THESIS / THÈSE

MASTER EN SCIENCES MATHÉMATIQUES

Sur l'abandon de la recherche unidimensionnelle exacte dans des problèmes de minimisation

Romain, Nadine

Award date:
1976

Awarding institution:
Universite de Namur

Sur l'abandon de la recherche unidimensionnelle exacte dans des problèmes de minimisation.

ROMAIN
NADINE

Introduction

Dans le passé, on s'est beaucoup intéressé au développement et à l'application d'algorithmes convergeant quadratiquement pour minimiser une fonction suivant une recherche linéaire exacte unidimensionnelle.

Ces algorithmes possédant la propriété de descente à savoir :

$$f(x^{k+1}) < f(x^k)$$

où x^{k+1} est le point obtenu à l'itération $k+1$ et x^k le point obtenu à l'itération k, permettent d'atteindre le minimum d'une fonction quadratiques de n variables :

$$f(x) = a + b^t x + \frac{1}{2} x^t c x$$

où b = vecteur n

a = scalaire

c = matrice symétrique $n \times n$

en au plus n itérations.

Huang [1] a proposé une méthode permettant de construire des algorithmes à métrique variable de la manière suivante :

"Le point x^{k+1} est obtenu à partir du point x^k par les relations :

$$p^k = (H^k)^t g^k \; , \; \Delta x^k = -\alpha^k p^k \; ; \; x^{k+1} = x^k + \Delta x$$

où p^k = la direction de descente

g^k = le gradient de la fonction en x^k

α^k = le pas.

$$H^{k} = H^{k-1} + \rho \frac{\Delta x^{k-1}\left(c_1 \Delta x^{k-1} + c_2 (H^{k-1})^t \Delta g^{k-1}\right)^t}{\left(c_1 \Delta x^{k-1} + c_2 (H^{k-1})^t \Delta g^{k-1}\right)^t \Delta g^{k-1}} - \frac{H^{k-1} \Delta g^{k-1}\left(k_1 \Delta x^{k-1} + k_2 (H^{k-1})^t \Delta g^{k-1}\right)^t}{\left(k_1 \Delta x^{k-1} + k_2 (H^{k-1})^t \Delta g^{k-1}\right)^t \Delta g^{k-1}}$$

où ρ, c_1, c_2, k_1, k_2 sont des constantes arbitraires.
En modifiant la valeur de ces constantes, Fletcher [2], Davidon [3], Pearson [4], ont engendré d'autres familles.
Huang et Levy [5] ont publié des données numériques montrant le comportement de cette famille pour des fonctions non quadratiques.
Dixon [6] a donné une condition nécessaire et suffisante pour que toutes les suites de points engendrées par un groupe de formules appartenant à la famille de Huang et appliquées à la même fonction non quadratique, soient identiques.
Il a démontré [7] des théorèmes relatifs au comportement de la famille de Broyden [8] des formules à métrique variable.

Ces grandes familles que nous considérons traitent du problème de minimisation avec une recherche linéaire exacte unidimensionnelle.
Or, en pratique, on a constaté que numériquement ce problème est irréalisable.
On a donc pensé à considérer des algorithmes ne nécessitant plus cette recherche exacte. Ce sera l'objet de la seconde partie de ce mémoire.
Dixon [9] a montré qu'en modifiant

l'équation donnant la direction de descente :

$$p^k = -H^k g^k$$

il est possible d'engendrer pour une fonction quadratique la même suite de matrices H^k et les mêmes directions de conjugaison p^k que si on utilisait la recherche linéaire exacte. Il emploie la famille de formules introduite par Broyden [8].
Le minimum de la fonction est alors atteint en $n+1$ itérations et $n+2$ évaluations de la fonction et de son gradient.

Mélanie Lenard [11] a donné des conditions de convergence pratiques pour l'optimisation sans contraintes et sans recherche linéaire exacte. Elle a présenté des conditions suffisantes pour établir différentes propriétés de convergence des méthodes gradient en tenant compte de l'erreur introduite par Wolfe [12] à savoir :

$$\theta^k = \frac{\nabla F(x^{k+1})^t d^k}{\nabla F(x^k)^t d^k}$$

Nous étudions dans la troisième partie, des méthodes qui n'utilisent pas la recherche unidimensionnelle.
Une première méthode a été proposée par Fletcher [13]
Huang [14] en a proposé une autre : la méthode des matrices duales ; c'est celle que nous analyserons.

Ce mémoire se présente donc de la façon suivante :

Partie I : " Minimisation suivant une recherche linéaire exacte unidimensionnelle "
[1], [3], [4], [5], [6], [7], [8].

Partie II : " Minimisation suivant une recherche linéaire non exacte "
[8], [9], [10], [11], [12]

Partie III : " Minimisation sans recherche unidimensionnelle "
[13], [14].

Nous avons en outre, complété les démonstrations afin de vérifier l'exactitude des formules.

Partie I

Minimisation d'une f^t suivant une recherche linéaire exacte

[1], [3], [4], [5], [6], [7], [8].

Chapitre 1.

Approche de la minimisation d'une fonction par des algorithmes convergeant quadratiquement.

Huang.

Approche de la minimisation d'une fonction par des alg. convergeant quadratiquement

I Introduction

Nous décrirons la méthode de Huang qui nous permettra de construire des algorithmes convergeant quadratiquement. Les algorithmes possédant la propriété de descente permettront de minimiser une fonction.
De cette méthode nous tirerons un alg. généralisé et nous montrerons que les alg. gradient-conjugués et variables-métriques peuvent être déduits comme cas particuliers.
Nous verrons des exemples et nous verrons aussi des alg. simplifiés
Enfin nous discuterons l'emploi de ces alg. pour des fonctions quadratiques et non quadratiques.
Nous considérons une fonction à plusieurs variables.

Nous demandons que les alg. possèdent les propriétés suivantes :
. ils emploient uniquement la recherche uni-dimensionnelle
. le pt. minimal (f une fonction quadratique) est atteint en un nb. d'itérations au plus égal au nb de variables.
Cette propriété a une importance considérable car même une f° non quadratique se comporte d'une façon approximativement quadratique au voisinage du pt minimal. Cela assure une convergence

8

rapide dans l'étape finale des calculs.
Ils emploient uniquement la fonction et son gradient
(les alg. sont donc du 1er ordre)
Ils tiennent uniquement compte de l'information à l'étape immédiatement précédente.
(prop. importante car elle permet de réduire le contenu en mémoire lorsqu'on considère un grand nb de variables).

Parmi les alg. satisfaisant ces propriétés nommons
- les alg. gradient conjugués
- les alg. variables métriques.

méthode de Huang. ?

Considérons la fonction quadratique suivante :

$$f(x) = a + b^T x + \frac{1}{2} x^T c x$$

où a, b, c sont des constantes
$f(x)$ et a sont des scalaires
b est un vecteur $(n \times 1)$
c est une matrice $(n \times n)$ définie positive (pour que f ait un min. relatif).

$g(x) = b + cx$ est le gradient de $f(x)$
c'est un ~~seul~~ vecteur de dimension n.

h = un point tq $g(h) = b + ch = 0$. C'est un point minimal.

Soit x_i un pt. à l'itération i
x_{i+1} le pt. à l'itération suivante
On considère un algorithme faisant passer de x_i à

x_{i+1} au moyen du pas Δx_i
La suite de points est engendrée par la formule de récurrence suivante :

$$x_{i+1} = x_i + \Delta x_i$$

En général on écrit :

$$\Delta x_i = - \alpha_i p_i$$

$$\Rightarrow x_{i+1} = x_i - \alpha_i p_i$$

où α_i est un scalaire qui mesure la grandeur du pas
p_i est un vecteur $n \times 1$ qui exprime la direction de recherche

$$f(x_{i+1}) = f(x_i - \alpha_i p_i)$$

Sous cette forme, f dépend de α_i et de p_i. Or, comme on demande une recherche unidimensionnelle il faut éliminer un paramètre. On se donne p_i
Cette fonction a la propriété de descente c'est à dire

$$f(x_{i+1}) < f(x_i)$$

(compléments d'information : v. appendice I)

L'alg. possède la propriété de descente aussi longtemps que

$$\boxed{g_i^t p_i \neq 0}$$

(c'est à dire que g_i et p_i ne sont pas orthogonaux)
(v. appendice I)

C'est donc la condition de non orthogonalité.
On demande aussi là que l'alg. ~~possède~~ converge quadratiquement. Il faut donc une condition supplémentaire à savoir la condition de conjugaison :

$$\boxed{p_i^t C p_j = 0} \quad \forall n-1 \geq i > j \geq 0$$

(v. appendice II)

Donc, un alg. complet ayant la propriété de descente et la propriété de convergence quadratique sera engendré par les équations suivantes :

$$\left\{\begin{array}{l} x_{i+1} = x_i + \Delta x_i \\ \Delta x_i = -\alpha_i p_i \\ \dfrac{d f(x_i - \alpha_i p_i)}{d \alpha_i} = 0 \end{array}\right.$$

avec p_i (direction de recherche) satisfaisant :

$$\left\{\begin{array}{lll} g_i^t p_i \neq 0 & \text{CNO.} & \\ p_i^t C p_j = 0 & \text{c. conj.} & m-1 \geq i > j > 0 \end{array}\right.$$

Remarque : Pour $m = n$, la condition de conjugaison donne un système de $n(n-1)/2$ équations scalaires où les inconnues sont les vecteurs $p_0, \dots p_{n-1}$. Chaque vecteur ayant n composantes scalaires on a donc n^2 inconnues scalaires et le nb de d° de ~~d~~ liberté ($\neq$ entre le nb d'inconnues et le nb d'éq.) est $\dfrac{n(n+1)}{2}$

$\rightarrow$ pr $m = n$ le système $p_i^t C p_j = 0$ admet une ∞^{4} de solutions.

