0 \Leftrightarrow Ax = b \Leftrightarrow x = A^{-1}b.$$

Notons au passage que minimiser la fonction quadratique  $f$  revient alors à résoudre le système linéaire  $Ax = b$ .

Lorsque  $A$  est semi-définie positive mais pas inversible, alors la fonction  $f$  est convexe et tout point stationnaire est un minimum local et global.

Lorsque  $A$  n'est pas semi-définie positive, il n'y a pas de minimum local d'après les conditions nécessaires.

**Exercice 22.** Déterminer les minimums globaux de  $f(x_1, x_2) = \frac{1}{2}(\alpha x_1^2 + \beta x_2^2) - x_1$  où  $\alpha$  et  $\beta$  sont des réels.

Correction : Calculons le gradient et cherchons dans un premier temps les points stationnaires.

$$\nabla f(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} \alpha x_1 - 1 \\ \beta x_2 \end{pmatrix}$$

- Si  $\alpha = 0$ , pas de point stationnaire et donc pas de minimum local d'après les conditions nécessaires d'optimalité. Il n'y a donc pas non plus de minimum global.
- Si  $\alpha \neq 0$  et  $\beta \neq 0$ , il existe un unique point stationnaire  $(1/\alpha, 0)^\top$ .
- Si  $\alpha \neq 0$  et  $\beta = 0$ , tous les points  $(1/\alpha, x_2)$ , avec  $x_2 \in \mathbb{R}$ , sont stationnaires.



Supposons dans la suite que  $\alpha \neq 0$  et étudions la convexité.

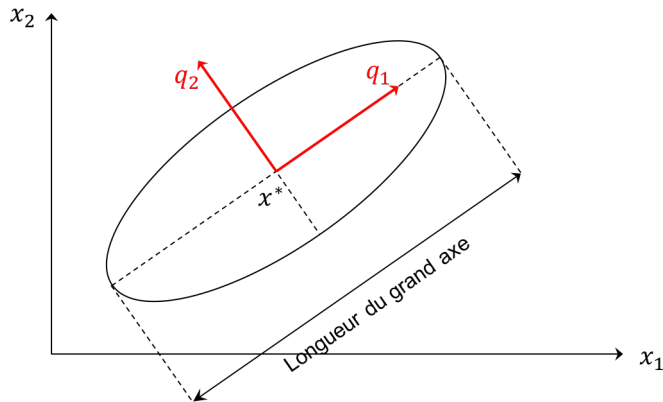
$$\nabla^2 f(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix}$$

- Si  $\alpha > 0$  et  $\beta > 0$ , alors la hessienne est définie positive et  $f$  est strictement convexe. L'unique point stationnaire  $(1/\alpha, 0)^\top$  est donc l'unique minimum global.
- Si  $\alpha < 0$  ou  $\beta < 0$ , alors la hessienne n'est pas semi-définie positive et il n'y a pas de minimum local ou global
- Si  $\alpha > 0$  et  $\beta = 0$ , alors la hessienne est semi-définie positive et la fonction  $f$  est convexe. Tout point stationnaire  $(1/\alpha, x_2)^\top$ , avec  $x_2 \in \mathbb{R}$ , est un minimum global.

## Courbes de niveaux

Considérons une fonction quadratique à deux variables strictement convexe. On peut montrer que les courbes de niveau sont des ellipses, centrées sur le minimum global  $x^*$ , d'axes orientés par les vecteurs propres (normés)  $q_1$  et  $q_2$  de  $A$ . Le rapport des longueurs des axes est lié aux valeurs propres  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  de  $A$  :

$$\frac{\text{Longueur axe 1}}{\text{Longueur axe 2}} = \sqrt{\frac{\lambda_2}{\lambda_1}}$$



## 6.7 Méthodes de descente

**Définition 14** (Direction de descente). *Un vecteur  $d$  de  $\mathbb{R}^n$  est une direction de descente pour la fonction  $f$  au point  $x$  si*

$$\nabla f(x)^\top d < 0.$$

Soit  $d$  une direction de descente et  $t$  un réel positif. On suppose  $t$  suffisamment petit pour que l'approximation du premier ordre suivante soit valable :

$$f(x + td) \approx f(x) + \underbrace{td^\top \nabla f(x)}_{<0}.$$

On a alors  $f(x + td) < f(x)$  et on a amélioré la fonction objectif.