Construction d'algorithmes

Méthode générale

Un algorithme ayant les propriétés a, b, c, d, peut être engendré de la manière suivante

1°) choisir une matrice initiale H_0 tq $A = \frac{1}{2}(H_0 + H_0^+)$ soit définie positive ou définie négative

2°) Avoir une matrice H_i satisfaisant la relation

$$H_i = H_{i-1} + \rho \frac{\Delta x_{i-1}(c_1 \Delta x_{i-1} + c_2 H_{i-1}^+ \Delta g_{i-1})^+}{(c_1 \Delta x_{i-1} + c_2 H_{i-1}^+ \Delta g_{i-1})^+ \Delta g_{i-1}} - \frac{H_{i-1} \Delta g_{i-1}(K_1 \Delta x_{i-1} + K_2 H_{i-1}^+ \Delta g_{i-1})^+}{(K_1 \Delta x_{i-1} + K_2 H_{i-1}^+ \Delta g_{i-1})^+ \Delta g_{i-1}}$$

où ρ, c_1, c_2, K_1, K_2 sont des nbs réels choisis arbitrairement moyennant la seule restriction que K_1 et K_2 ne doivent pas disparaître en même temps.

3°) engendrer la suite des pts x_i en employant les relations :

$p_i = H_i^+ g_i$; $\Delta x_i = -\alpha_i p_i$, $x_{i+1} = x_i + \Delta x_i$

α_i doit être déterminé par une recherche uni-dimensionnelle suivant la direction p_i et doit être tq $f(x_{i+1})$ ait la valeur minimale parmi tous les points qui appartiennent à la famille uni-paramétrique $p_i = H_i^+ g_i$

(Explication de la manière dont on a trouvé H_i : appendice III)

Exemples d'algorithmes.

En général $\exists$ trois classes d'alg. suivant que ρ est > 0, $= 0$ ou < 0.

partir de l'ég $H_i c p_j = \rho p_j \quad i-1 \geq j \geq 0$ et si $i = n$
on voit que $H_n c p_j = \rho p_j \quad n-1 \geq j \geq 0$
puisque les directions de recherche p_j sont lin. indep.
et forment une base complète dans l'espace à n dimensions
cette équation demande que $H_n c = \rho I$
la matrice H à la fin des n itérations est
donnée par : $H_n = \rho c^{-1}$

Si $\begin{cases} \rho > 0 & \rightarrow H_n \text{ est définie positive} \\ \rho = 0 & \rightarrow H_n \text{ est nulle} \\ \rho < 0 & \rightarrow H_n \text{ est définie négative.} \end{cases}$

(résultats indépendants de H_0, c_1, c_2, k_1, k_2).

1er cas : $\rho = 1$.

Alg. I (Fletcher - Powell - Davidon).
$c_1 = 1 \quad , \quad c_2 = 0 \quad , \quad k_1 = 0 \quad , \quad k_2 = 1$
Propriété : si H_0 est symétrique, toutes les mat. H_i le sont.

Alg II (Mc. Cormick)
$c_1 = 1 \quad , \quad c_2 = 0 \quad , \quad k_1 = 1 \quad , \quad k_2 = 0$

Alg III (Pearson)
$c_1 = 0 \quad , \quad c_2 = 1 \quad , \quad k_1 = 0 \quad , \quad k_2 = 1$

Alg IV
$c_1 = 1 \quad , \quad c_2 = -1 \quad , \quad k_1 = 1 \quad , \quad k_2 = -1$
Propriété : si H_0 symétrique → toutes les mat. H_i le sont

2ème cas : $\rho = 0$

Alg. V :

$K_1 = 0$ et $K_2 = 1$.

Propriété : Si H_0 est symétrique → t. les mat. H_i le sont.

Alg VI

$K_1 = 1$ et $K_2 = 0$.

Alg VII

$K_1 = 1$ et $K_2 = -1$

3ème cas : $\rho = -1$

Il suffit de remplacer $\rho = 1$ par $\rho = -1$ dans l'éq. gén.
Ils peuvent être obtenus à partir des alg. I → IV

Algorithmes simplifiés

On peut écrire la direction de recherche p_i sous la forme (v. appendice IV)

$$p_i = \beta_i q_i$$

où β_i = scalaire défini par : $1 - K_2 \dfrac{(\Delta g_{i-1}^t H_{i-1}^t g_i)}{(z_{i-1}^+ \Delta g_{i-1})}$

et $$q_i = \left[I - \frac{\Delta x_{i-1} \Delta g_{i-1}^+}{\Delta x_{i-1}^t \Delta g_{i-1}} \right] H_{i-1}^+ g_i$$

En posant $\beta_0 = 1$ on a : $q_0 = H_0^+ g_0$

~~condition~~ $\cancel{q_0}$ ε

...ar récurrence on arrive à la relation suivante :

$$g_i = \left[I - \sum_{r=0}^{i-1} \frac{\Delta x_r \, \Delta g_r^{+}}{\Delta x_r^{+} \, \Delta g_r} \right] H_0^{+} g_i$$

...es expressions de g_0 et g_i peuvent être réécrites sous la forme :

$$p_0 = H_0^{+} g_0$$

et
$$p_i = \left[H_0 - \sum_{r=0}^{i-1} \frac{H_0 \, \Delta g_r \, \Delta x_r^{+}}{\Delta x_r^{+} \, \Delta g_r} \right]^{+} g_i$$

<u>Algorithme VII</u>

L'alg. représenté par ces équations est caractérisé par la valeur de H suivante :

$$H_i = H_{i-1} - \frac{H_0 \, \Delta g_{i-1} \, \Delta x_{i-1}^{+}}{\Delta x_{i-1}^{+} \, \Delta g_{i-1}}$$

<u>Propriété</u> : $H_n =$ matrice nulle.

Si on prend une <u>matrice initiale symétrique</u>, on va arriver des simplifications qui vont se faire. notamment : par le fait que

$$g_i^{+} p_j = 0 \quad \text{et} \quad g_j^{+} H_0^{+} g_i = 0 \qquad i-1 \geq j \geq 0$$

(explication appendice V)

A ce moment la direction de recherche p_i devient :

$$\left\{ p_i = H_0 g_i + \frac{g_i^{+} H_0 g_i}{p_{i-1}^{+} g_{i-1}} p_{i-1} \right.$$

=> Algorithme IX (Généralisation de Fletcher-Reeves)

représenté par :

$$p_0 = H_0^+ g_0$$

$$p_i = H_0 g_i + \frac{g_i^+ H_0 g_i}{p_{i-1}^+ g_{i-1}} p_{i-1} .$$

et caractérisé par

$$H_i = H_0 + \frac{H_0 g_i p_{i-1}^+}{p_{i-1}^+ g_{i-1}}$$

Propriété : $H_n = H_0$

Matrice initiale identité

$$H_0 = I$$

$$\begin{cases} p_0 = g_0 \\ p_i = g_i + \dfrac{g_i^+ g_i}{g_{i-1}^+ g_{i-1}} p_{i-1} \end{cases}$$

> Algorithme X

représenté par ces équations et caractérisé par :

$$H_i = I + \frac{g_i p_{i-1}^+}{g_{i-1}^+ g_{i-1}}$$

Propriété : $H_n = I$.

Application de ces algorithmes

Aux fonctions quadratiques

Pour appliquer les alg. I – X à la minimisation d'une fonction quadratique, il faut les conditions suivantes

1) Condition de départ
. Pr les alg de I — VIII toute matrice H_0 qui ~~satisfait~~ tq $A = \frac{1}{2}(H_0 + H_0^+)$ se soit définie positive ou négative peut être employée.
. Pour l'alg. IX, H_0 doit être symétrique.

2) Condition d'arrêt
Puisque la condition : $g(x) = 0$ doit être atteinte à chaque itération, les alg. sont arrêtés quand

$g_i^+ g_i \leq \varepsilon_1$ avec ε_1 = petit nb donné qui définit la précision demandée

ou quand $i = n$

3°) Demande d'une précision
En pratique la réalisation de la conv. quad. sur un ordinateur demande qu'une haute précision arithmétique soit atteinte. La recherche est arrêtée quand l'inégalité

$|g_{i+1}^+ p_i| \leq \varepsilon_2$ avec ε_2 un petit nb donné.

Conclusions ~~Remarques~~ : 1) L'alg X demande le moins de calculs et serait favorable pour la min. d'une fonction quadratique

2) Si une grande précision arithmétique et une grande précision dans la recherche sont employées, tous les alg. se comportent identiquement. Ils conduisent tous au pt minimal en n itérations au plus.

) <u>Aux fonctions non quadratiques.</u>

1°/ <u>Condition de départ</u> : mê condition que pr les fonct. quad.

2°/ <u>Condition de redépart</u> :
En général, le point minimal d'une fonction non quadratique n'est pas atteint en n itérations, il en faut plus. Cela étant, on peut redémarrer l'alg. en posant :

$$H_i = H_0$$

Il y a 2 conditions où on fait repartir l'alg. :
1) quand l'inégalité $|g_i^T p_i| \leq \varepsilon_2$ est satisfaite mais la cond. d'arrêt : $g_i^T g_i \leq \varepsilon_1$ ne l'est pas

2) au $n^{ième}$ ou $(n+1)^{ième}$ point, compté à partir du départ précédent ou du point de redépart.

3°/ <u>Condition d'arrêt</u>.
- mê cond. que pr une fn quadratique c.à.d. $g_i^T g_i \leq \varepsilon_1$. Mais dans le cas d'une fonction non quad. c'est peut être un pt stationnaire non minimal.
La probabilité d'un tel événement est minime quand ε_1 est très petit.

4°/ Demande de précision.

Elle est la même que p. les fonct. quad. Ça conduit à la conv. rapide dans le voisinage du p. minimal.

Parfois la satisfaction de cette inégalité demande des calculs considérables. Pr éviter cela, la recherche est aussi arrêtée quand

$$|\Delta\alpha_i| \leq \varepsilon_3 |\alpha_i|$$

avec α_i = la grandeur du pas

$\Delta\alpha_i$: la correction de la valeur

ε_3 = un petit nb. donné.

Discussion et conclusions

Ces alg. ont une valeur particulière quand la constante ε_1 est très petite, quand une grande précision est demandée sur la localisation du point minimal. Si ce n'est pas le cas, l'avantage de ces alg. sur la méthode du gradient simple peut cesser d'exister.

Conclusions.

Nous avons décrit une méthode afin de construire des algorithmes qui permettront de minimiser une fonction de plusieurs variables

Nous avons décrit un alg. général et montré qu'il pouvait en engendrer d'autres selon le choix des constantes.

L'application de ces alg. aux fonctions quadratiques et non quadratiques a été présentée.

On peut en tirer les renseignements suivants :

1°) pour une fonction quadratique les propriétés suivantes sont observées

a) pr un pt. initial donné x_0 et une matrice initiale H_0 symétrique ou non, les alg. I → VIII engendrent la même suite de pts. x_i

b) pr un pt. initial donné x_0 et une matrice $H_0 = I$, les alg I → X engendrent la même suite de pts. x_i

c) les alg I → X atteignent le point minimal en n itérations.

2°) pour une fonction non quadratique : on observe :

a) les alg I → X convergent rapidement dans le voisinage du pt. minimal.

b) les conditions de redépart jouent un rôle important dans la détermination du nb. d'itérations nécessaire à la convergence.

Appendice I

Algorithme avec la propriété de descente.

Soit le pt x_i à l'itération i
x_{i+1} à l'itération suivante.
On considère un alg. faisant passer de x_i à x_{i+1}
au moyen du pas Δx_i.
La suite des pts est engendrée par la formule
de récurrence suivante :

$$x_{i+1} = x_i + \Delta x_i$$

En général, on écrit : $\Delta x_i = - \alpha_i \underline{p_i}$
"vecteur n compos
α_i = scalaire qui est la grandeur du pas
qui exprime la direction de recherche.

$\Rightarrow$

$$x_{i+1} = x_i - \alpha_i p_i$$

et

$$f(x_{i+1}) = f(x_i - \alpha_i p_i)$$

$\rightarrow$ on voit que $f(x_{i+1})$ dépend de α_i et p_i $\rightarrow$
de 2 paramètres, donc il faut en éliminer un, on se donne p_i
Le minimum de $f(x_{i+1})$ suivant la direction de recherche p_i sera atteint quand

$$\frac{d f(x_{i+1})}{d \alpha_i} = 0$$

càd quand $\underbrace{g_{i+1}^{T} p_i = 0}$ (g_{i+1} = gradient $g(x_{i+1})$)

détermine la grandeur optimale du pas
α_i pour une direction de recherche p_i

$g(x) = b + cx \rightarrow g_{i+1} = g_i + c\Delta x_i$

En effet :

$$\begin{aligned} g(x_{i+1}) &= b + c x_{i+1} \\ g(x_i) &= b + c x_i \end{aligned}$$

$$g(x_{i+1}) - g(x_i) = c\,\underbrace{(x_{i+1} - x_i)}_{\Delta x_i}$$

$$\Rightarrow g_{i+1} = g_i + c\Delta x_i$$

En combinant $\begin{cases} \Delta x_i = -\alpha_i p_i \\ g_{i+1}^t p_i = 0 \\ g_{i+1} = g_i + c\Delta x_i \end{cases}$

$$\Rightarrow g_{i+1}^t p_i = g_i^t p_i + (\Delta x_i)^t c\, p_i$$

$$g_{i+1}^t p_i = g_i^t p_i - \alpha_i p_i^t c\, p_i = 0$$

$$\Rightarrow g_i^t p_i = \alpha_i p_i^t c\, p_i \Rightarrow \boxed{\alpha_i = \frac{g_i^t p_i}{p_i^t c\, p_i}}$$

$$f(x) = a + b^t x + \frac{1}{2} x^t c x$$

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + g_i^t \Delta x_i + \frac{1}{2} \Delta x_i^t c \Delta x_i$$

En effet :

$$\begin{aligned} f(x_{i+1}) &= a + b^t x_{i+1} + \frac{1}{2} x_{i+1}^t c\, x_{i+1} \\ f(x_i) &= a + b^t x_i + \frac{1}{2} x_i^t c\, x_i \end{aligned}$$

$$f(x_{i+1}) - f(x_i) = b^t x_{i+1} - b^t x_i + \frac{1}{2} x_{i+1}^t c x_{i+1} - \frac{1}{2} x_i^t c x_i$$

$b^t (x_{i+1} - x_i) + \frac{1}{2} (x_{i+1}^t c x_{i+1} - x_i^t c x_i)$

$x_{i+1}^t c x_{i+1} = (x_i^t + \Delta x_i^t) c x_{i+1} = x_i^t c x_{i+1} + \Delta x_i^t c x_{i+1}$

$x_i^t c (x_i + \Delta x_i) + \Delta x_i^t c (x_i + \Delta x_i) = x_i^t c x_i +$
$x_i^t c \Delta x_i + \Delta x_i^t c x_i + \Delta x_i^t c \Delta x_i$

$\to f(x_{i+1}) - f(x_i) = b^t \Delta x_i + \frac{1}{2} (x_i^t c x_i + x_i^t c \Delta x_i +$
$\Delta x_i^t c x_i + \Delta x_i^t c \Delta x_i - x_i^t c x_i)$

$$= b^t \Delta x_i + \frac{1}{2} x_i^t c \Delta x_i + \underbrace{\frac{1}{2} \Delta x_i^t c x_i}_{\frac{1}{2} x_i^t c \Delta x_i} + \frac{1}{2} \Delta x_i^t c \Delta x_i$$

$$= (b^t + x_i^t c) \Delta x_i + \frac{1}{2} \Delta x_i^t c \Delta x_i$$

$$= g_i^t \Delta x_i + \frac{1}{2} \Delta x_i^t c \Delta x_i \quad \text{cqfd.}$$

à partir de $\left\{ \begin{array}{l} \Delta x_i = - \alpha_i p_i \\ \alpha_i = g_i^t p_i / p_i^t c p_i \\ f(x_{i+1}) - f(x_i) = b^t \Delta x_i + \frac{1}{2} \Delta x_i^t c \Delta x_i \end{array} \right.$

$$\to f(x_{i+1}) - f(x_i) = - \alpha_i b^t p_i + \frac{1}{2} \alpha_i^2 p_i^t c p_i$$

$$= - \frac{g_i^t p_i}{p_i^t c p_i} b^t p_i + \frac{1}{2} \frac{(g_i^t p_i)^2}{(p_i^t c p_i)^2} p_i^t c p_i$$

$$= - \frac{(g_i^t p_i)^2}{p_i^t c p_i} + \frac{1}{2} \frac{(g_i^t p_i)^2}{p_i^t c p_i} = - \frac{(g_i^t p_i)^2}{2 p_i^t c p_i}$$

$$f(x_{i+1}) - f(x_i) = - (g_i^t p_i)^2 / 2 p_i^t c p_i$$

Puisque c = mat. définie positive, le dénominateur est > 0 donc la différence est négative, l'algorithme a la propriété de descente :

$$f(x_{i+1}) < f(x_i).$$

et cela aussi longtemps que $g_i^T p_i \neq 0$ c.à.d que p_i et g_i ne sont pas orthogonaux.

$\Rightarrow$ $g_i^T p_i \neq 0$ = condition de non orthogonalité

$\alpha_i = g_i^T p_i / p_i^T c p_i \Rightarrow \alpha_i$ et $g_i^T p_i$ ont même signe

En comparant $g_{i}^T p_{i-1} = 0$

avec $g_i^T p_i \neq 0$

on voit que p_i ne peut être parallèle à la direction de recherche p_{i-1}

si chaque vecteur satisfaisant la condition de non orthogonalité est employé comme direction de recherche les éq :

$$\begin{cases} x_{i+1} = x_i + \Delta x_i \\ \Delta x_i = -\alpha_i p_i \\ \partial f(x_i - \alpha_i p_i) / \partial \alpha_i = 0 \end{cases}$$

constituent un alg. complet ayant la propriété de descente pour la fonction $f(x)$.