Les méthodes de descente sont des méthodes itératives pour la minimisation des fonctions différentiables dans lesquelles une direction de descente est choisie à chaque itération à partir des informations locales. Le schéma général est donné ci-dessous :

**Initialisation.** Choisir un vecteur initial  $x_0 \in \mathbb{R}^n$ .

**Itération  $k$ .**

- Choisir une direction de descente  $d_k$
- Choisir un pas de descente  $t_k > 0$
- Calculer un nouveau point

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

## 6.8 Méthode du gradient

La méthode du gradient est une méthode de descente consistant à choisir comme direction de descente celle de plus grande pente, à savoir la direction opposée au gradient :

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

où  $g_k$  désigne le gradient de  $f$  au point  $x_k$ . On pourra aussi utiliser une version normée de la direction de descente :  $d_k = -g_k / \|g_k\|$ .

L'algorithme 4 illustre une implémentation possible de la méthode du gradient. Reste dans cet algorithme à définir le critère d'arrêt et la méthode de sélection du pas de descente.

**Données :**  $f, x_0, \epsilon$

**Résultat :**  $x$

Initialisation :  $x \leftarrow x_0$ ;

**tant que** Critère d'arrêt  $> \epsilon$  **faire**

    Calcul de la direction de descente :  $d \leftarrow -\nabla f(x)$ ;

    Calcul du pas de descente  $t$  ;

    Calcul du nouveau point :  $x \leftarrow x + td$  ;

**fin**

**Algorithme 4 :** Méthode du gradient

### 6.8.1 Critère d'arrêt

Plusieurs critères d'arrêt peuvent être utilisés, par exemple :

$$\begin{aligned}\|\nabla f(x_k)\| &\leq \epsilon \\ \|f(x_{k+1}) - f(x_k)\| &\leq \epsilon \\ \|x_{k+1} - x_k\| &\leq \epsilon \\ \frac{\|x_{k+1} - x_k\|}{\|x_k\|} &\leq \epsilon\end{aligned}$$

### 6.8.2 Sélection du pas de descente

On peut sélectionner le pas de diverses manières. Voici quelques exemples.

#### Pas constant

La méthode à pas constant ( $t_k = t$ ) est très simple. Cependant, si le pas est trop grand la méthode peut diverger. Si le pas est trop petit, la vitesse de convergence va être très lente.

#### Pas décroissants

On va choisir une suite de pas décroissants, satisfaisant les deux conditions suivantes

$$\begin{aligned}t_k &\xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} 0 \\ \sum_{k=0}^{\infty} t_k &= +\infty\end{aligned}$$

La dernière condition garantit que la suite  $(t_k)$  ne converge pas vers un point non stationnaire.

#### Pas optimal

A l'itération  $k$ , le pas optimal est le pas  $t_k$  qui minimise la fonction

$$\theta(t) = f(x_k + td_k).$$

D'après l'exercice 19, nous avons

$$\theta'(t) = d_k^\top \nabla f(x_k + td_k).$$

En particulier,

$$\begin{aligned}\theta'(t_k) &= d_k^\top \nabla f(x_k + t_k d_k) \\ &= d_k^\top \nabla f(x_{k+1}) \\ &= d_k^\top g_{k+1}.\end{aligned}\tag{6.1}$$

Si  $t_k$  minimise la fonction  $\theta(t)$ , alors  $\theta'(t_k) = 0$ . Il suit que  $d_k^\top g_{k+1} = 0$  et  $g_{k+1}$  est orthogonal à  $d_k$ . Nous pouvons alors énoncer la proposition suivante.