Appendice II

Algorithme avec la convergence quadratique

On suppose la condition de non orthogonalité $g_i^T p_i \neq 0$ dans la direction de recherche p_i.
Le gradient g_h au point x_h et le gradient g_j au point x_j sont reliés par

$$g_h - g_j = \sum_{i=j}^{h-1} \alpha_i \, c \, p_i \qquad h-1 \geq j \geq 0$$

$$g_h^T - g_j^T = -\sum_{i=j}^{h-1} \alpha_i \, p_i^T c$$

$$j) \rightarrow \quad g_h^T p_j - g_j^T p_j = -\sum_{i=j}^{h-1} \alpha_i \, p_i^T c \, p_i$$

$$\alpha_j = g_j^T p_j / p_j^T c \, p_j \rightarrow g_j^T p_j = \alpha_i \, p_j^T c \, p_j$$

$$g_h^T p_j = -\sum_{i=j+1}^{h-1} \alpha_i \, p_i^T c \, p_j \qquad h-2 \geq j \geq 0$$

Supposons que la direction de recherche p_i est conjuguée à toutes les directions de recherche précédentes p_j par rapport à la matrice c.
Supposons que la condition de conjugaison suivante est satisfaite :

$$p_i^T c \, p_j = 0 \qquad h-1 \geq i > j \geq 0$$

= cond. de conjugaison

Sous ces conditions

$$g_h^T p_j = -\sum_{j+1=i}^{h-1} \alpha_i \, p_i^T c \, p_i \qquad h-2 \geq j \geq 0$$

$$\rightarrow g_h^T p_j = 0 \qquad h-2 \geq j \geq 0$$

... x_{k-1}, l'optimisation de la grandeur du pas demande que

$$g_k^T p_{k-1} = 0$$

$$\left.\begin{array}{ll} g_k^T p_j = 0 & k-2 \geq j \geq 0 \\ g_k^T p_{k-1} = 0 & \end{array}\right\} \Rightarrow \begin{array}{l} g_k^T p_j = 0 \\ k-1 \geq j \geq 0 \end{array}$$

Si $k = n \Rightarrow g_n^T p_j = 0 \quad n-1 \geq j \geq 0$.

On sait par l'algèbre linéaire qu'une suite de n directions non nulles $p_0, p_1, \ldots p_{n-1}$ peut être engendrée de cette sorte et que ces directions sont linéairement indépendantes et forment une base complète dans l'espace à n dimensions donc le seul vecteur g_n qui satisfasse $g_n^T p_j = 0$ est le vecteur nul donc le point minimal est atteint après n itérations au plus.

Appendice III

Comment a-t-on engendré la matrice H ?

1°) Direction de recherche p_i:

p_i au point x_i doit être choisie telle qu'elle satisfasse la condition de conjugaison $p_i^T c\, p_j = 0$
$i-1 \geq j \geq 0$

Si toutes les directions p_i précédentes sont choisies telles que cette relation soit vérifiée le gradient g_i au point x_i a la propriété :

$g_i^T p_j = 0 \qquad i-1 \geq j \geq 0$

Si on exprime p_i sous la forme $p_i = H_i^T g_i$ avec H_i une matrice $n \times n$

on aura :

$p_i^T c\, p_j = 0 \Rightarrow g_i^T H_i\, c\, p_j = 0$

En comparant

$g_i^T p_j = 0$ et $g_i^T H_i\, c\, p_j = 0$ on voit que $g_i^T H_i\, c\, p_j = 0$ peut être satisfaite si H_i est choisie telle que

$$H_i\, c\, p_j = \rho\, p_j \qquad i-1 \geq j \geq 0$$

avec ρ = constante arbitraire

$\Rightarrow$ la condition de conjugaison sera satisfaite si H_i a la propriété : $H_i\, c\, p_j = \rho\, p_j$.

Puisque $p_i = H_i^T g_i$ on peut raisonner directement sur matrice H_i dans l'équation $H_i\, c\, p_j = \rho\, p_j$

La matrice -H-

$H_i\, c\, p_j = \rho\, p_j$ à l'itération précédente $\rightarrow$

$H_{i-1}\, c\, p_j = \rho\, p_j \quad i-2 \geq j \geq 0$

On sépare la condition $H_i\, c\, p_j = \rho\, p_j \quad i-1 \geq j \geq 0$ en 2 groupes:

$$\begin{cases} H_i\, c\, p_j = \rho\, p_j & i-2 \geq j \geq 0 \\ H_i\, c\, p_{i-1} = \rho\, p_{i-1} & \end{cases}$$

$$H_i\, c\, p_j = \rho\, p_j$$
$$H_{i-1}\, c\, p_j = \rho\, p_j$$

$(H_i - H_{i-1})\, c\, p_j = 0 \qquad i-2 \geq j \geq 0$

Si la matrice H_i est tq $H_i = H_{i-1} + \Delta H_{i-1}$

on voit que la condition : $H_i\, c\, p_j = \rho\, p_j \quad i-2 \geq j \geq 0$ peut être satisfaite si ΔH_{i-1} a la propriété suivante :

$$* \quad \Delta H_{i-1}\, c\, p_j = 0 \qquad i-2 \geq j \geq 0$$

(ΔH_{i-1} = matrice $n \times n$ = matrice différence).

De plus, en regardant $H_i = H_{i-1} + \Delta H_{i-1}$ la condition $H_i\, c\, p_{i-1} = \rho\, p_{i-1}$ est satisfaite si ΔH_{i-1} a la propriété :

$$** \quad \Delta H_{i-1}\, c\, p_{i-1} = \rho\, p_{i-1} - H_{i-1}\, c\, p_{i-1}$$

dans le but d'éliminer la matrice c des équations * et ** on procède comme suit :

$$\Delta H_{i-1}\, c\, p_j = 0 \qquad \times \alpha_j$$
$$\Delta H_{i-1}\, c\, p_{i-1} = \rho\, p_{i-1} - H_{i-1}\, c\, p_{i-1} \qquad \times \alpha_{i-1}$$

$$\begin{cases} \Delta H_{i-1}\, \alpha_j\, c\, p_j = 0 \\ \Delta H_{i-1}\, \alpha_{i-1}\, c\, p_{i-1} = \rho\, \alpha_{i-1}\, p_{i-1} - H_{i-1}\, \alpha_{i-1}\, c\, p_{i-1} \end{cases}$$

$\Delta x_i = -\alpha_i\, p_i \qquad g_{i+1} = g_i + c\, \Delta x_i$

$$\begin{cases} \Delta H_{i-1}\, C\, \Delta x_j = 0 \\ \Delta H_{i-1}\, C\, \Delta x_{i-1} = P\, \Delta x_{i-1} - H_{i-1}\, C\, \Delta x_{i-1} \end{cases}$$

$$\begin{cases} \Delta H_{i-1}\, \Delta g_j = 0 \qquad i-2 \geq j \geq 0 \\ \Delta H_{i-1}\, \Delta g_{i-1} = P\, \Delta x_{i-1} - H_{i-1}\, \Delta g_{i-1} \end{cases}$$

On satisfait la condition

$$\Delta H_{i-1}\, \Delta g_{i-1} = P\, \Delta x_{i-1} - H_{i-1}\, \Delta g_{i-1}$$

H_{i-1} peut avoir la forme :

$$\Delta H_{i-1} = P\, \frac{\Delta x_{i-1}\, y_{i-1}^T}{y_{i-1}^T\, \Delta g_{i-1}} - \frac{H_{i-1}\, \Delta g_{i-1}\, z_{i-1}^T}{z_{i-1}^T\, \Delta g_{i-1}}$$

où y_{i-1} et z_{i-1} sont des vecteurs $n \times 1$ à désigner.

ΔH_{i-1} satisfait : $\Delta H_{i-1}\, \Delta g_j = 0 \quad i-2 \geq j \geq 0$

si y_{i-1} et z_{i-1} ont les propriétés particulières :

$$y_{i-1}^T\, \Delta g_j = 0 \qquad z_{i-1}^T\, \Delta g_j = 0 \qquad i-2 \geq j \geq 0$$

$\Rightarrow$ si chaque vecteur y_{i-1}, z_{i-1} satisfaisant à cela sont employés, l'équation :

$$\Delta H_{i-1} = P\, \frac{\Delta x_{i-1}\, y_{i-1}^T}{y_{i-1}^T\, \Delta g_{i-1}} - \frac{H_{i-1}\, \Delta g_{i-1}\, z_{i-1}^T}{z_{i-1}^T\, \Delta g_{i-1}}$$

donne ΔH_{i-1} et l'équation $H_i = H_{i-1} + \Delta H_{i-1}$ donne H_i qui lui qu'on disait ~~avoir~~ avoir la propriété dj, ns essayons de trouver les vecteurs y_{i-1} et z_{i-1} ~~en~~ employant uniquement l'information au p. présent et au point le précédant immédiatement

1) Nous observons que la cond. $p_i^T C p_j = 0$ à l'itération précédente est :

$$p_{i-1}^T C p_j = 0 \qquad i-2 \geq j \geq 0$$

$$\left.\begin{array}{l} \Delta x_i = -\alpha_i p_i \\ q_{i+1} = q_i + C\Delta x_i \end{array}\right\} \Rightarrow p_{i-1}^T C p_j = 0 \quad \text{peut s'écrire}$$

comme suit : $\Delta x_{i-1}^T \Delta q_j = 0 \qquad i-2 \geq j \geq 0$

2°) A partir de $q_i^T p_j = 0$ et de cette relation à l'itération précédente on obtient : $\Delta q_{i-1}^T p_j = 0$
$i-2 \geq j \geq 0$

A cause de $H_{i-1} C p_j = \rho p_j \qquad i-2 \geq j \geq 0$
l'équation

$$\Delta q_{i-1}^T p_j = 0 \Rightarrow \Delta q_{i-1}^T H_{i-1} C p_j = 0$$

qui à partir de

$$\left\{\begin{array}{l} \Delta x_i = -\alpha_i p_i \\ q_{i+1} = q_i + C\Delta x_i \end{array}\right.$$

peut s'écrire comme $\Delta q_{i-1}^T H_{i-1} \Delta q_j = 0 \qquad i-2 \geq j \geq 0$
En comparant :

$$\Delta x_{i-1}^T \Delta q_j = 0$$

$$\Delta q_{i-1}^T H_{i-1} \Delta q_j = 0 \qquad \text{et} \quad y_{i-1}^T \Delta q_j = 0 \ \text{et} \ z_{i-1}^T \Delta q_j = 0$$

on voit que y_{i-1} et z_{i-1} peuvent être choisis comme Δx_{i-1} ou $H_{i-1}^T \Delta q_{i-1}$ ou une combinaison linéaire des 2.
En général on écrit :

$$\left\{\begin{array}{l} y_{i-1} = c_1 \Delta x_{i-1} + c_2 H_{i-1}^T \Delta q_{i-1} \\ z_{i-1} = k_1 \Delta x_{i-1} + k_2 H_{i-1}^T \Delta q_{i-1} \end{array}\right.$$

où c_1, c_2, k_1, k_2 sont des ~~constante~~ arbitraires
coefficients scalaires

Conclusion : la condition de conjugaison $p_i^t C p_j = 0$
$i-1 \geq j \geq 0$
est satisfaite si la matrice H est telle que :

$$\left\{\begin{array}{l} H_i = H_{i-1} + \Delta H_{i-1} \\[2mm] \Delta H_{i-1} = \rho \dfrac{\Delta x_{i-1}\, y_{i-1}^t}{y_{i-1}^t\, \Delta g_{i-1}} - \dfrac{H_{i-1}\, \Delta g_{i-1}\, z_{i-1}^t}{z_{i-1}^t\, \Delta g_{i-1}} \\[2mm] \left\{\begin{array}{l} y_{i-1} = c_1 \Delta x_{i-1} + c_2 H_{i-1}^t \Delta g_{i-1} \\ z_{i-1} = k_1 \Delta x_{i-1} + k_2 H_{i-1}^t \Delta g_{i-1} \end{array}\right. \end{array}\right.$$

Par des choix différents des constantes dans ΔH_{i-1} des algorithmes différents peuvent être engendrés.

) Matrice H initiale

En tenant compte des formules * la direction de recherche $p_i = H_i^t g_i$ peut s'écrire de la manière suivante :

$$p_i = \beta_i\, g_i$$

avec β_i un scalaire défini par :

$$\beta_i = 1 - k_2 \left(\Delta g_{i-1}^t\, H_{i-1}^t\, g_i\right) / \left(z_{i-1}^t\, \Delta g_{i-1}\right)$$

g_i = vecteur $n \times 1$ défini par :

$$g_i = \left[I - \frac{\Delta x_{i-1}\, \Delta g_{i-1}^t}{\Delta x_{i-1}^t\, \Delta g_{i-1}} \right] H_{i-1}^t\, g_i$$

g_i est indépt. des constantes ρ.

L'équation $p_i = \beta_i q_i$ établit que les directions de recherche p_i engendrées par des choix différents de ρ, c_1, c_2, K_1, K_2 sont parallèles l'une à l'autre si la matrice H_{i-1} employée au point x_{i-1} est la même. Sous ces observations q_i peut être considéré comme la direction de recherche pour tous les algorithmes.
A ce moment, le déplacement Δx_i peut être représenté par $\Delta x_i = -\gamma_i q_i$ où $\gamma_i = \alpha_i \beta_i$

A partir de :

$$\begin{cases} \alpha_i = q_i^T p_i / p_i^T C p_i \\ p_i = \beta_i q_i \end{cases}$$

la grandeur optimale du pas suivant la direction q_i est donnée par

$$\gamma_i = q_i^T q_i / q_i^T C q_i$$

En effet :
$$\alpha_i = q_i^T \beta_i q_i / q_i^T \beta_i C \beta_i q_i$$
$$\begin{aligned} \gamma_i &= \alpha_i \beta_i \\ &= \beta_i q_i^T \beta_i q_i / q_i^T \beta_i C \beta_i q_i \\ &= q_i^T q_i / q_i^T C q_i \end{aligned}$$

γ_i est indépendant de $\rho, c_1, c_2, K_1, K_2 \rightarrow$ et le même pour tous les algorithmes

$p_i = \beta_i q_i \Rightarrow$ l'équation

$$f(x_{i+1}) - f(x_i) = -(q_i^T p_i)^2 / 2 p_i^T C p_i \quad \text{devient :}$$

$$f(x_{i+1}) - f(x_i) = -(q_i^T q_i)^2 / 2 q_i^T C q_i$$

La cond. de non orthogonalité $q_i^T p_i \neq 0$ est remplacée par :

$$q_i^T q_i \neq 0 \qquad n-1 \geq i \geq 0$$

Si on multiplie $g_i H_{i-1}^T g_i$ par g_i^T et qu'on considère que $g_i^T p_j = 0$ $\quad i-1 \geq j \geq 0$

$$\to g_i^T g_i = g_i^T H_{i-1}^T g_i$$

H_{i-1} peut être exprimée par des quantités appartenant à la $(i-2)^{ème}$ itération.
On écrit : $g_i^T g_i = g_i^T H_{i-1}^T g_i = g_i^T H_{i-2}^T g_i$
Et finalement par récurrence on écrit :

$$g_i^T g_i = g_i^T H_{i-1}^T g_i = g_i^T H_{i-2}^T g_i = \dots = g_i^T H_0^T g_i$$

La condition de non orthogonalité $g_i^T g_i \neq 0$
$n-1 \geq i \geq 0$

est satisfaite si $g_i^T H_0^T g_i \neq 0$ $\quad n-1 \geq i \geq 0$
Puisque les gradients aux différents points sont linéairement indépendants, la matrice initiale H_0 satisfaisant cette condition de non orthogonalité doit être telle que la matrice A définie par

$$A = \frac{1}{2} (H_0 + H_0^{+})$$

soit définie positive ou définie négative.
En particulier si H_0 est symétrique cette équation se réduit à $A = H_0$ signifiant que H_0 doit être positive ou définie négative.

Appendice IV

Unicité des directions de recherche

On a vu que la direction de recherche p_i peut s'écrire sous la forme

$p_i = \beta_i q_i$ où les expressions de q_i et β_i sont données à l'appendice III.

Pour étendre la validité de la relation $p_i = \beta_i q_i$ au cas où $i = 0$ posons que $\beta_0 = 1$

$\Rightarrow q_0 = H_0^T g_0$

On considère la suite des vecteurs q_i : $i = 0, \dots, n$ comme directions de recherche au lieu de p_i

Par ~~itérations successives~~ on récurrence on arrive à

$$q_i = \left[I - \sum_{r=i-2}^{i-1} \frac{\Delta x_r \, \Delta g_r^T}{\Delta x_r^T \, \Delta g_r} \right] H_{i-2}^T g_i$$

De même la matrice H_{i-2} de cette équation peut être remplacée par des quantités appartenant à la $(i-3)^{\text{ième}}$ itération et ainsi de suite

Finalement on arrive au résultat suivant :

$$q_i = \left[I - \sum_{r=0}^{i-1} \frac{\Delta x_r \, \Delta g_r^T}{\Delta x_r^T \, \Delta g_r} \right] H_0^T g_i$$

qui définit la direction de recherche q_i pour $i > 0$

les équations :
$$\begin{cases} q_0 = H_0^T g_0 \\ q_i = \left[I - \displaystyle\sum_{r=0}^{i-1} \frac{\Delta x_r \, \Delta g_r^T}{\Delta x_r^T \, \Delta g_r} \right] H_0^T g_i \end{cases}$$

déterminer la suite des directions de recherche q_i pour $i \geq 0$

Soit x_0 le pt. initial

H_0 la matrice initiale

Au point x_0, q_0 est donné par $q_0 = H_0^t g_0$ et est le même pour tous les algorithmes.

le déplacement Δx_0, le pt x_1, le gradient g_1 (et de là le gradient différence Δg_0) sont les mêmes pour tous les algorithmes

$\Rightarrow$

$$q_1 = \left[I - \frac{\Delta x_0 \, \Delta g_0^t}{\Delta x_0^t \, \Delta g_0} \right] H_0^t \, g_1$$

est la même pour tous les algorithmes.

$\Rightarrow$ Δx_1, x_2, g_2, Δg_2 sont les mêmes pour tous les alg.

En répétant le même raisonnement, on voit que la direction de recherche q_2 est la même pour tous les alg. et ainsi de suite

$\rightarrow$ Conclusion

Pour un point initial donné x_0 et une matrice initiale H_0 la suite des directions de recherche $q_0, q_1, \dots q_{n-1}$ et la suite des points $x_1, x_2, x_3 \dots x_n$ sont les mêmes pour tous les algorithmes et sont indépendants des constantes ρ, c_1, c_2, K_1, K_2

Appendice V

Comment arrive-t-on à la simplification de la direction de recherche p_i ?

- Si H_0 est symétrique, de nombreuses simplifications ont lieu.

$$\begin{cases} p_i = \left[H_0 - \sum_{r=0}^{i-1} \dfrac{H_0 \Delta g_r \Delta x_r^t}{\Delta x_r^t \Delta g_r} \right]^t g_i \\ \\ g_i^t p_j = 0 \qquad i-1 \geq j \geq 0 \\ \Rightarrow g_i^t H_0^t g_j - \sum_{r=0}^{j-1} \dfrac{(g_i^t \Delta x_r)(\Delta g_r^t H_0^t g_j)}{\Delta x_r^t \Delta g_r} = 0 \end{cases}$$

$$i-1 \geq j \geq 0$$

De même à cause de la relation :

$$g_i^t p_j = 0 \quad \text{on a :}$$

$$g_i^t \Delta x_r = 0 \qquad i-1 \geq r \geq 0$$

ce qui implique que $g_i^t H_0 g_j = 0 . \quad i-1 \geq j \geq 0$

Si la matrice initiale est symétrique $\rightarrow$

$$g_i^t H_0^t g_j = 0 \qquad i-1 \geq j \geq 0$$

En utilisant cela la direction de recherche se simplifie en

$$p_i = H_0 g_i + \frac{g_i^t H_0 g_i}{p_{i-1}^t g_{i-1}} p_{i-1}.$$

Chapitre 2.