**Proposition 3.** *Si  $t_k$  minimise la fonction  $\theta(t) = f(x_k + td_k)$ , le gradient  $g_{k+1}$  au point  $x_{k+1} = x_k + t_k d_k$  est orthogonal à la direction  $d_k$ .*

Cette proposition implique que les directions successives de la méthode du gradient sont orthogonales si les pas  $t_k$  sont choisis de manière optimale. La direction de plus grande pente peut donc être très mauvaise en ce qui concerne la direction du minimum. La figure 6.9 illustre le déplacement en zigzag de la méthode du gradient (avec pas optimal) vers la solution optimale.

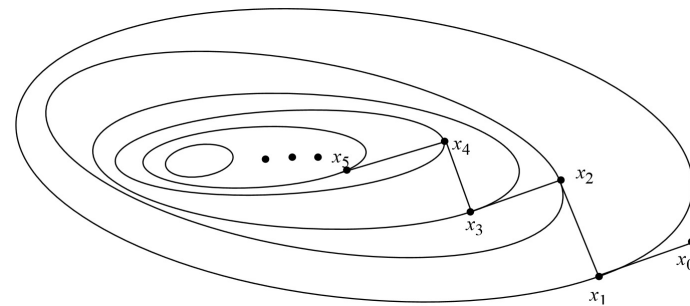


FIGURE 6.9 – Comportement de la méthode du gradient pour une fonction à deux variables. Les ellipses représentent des courbes de niveau et le minimum est au centre de la plus petite ellipse.

En général, le pas optimal ne peut pas être déterminé de manière exacte et on doit recourir à une méthode d'optimisation numérique à une dimension.

### 6.8.3 Convergence vers un point stationnaire

On peut montrer que la méthode du gradient (avec pas constant, décroissant ou optimal) converge vers un point stationnaire sous certaines hypothèses relativement techniques (voir par exemple Bertsekas [2016]). La convergence peut néanmoins être lente en pratique. Voici un exemple de résultat de convergence.

**Proposition 4 (Admis).** *Soit la méthode du gradient  $x_{k+1} = x_k - t_k \nabla f(x_k)$ . Supposons que  $f$  est convexe, admet un minimum et que, pour tout  $x, y$ , il existe  $L > 0$  tel que*

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \leq L\|x - y\|.$$

*Alors  $x_k$  converge vers le minimum de  $f$  si  $t_k \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} 0$  et  $\sum_{k=0}^{\infty} t_k = +\infty$ .*

### 6.8.4 Cas des fonctions quadratiques

Nous allons nous intéresser dans cette section au cas particulier d'une fonction quadratique :

$$f(x) = \frac{1}{2}x^\top Ax - b^\top x + c,$$

$$\nabla f(x) = Ax - b.$$

Nous supposons que  $A$  est une matrice symétrique définie positive d'ordre  $n$  et donc que  $f$  est strictement convexe.

Considérons la méthode du gradient avec pas optimal. La direction choisie est donc  $d_k = -g_k$  avec  $g_k = \nabla f(x_k)$ . Comme vu en équation (6.1), nous avons

$$\begin{aligned}\theta'(t_k) &= d_k^\top \nabla f(x_k + t_k d_k) \\ &= d_k^\top [A(x_k + t_k d_k) - b] \\ &= d_k^\top [Ax_k - b + t_k Ad_k] \\ &= d_k^\top [g_k + t_k Ad_k] \\ &= d_k^\top g_k + t_k d_k^\top Ad_k \\ &= -g_k^\top g_k + t_k g_k^\top Ag_k\end{aligned}$$

Il suit

$$\theta'(t_k) = 0 \Leftrightarrow t_k = \frac{g_k^\top g_k}{g_k^\top Ag_k}$$

Récapitulons les différentes étapes à l'itération  $k$  :

- Calcul du gradient :  $g_k = Ax_k - b$
- Direction de descente :  $d_k = -g_k$
- Calcul du pas de déplacement optimal :  $t_k = \frac{g_k^\top g_k}{g_k^\top Ag_k}$
- Nouveau point :  $x_{k+1} = x_k + t_k d_k$

On peut par exemple utiliser un critère d'arrêt sur le gradient

$$\|\nabla f(x_k)\|^2 \leq \epsilon \Leftrightarrow g_k^\top g_k \leq \epsilon$$

Nous pouvons ainsi écrire un algorithme de descente de gradient avec de simples calculs matriciels (voir algorithme 5).