- CNS pour le comportement identique des fonctions non quadratiques.
(DIXON).

- Techniques de Quasi Newton pour engendrer des points identiques par
(DIXON)

Introduction

Nous avons vu dans le 1er chapitre que Huang a établi une famille générale de métrique variable et a montré que pour une fonction quadratique convexe tous les membres de cette famille engendrent la même suite de points et convergent en au plus n pas. Huang et Levy ont publié des notes numériques montrant le comportement de cette famille pour des fonctions non quadratiques et ont conclu que cette famille pouvait être divisée en sous-cas qui engendre aussi une suite de points identiques pour des fonctions plus générales.

Dans un premier temps, nous démontrons une condition nécessaire et suffisante pour que toutes les suites de points engendrées par un groupe de formules appartenant à la famille de Huang et appliquées à la même fonction générale non-quadratique soient identiques.
Nous en tirerons les conclusions.

Dans un second temps, nous démontrerons trois théorèmes relatifs au comportement de la famille de Broyden des formules à métrique variable pour résoudre des problèmes de minimisation sans contraintes et nous en citerons un 4ème sans en faire la démonstration.
Nous montrerons en particulier que si la recherche linéaire est parfaite à chaque itération

alors la suite de points engendrée est indépendante du membre de la famille employé à chaque itération pourvu que la matrice demeure non singulière.

Rappel des formules utilisées dans le 1er chapitre.

$$H_i = H_{i-1} + \rho \frac{\Delta x_{i-1}(c_1 \Delta x_{i-1} + c_2 H_{i-1}^{T} \Delta g_{i-1})^{T}}{(c_1 \Delta x_{i-1} + c_2 H_{i-1}^{T} \Delta g_{i-1}) \Delta g_{i-1}} - \frac{H_{i-1} \Delta g_{i-1}(K_1 \Delta x_{i-1} + K_2 H_{i-1}^{T} \Delta g_{i-1})^{T}}{(K_1 \Delta x_{i-1} + K_2 H_{i-1}^{T} \Delta g_{i-1})^{T} \Delta g_{i-1}}$$

$$p_i = H_i^T g_i$$

$$x_{i+1} = x_i + \Delta x_i$$

$$\Delta x_i = - \alpha_i p_i$$

$$g_{i+1}^T p_i = 0$$

$$\Delta g_{i-1} = g_i - g_{i-1}$$

$$g_{i+1}^T \Delta x_i = g_{i+1}^T H_i^T g_i = 0$$

Pour une fonction non convexe ? l'équation $g_{i+1}^T p_i = 0$ ne définit pas une valeur unique de α_i
dans ce qui suit, cette condition sera renforcée par le fait qu'on supposera que α_i est défini uniquement
On peut établir deux manières de renforcer cette condition.
Soit $\alpha_i^{(j)}$ une suite de valeurs de α_i engendrant les points x_{i+1} de sorte que $g_{i+1}^T p_i = 0$ soit satisfait
Alors on pourrait choisir α_i d'une part comme la valeur de $\alpha_i^{(j)}$ donnant la plus

petite valeur de $f(x_i - \alpha_i^{(j)} p_i)$

ou d'autre part comme la valeur de $\alpha_i^{(j)}$ pour laquelle $|\alpha_i^{(j)}|$ est minimale et satisfait $f(x_i - \alpha_i^{(j)} p_i) < f(x_i)$

Comportement d'une fonction non quadratique

Théorème

"Si des suites de points x_i sont engendrées en employant les formules appartenant à la famille de Huang, (satisfaisant les conditions : $p_i = H_i^+ g_i$, $g_{i+1}^+ p_i = 0$, $x_{i+1} = x_i + \Delta x_i$, $\Delta x_i = -\alpha_i p_i$, $\alpha_i^{(j)}$ donnant la valeur minimale de $f(x_i - \alpha_i^{(j)} p_i)$), appliquées à la même fonction générale (non quadratique) alors, la CNS pour que toutes les suites soient identiques et que toutes les formules dans le groupe fournissent la même valeur de p_i

Démonstration

Introduisons les notations suivantes :

$A_{i-1} = \Delta g_{i-1}^+ H_{i-1}^+ g_i \qquad B_{i-1} = \Delta g_{i-1}^+ H_{i-1}^+ g_{i-1}$

telles que • $\Delta g_{i-1}^+ \Delta x_{i-1} = \Delta x_{i-1}^+ \Delta g_{i-1} = -\alpha_{i-1} p_{i-1}^+ \Delta g_{i-1}$

$$= -\alpha_{i-1} g_{i-1}^+ H_{i-1} \Delta g_{i-1} = -\alpha_{i-1} B_{i-1}^+ = -\alpha_{i-1} B_{i-1}$$

• $E_i = (c_1 \Delta x_i + c_2 H_i^+ \Delta g_i)^+ (\Delta g_i)$

$$= c_1 \Delta x_i^+ \Delta g_i + c_2 \Delta g_i^+ H_i \Delta g_i$$
$$= -\alpha_i c_1 B_i + c_2 g_{i+1}^+ H_i \Delta g_i - c_2 g_i^+ H_i \Delta g_i$$

(car $\Delta g_i = g_{i+1} - g_i$)

$$= -\alpha_i c_1 B_i + c_2 A_i^+ - c_2 B_i^+$$
$$= -\alpha_i c_1 B_i + c_2 A_i - c_2 B_i$$

• de même : $D_i = (K_1 \Delta x_i + K_2 H_i^t \Delta g_i)^t (\Delta g_i)$

$$= (-\alpha_i K_1 B_i + K_2 A_i - K_2 B_i)$$

Considérons la $i^{ème}$ ~~(itération)~~ direction.

$$H_i^t g_i = H_{i-1}^t g_i + \rho \frac{(C_1 \Delta x_{i-1} + C_2 H_{i-1}^t \Delta g_{i-1}) \Delta x_{i-1}^t g_i}{(C_1 \Delta x_{i-1} + C_2 H_{i-1}^t \Delta g_{i-1}) \Delta g_{i-1}}$$

$$- \frac{(K_1 \Delta x_{i-1} + K_2 H_{i-1}^t \Delta g_{i-1}) \Delta g_{i-1}^t H_{i-1} g_i}{(K_1 \Delta x_{i-1} + K_2 H_{i-1}^t \Delta g_{i-1}) \Delta g_{i-1}}$$

or $g_i^t \Delta x_{i-1} = \Delta x_{i-1}^t g_i = 0$ car on sait que $g_{i+1}^t \Delta x_i = 0$.

donc : $H_i^t g_i = H_{i-1}^t g_i - \frac{A_{i-1}}{D_{i-1}} (K_1 \Delta x_{i-1} + K_2 H_{i-1}^t \Delta g_{i-1})$

Maintenant :

$$H_{i-1}^t \Delta g_{i-1} = H_{i-1}^t g_i - H_{i-1}^t g_{i-1} = H_{i-1}^t g_i + \frac{\Delta x_{i-1}}{\alpha_{i-1}}$$

car $-H_{i-1}^t g_{i-1} \underset{\uparrow}{=} -p_{i-1} \underset{\uparrow}{=} \frac{\Delta x_{i-1}}{\alpha_{i-1}}$

car $p_i = H_i^t g_i$ car $\Delta x_i = -\alpha_i p_i$

donc : $H_i^t g_i = \left(1 - \frac{A_{i-1} K_2}{D_{i-1}}\right) H_{i-1}^t g_i - \frac{A_{i-1}}{D_{i-1}} \left(K_1 + \frac{K_2}{\alpha_{i-1}}\right) \Delta x_{i-1}$

ce qui se simplifie pour donner :

$$H_i^t g_i = -\frac{(\alpha_{i-1} K_1 + K_2) B_{i-1}}{D_{i-1}} \left(I - \frac{\Delta x_{i-1} \Delta g_{i-1}^t}{\Delta x_{i-1}^t \Delta g_{i-1}} \right) H_{i-1}^t g_i$$

(En effet :

$$\left(1 - \frac{A_{i-1} K_2}{D_{i-1}}\right) H_{i-1}^t g_i - \frac{A_{i-1}}{D_{i-1}} \left(\frac{\alpha_{i-1} K_1 + K_2}{\alpha_{i-1}} \right) \Delta x_{i-1}$$

$$= \frac{-\alpha_{i-1} K_1 B_{i-1} + K_2 A_{i-1} - K_2 B_{i-1} - A_{i-1} K_2}{D_{i-1}} H_{i-1}^t g_i - \frac{\alpha_{i-1} K_1 + K_2}{D_{i-1}} B_{i-1} \frac{\Delta x_{i-1} A_{i-1}}{\alpha_{i-1} B_{i-1}}$$

$$= -\left(\frac{\alpha_{i-1} K_1 + K_2}{D_{i-1}}\right) B_{i-1} \left[H_{i-1}^t g_i + \frac{\Delta x_{i-1} A_{i-1}}{\alpha_{i-1} B_i} \right]$$

$$= -\left(\frac{\alpha_{i-1} K_1 + K_2}{D_{i-1}}\right) B_{i-1} \left[H_{i-1}^t g_i + \frac{\Delta x_{i-1} \Delta g_{i-1}^t H_{i-1}^t g_i}{\alpha_{i-1} \Delta g_{i-1}^t H_{i-1}^t g_{i-1}} \right]$$

$$= -\left(\frac{\alpha_{i-1} K_1 + K_2}{D_{i-1}}\right) B_{i-1} \left[I - \frac{\Delta x_{i-1} \Delta g_{i-1}^t}{\Delta g_{i-1}^t \Delta x_{i-1}} \right] H_{i-1}^t g_i \quad \text{car}$$

$$\alpha_{i-1} H_{i-1}^t g_{i-1} = -\Delta x_{i-1}$$

On peut décomposer cette expression en

- un facteur scalaire :

$$\beta_i = -\frac{(\alpha_{i-1} K_1 + K_2) B_{i-1}}{D_{i-1}}$$

- un vecteur :

$$\varphi_i = \left(I - \frac{\Delta x_{i-1} \Delta g_{i-1}^t}{\Delta x_{i-1}^t \Delta g_{i-1}} \right) H_{i-1}^t g_i$$

En supposant qu'au point initial x_0, une matrice H_0 est choisie, alors, à partir de la relation $p_i = H_i^t g_i$, p_0 et de là Δx_0, Δg_0 sont les mêmes pour tous les membres de la famille définie par Huang.
De même, à partir de la relation :

$$H_i^t g_i = -\frac{(\alpha_{i-1} K_1 + K_2)}{D_{i-1}} B_{i-1} \left(I - \frac{\Delta x_{i-1} \Delta g_{i-1}^t}{\Delta x_{i-1}^t \Delta g_{i-1}} \right) H_{i-1}^t g_i$$

p_1 et de là Δx_1, Δg_1 sont les mêmes pour tous les membres de la famille de Huang.

Considérons un sous-groupe de la famille de Huang tel que $\left.\begin{matrix}\Delta x_0, \Delta x_1, \dots \Delta x_{i-1} \\ \Delta g_0, \Delta g_1, \dots \Delta g_{i-1}\end{matrix}\right\}$ soient les mêmes et considérons l'expression formée ci-dessus :

On pourra de cette façon faire la démonstration par récurrence.

1°) Considérons une direction arbitraire S

$$H_i^T S = H_{i-1}^T S + \rho\left(\frac{\Delta x_{i-1}^T S}{E_{i-1}}\right)(c_1 \Delta x_{i-1} + c_2 H_{i-1}^T \Delta g_{i-1})$$
$$-\left(\frac{\Delta g_{i-1}^T H_{i-1}^T S}{D_{i-1}}\right)(k_1 \Delta x_{i-1} + k_2 H_{i-1}^T \Delta g_{i-1})$$

or comme $H_{i-1}^T \Delta g_{i-1} = H_{i-1}^T g_i + \dfrac{\Delta x_{i-1}}{\alpha_{i-1}}$

en remplaçant dans l'expression de $H_i^T S$ on aura :

$$H_i^T S = H_{i-1}^T S + \rho\left(\frac{\Delta x_{i-1}^T S}{E_{i-1}}\right)\left(\left(c_1 + \frac{c_2}{\alpha_{i-1}}\right)\Delta x_{i-1} + c_2 H_{i-1}^T g_i\right)$$
$$-(\Delta g_{i-1}^T H_{i-1}^T S / D_{i-1})\left(\left(k_1 + \frac{k_2}{\alpha_{i-1}}\right)\Delta x_{i-1} + k_2 H_{i-1}^T g_i\right)$$

mais comme nous avons la relation :

$$H_i^T g_i = -\frac{(\alpha_{i-1} k_1 + k_2)}{D_{i-1}} B_{i-1}\left(I - \frac{\Delta x_{i-1} \Delta g_{i-1}^T}{\Delta x_{i-1}^T \Delta g_{i-1}}\right) H_{i-1}^T g_i$$

on a : $H_i^T g_i = \beta_i \left[H_{i-1}^T g_i + \dfrac{\Delta x_{i-1} A_{i-1}}{\alpha_{i-1} B_{i-1}} \right]$

donc : $H_{i-1}^T g_i = \dfrac{H_i^T g_i}{\beta_i} - \dfrac{\Delta x_{i-1} A_{i-1}}{\alpha_{i-1} B_{i-1}}$

En remplaçant dans $H_i^T S$ on a :

$$H_i^T S = H_{i-1}^T S + \rho\left(\frac{\Delta x_{i-1}^T S}{E_{i-1}}\right)\left[\left(c_1 + \frac{c_2}{\alpha_{i-1}} - \frac{A_{i-1} c_2}{\alpha_{i-1} B_{i-1}}\right)\Delta x_{i-1} + \frac{c_2}{\beta_i} H_i^T g_i\right.$$

$$-\left(\frac{\Delta q_{i-1}^{T} H_{i-1}^{T} S}{D_{i-1}}\right)\left[\left(K_1+\frac{K_2}{\alpha_{i-1}}-\frac{A_{i-1}K_2}{\alpha_{i-1}B_{i-1}}\right)\Delta x_{i-1}+\frac{K_2}{B_i}H_i^{T} q_i\right]$$

ce qui se simplifie à partir de $\Delta q_{i-1}^{T}\Delta x_{i-1} = -\alpha_{i-1}B_{i-1}$

et de : $\frac{1}{E_{i-1}}\left(C_1+\frac{C_2}{\alpha_{i-1}}-\frac{A_{i-1}C_2}{\alpha_{i-1}B_{i-1}}\right)=\frac{C_1\alpha_{i-1}B_{i-1}+C_2B_{i-1}-A_{i-1}C_2}{\alpha_{i-1}B_{i-1}(-\alpha_{i-1}C_1B_{i-1}+C_2A_{i-1}-C_2B_{i-1})}$

$$= -\frac{1}{\alpha_{i-1}B_{i-1}}$$

et de $\frac{1}{D_{i-1}}\left(K_1+\frac{K_2}{\alpha_{i-1}}-\frac{A_{i-1}K_2}{\alpha_{i-1}B_{i-1}}\right)=-\frac{1}{\alpha_{i-1}B_{i-1}}$

pour donner :

$$H_i^{T}S = H_{i-1}^{T}S+\rho(\Delta x_{i-1}^{T}S)\left(-\frac{\Delta x_{i-1}}{\alpha_{i-1}B_{i-1}}+\frac{C_2}{B_iE_{i-1}}H_i^{T}q_i\right)$$

$$-(\Delta q_{i-1}^{T}H_{i-1}^{T}S)\left(-\frac{\Delta x_{i-1}}{\alpha_{i-1}B_{i-1}}+\frac{K_2}{B_iD_{i-1}}H_i^{T}q_i\right)$$

Posons :

$$G_i=\frac{C_2}{B_iE_{i-1}\alpha_i} \qquad J_i=\frac{K_2}{B_iD_{i-1}\alpha_i}$$

$$\rightarrow H_i^{T}S=\left(I-\frac{\Delta x_{i-1}\Delta q_{i-1}^{T}}{\Delta x_{i-1}^{T}\Delta q_{i-1}}+J_i\Delta x_i\Delta q_{i-1}^{T}\right)H_{i-1}^{T}S$$

$$+\rho\left[\frac{\Delta x_{i-1}}{(\Delta x_{i-1}^{T}\Delta q_{i-1})}-G_i\Delta x_i\right](\Delta x_{i-1}^{T}S)$$

En effet :

$$\rho\left(\Delta x_{i-1}^{T} s\right)\left(-\frac{\Delta x_{i-1}}{\alpha_{i-1}\Delta g_{i-1}^{T} H_{i-1}^{T} g_{i-1}} + \frac{c_2}{\beta_i E_{i-1}} H_i^{T} g_i\right)$$

$$\left(\Delta g_{i-1}^{T} H_{i-1}^{T} s\right)\left(-\frac{\Delta x_{i-1}}{\alpha_{i-1}\Delta g_{i-1}^{T} H_{i-1}^{T} g_{i-1}} + \frac{k_2}{\beta_i D_{i-1}} H_i^{T} g_i\right)$$

$$\rho\left(\Delta x_{i-1}^{T} s\right)\left(\frac{\Delta x_{i-1}}{\Delta g_{i-1}^{T}\Delta x_{i-1}} - \frac{c_2}{\beta_i E_{i-1}\alpha_i}\Delta x_i\right)$$

$$-\left(\frac{\Delta x_{i-1}}{\Delta g_{i-1}^{T}\Delta x_{i-1}} - \frac{k_2}{\beta_i D_{i-1}\alpha_i}\Delta x_i\right)\left(\Delta g_{i-1}^{T} H_{i-1}^{T} s\right)$$

$$\rho\left(\frac{\Delta x_{i-1}}{\Delta x_{i-1}^{T}\Delta g_{i-1}} - G_i\Delta x_i\right)\left(\Delta x_{i-1}^{T} s\right)$$

$$-\left(\frac{\Delta x_{i-1}\Delta g_{i-1}^{T}}{\Delta x_{i-1}^{T}\Delta g_{i-1}} - J_i\Delta x_i\Delta g_{i-1}^{T}\right)\left(H_{i-1}^{T} s\right)$$