## 6.9 Méthode de Newton

La méthode de Newton est une méthode de descente consistant à sélectionner comme point suivant celui qui minimise l'approximation quadratique de  $f$  autour de  $x_k$ . Supposons que

**Données :**  $A, x_0, \epsilon$

**Résultat :**  $x$

initialisation :  $x \leftarrow x_0, g \leftarrow Ax_0 - b$  ;

**tant que**  $g^\top g > \epsilon$  **faire**

$g \leftarrow Ax - b$ ;

$t \leftarrow \frac{g^\top g}{g^\top Ag}$ ;

$x \leftarrow x - t * g$  ;

**fin**

**Algorithme 5 :** Méthode du gradient avec pas optimal pour une fonction quadratique strictement convexe

$x_k$  soit connu et que l'on cherche  $x$  minimisant l'approximation quadratique de  $f$  autour de  $x_k$  :

$$f(x) = \underbrace{f(x_k) + (x - x_k)^\top \nabla f(x_k) + \frac{1}{2}(x - x_k)^\top \nabla^2 f(x_k)(x - x_k)}_{g(x) : \text{fonction quadratique}} + o(\|x - x_k\|^2)$$

Afin de minimiser  $g$ , cherchons son gradient en utilisant les règles de différentiation :

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

Si l'on suppose que la matrice  $\nabla^2 f(x_k)$  est définie positive, alors la fonction  $g$  est strictement convexe et atteint son unique minimum lorsque le gradient s'annule :

$$\nabla g(x) = 0 \Leftrightarrow x = x_k - (\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)$$

La méthode de Newton est donc une méthode de descente avec

$$t_k = 1$$

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

Cette méthode converge rapidement mais le problème réside dans l'évaluation de  $d_k$ .

**Exercice 23.** Montrer que la méthode pure de Newton converge en une itération pour une fonction quadratique définie positive.

Pour une fonction à une variable, la méthode de Newton consiste à calculer la suite de points

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

## 6.10 Méthode du gradient conjugué pour des fonctions quadratiques

**Définition 15.** Soit  $A$  une matrice symétrique définie positive. Deux vecteurs non nuls  $x$  et  $y$  sont dits conjugués par rapport à  $A$  si  $x^\top Ay = 0$ .

Nous allons considérer une fonction quadratique sous la forme

$$f(x) = \frac{1}{2}x^\top Ax - b^\top x + c.$$

L'algorithme du gradient conjugué présentée ci-dessous construit une suite de directions conjuguées.

**Entrées**  $x_0, A, b$

**Initialisation**  $g_0 = Ax_0 - b, d_0 = -g_0$

**Itération**  $k \geq 0$  .

— Calcul du pas de déplacement optimal :

$$t_k = -\frac{g_k^\top d_k}{d_k^\top A d_k}$$

— Nouveau point :

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

— Mise à jour du gradient :

$$g_{k+1} = Ax_{k+1} - b$$

— Mise à jour de la direction de descente :

$$\beta_k = \frac{g_{k+1}^\top A d_k}{d_k^\top A d_k}$$

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

**Théorème 16.** Pour une fonction quadratique strictement convexe, la méthode du gradient conjugué converge vers le minimum global en au plus  $n$  itérations.

## 6.11 Problèmes de maximisation

Si l'on s'intéresse à des problèmes de maximisation, tous les résultats précédents se transposent aisément en notant que maximiser  $f(x)$  revient à minimiser  $-f(x)$ .

On dira que  $x$  est un maximum local (respectivement global) de  $f$  si et seulement si  $x$  est un minimum local (respectivement global) de  $f$ .

# Bibliographie

Dimitri Bertsekas. Nonlinear programming. 2016.