2°) Considérons maintenant la direction p_i à partir de :

$$p_i = \left(I - \frac{\Delta x_{i-1}\Delta g_{i-1}^{T}}{\Delta x_{i-1}^{T}\Delta g_{i-1}}\right) H_{i-1}^{T} g_i$$

$$\Rightarrow q_i = \left(I - \frac{\Delta x_{i-1}\Delta g_{i-1}^{T}}{\Delta x_{i-1}^{T}\Delta g_{i-1}}\right)\left(I - \frac{\Delta x_{i-2}\Delta g_{i-2}^{T}}{\Delta x_{i-2}^{T}\Delta g_{i-2}} + J_{i-1}\Delta x_{i-1}\Delta g_{i-1}^{T}\right) * \left(H_{i-2}^{T} g_i\right)$$

en remplaçant $H_{i-1}^{T} g_i$

$$+\left(I - \frac{\Delta x_{i-1}\Delta g_{i-1}^{T}}{\Delta x_{i-1}^{T}\Delta g_{i-1}}\right)\left(\frac{\Delta x_{i-2}}{\Delta x_{i-2}^{T}\Delta g_{i-2}} - G_{i-1}\Delta x_{i-1}\right)\left(\rho\,\Delta x_{i-2}^{T} g_i\right)$$

ce qui se simplifie :

$$q_i = \left(I - \frac{\Delta x_{i-1}\,\Delta g_{i-1}^T}{\Delta x_{i-1}^T\,\Delta g_{i-1}}\right)\left(I - \frac{\Delta x_{i-2}\,\Delta g_{i-2}^T}{\Delta x_{i-2}^T\,\Delta g_{i-2}}\right) H_{i-2}^T\, g_i$$

$$+ \left(I - \frac{\Delta x_{i-1}\,\Delta g_{i-1}^T}{\Delta x_{i-1}^T\,\Delta g_{i-1}}\right)\left(\frac{\rho\,\Delta x_{i-2}^T\, g_i}{\Delta x_{i-2}^T\,\Delta g_{i-2}}\right)\Delta x_{i-2}$$

En effet :

$$J_i\left(I - \frac{\Delta x_{i-1}\,\Delta g_{i-1}^T}{\Delta x_{i-1}^T\,\Delta g_{i-1}}\right)\Delta x_{i-1}\,\Delta g_{i-1}^T =$$

$$J_i\left[\Delta x_{i-1}\,\Delta g_{i-1}^T - \frac{\Delta x_{i-1}(\Delta g_{i-1}^T\,\Delta x_{i-1})\Delta g_{i-1}^T}{\Delta g_{i-1}^T\,\Delta x_{i-1}}\right] = 0$$

$$G_i\left[I - \frac{\Delta x_{i-1}\,\Delta g_{i-1}^T}{\Delta x_{i-1}^T\,\Delta g_{i-1}}\right]\Delta x_{i-1} = G_i\left[\Delta x_{i-1} - \frac{\Delta x_{i-1}(\Delta g_{i-1}^T\,\Delta x_{i-1})}{\Delta g_{i-1}^T\,\Delta x_{i-1}}\right] = 0$$

Dans l'expression de q_i les termes G_{i-1} et J_{i-1} n'apparaissent pas.

Dans le cas particulier d'une fonction quadratique $\Delta x_{i-2}^T g_i = 0$ et $\Delta g_{i-1}^T \Delta x_{i-2} = 0$ dû au fait que les directions engendrées sont conjuguées.
À ce moment l'expression de q_i se réduit à la forme donnée par Huang pour une fonction quadratique

Si on recommence le procédé jusqu'au moment où on arrive à $H_0^T g_i$

$$q_i = \left\{ \prod_{j=0}^{i-1} \left(I - \frac{\Delta x_j \Delta q_j^+}{\Delta x_j^+ \Delta q_j} \right) \right\} H_0^+ q_i + \sum_{j=0}^{i-2} \left\{ \prod_{k=j+1}^{i-1} \left(I - \frac{\Delta x_k \Delta q_k^+}{\Delta x_k^+ \Delta q_k} \right) \right\} * \rho \left(\frac{\Delta x_j^+ q_i}{\Delta x_j^+ \Delta q_j} \right) \Delta x_j$$

qui est équivalent à l'équation de Huang pour les fonctions non quadratiques
Sous les hypothèses faites sur l'équation donnant la première expression de $H_i^+ s$, il s'ensuit que la CNS pour que tous les membres du groupe engendrent la même direction q_i et qu'ils fournissent tous la même valeur de ρ à chaque itération
Comme nous avons montré que les suppositions sont vraies pour $i = 0$ et $i = 1$, il s'ensuit par récurrence que c'est vrai pour chaque valeur supérieure à i

cqfd.

Conclusions

---

1) : On a établi une CNS pour que les membres de la famille de Huang engendrent des directions identiques.

2) Tous les membres de la famille introduite par Broyden et discutée en détail par Broyden Shanno, Fletcher sont des membres de la famille de Huang avec $\rho = 1$. Ils donnent tous des suites identiques de points si la longueur du pas est choisie telle que $f(x_i - \lambda_i^{(j)} q_i)$ soit minimum

Algorithmes à métrique variable

Étant donné un point $x^{(0)}$ et une matrice initiale $H^{(0)}$, un algorithme est dit à métrique variable si il engendre une suite de points $x^{(k)}$ et une suite de matrices $H^{(k)}$ par le procédé suivant :

- au point $x^{(k)}$ la direction $p^{(k)}$ est définie par :

$$p^{(k)} = -H^{(k)} g^{(k)}$$

et le pas $d^{(k)}$ est pris le long de $\pm p^{(k)}$ pour définir un nouveau point $x^{(k+1)}$ comme suit :

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + d^{(k)} = x^{(k)} - \alpha^{(k)} H^{(k)} g^{(k)}$$

On calcule ensuite $H^{(k+1)}$ à partir de ce point en utilisant l'information de l'itération précédente. En général, on utilise pour $H^{(k+1)}$ une fonction qui dépend de trois variables comme suit :

$$H^{(k+1)} = H(H^{(k)}, d^{(k)}, y^{(k)})$$ $\rightarrow$ joue le rôle de Δx dans Huang.

où $y^{(k)} = g^{(k+1)} - g^{(k)}$ (joue le rôle de Δg dans Huang).

Une réalisation est dite parfaite si le paramètre $\alpha^{(k)}$ est choisi par une technique de recherche unidimensionnelle qui localise le minimum local le plus près dans la direction $\pm p^{(k)}$ à partir de $x^{(k)}$.

Cette définition assure que, étant donné $x^{(k)}$ et $p^{(k)}$, la valeur de $\alpha^{(k)}$ est définie uniquement et que le gradient au point $x^{(k+1)}$ est perpendiculaire au pas pris

$$g^{(k+1)T} d^{(k)} = 0$$

$\left\{ \begin{array}{l} d^{(k)} \text{ est proport}^{ll} \\ \text{à } p^{(k)} \end{array} \right.$

(9? ce n'est pas ⊄ !

Famille Quasi-Newton de Broyden.

Différents algorithmes à métrique variable ont été introduits.
Le premier et un des plus importants est celui de Broyden. La fonction engendrée par cette famille peut être écrite comme :

$$
\begin{cases}
H^{(k+1)} = H_D^{(k+1)} + \varphi_k v v^t \\
\text{où} \quad v = \dfrac{d}{d^t y} - \dfrac{Hy}{y^t H y} \\
\text{et} \quad H_D^{(k+1)} = H^{(k)} + \dfrac{dd^t}{d^t y} - \dfrac{H y y^t H}{y^t H y}.
\end{cases}
$$

la formule originale de D.F.P.

Dans la suite, pour simplifier ces équations, on n'inscrit pas l'indice (k).
Donc, quand les éléments d, H, y ou g apparaissent sans indice, la valeur (k) est sous-entendue.
On va considérer le comportement de cette famille pour des fonctions plus générales que les fonctions quadratiques définies positives

Commençons par démontrer le lemme suivant.

Lemme :

Si dans une réalisation parfaite d'un algorithme à métrique variable on a obtenu le point $x^{(k+1)}$ par une recherche dans une direction p^{k} à partir du point $x^{(k)}$ c'est à dire :

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \alpha p^{(k)} = x^{(k)} - \alpha H^{(k)} g^{(k)}$$

et la matrice $H^{(k+1)}$ en utilisant une formule de la famille de Broyden

alors : - soit que la nouvelle direction $p^{(k+1)}$ est indéfinie

- soit que le pas suivant $d^{(k+1)}$ est indépendant de φ_1

Démonstration :

La nouvelle direction est : $p^{(k+1)} = - H^{(k+1)} g^{(k+1)}$

En utilisant les relations suivantes :

$$\begin{cases} H^{(k+1)} = H_D^{(k+1)} + \varphi_1 v v^{+} \\ v = \dfrac{d}{d^{+}y} - \dfrac{Hy}{y^{+}Hy} \\ H_D^{(k+1)} = H^{(k)} + \dfrac{dd^{+}}{d^{+}y} - \dfrac{Hyy^{+}H}{y^{+}Hy} \\ g^{(k+1)+} d^{(k)} = 0 \quad \text{(critère de la recherche linéaire exacte)} \end{cases}$$

nous obtenons :

$$(*) \quad p^{(k+1)} = -Hg^{(k+1)} + Hy \frac{y^{+}Hg^{(k+1)}}{y^{+}Hy} + \varphi_1 v \frac{y^{+}Hg^{(k+1)}}{y^{+}Hy}$$

En utilisant les équations :

$$\begin{cases} g^{+} H g^{(k+1)} = 0 \\ (2*) \quad q^{+} H g^{(k+1)} = g^{(k+1)+} H g^{(k+1)} \\ (3*) \quad q^{+} H q = g^{+} H g + g^{(k+1)+} H g^{(k+1)} \\ (4*) \quad \dfrac{d}{d^{+} q} = \dfrac{-\alpha H g}{-\alpha g^{+} H q} = \dfrac{-Hg}{g^{+} H g} \end{cases}$$

v. appendice I

L'équation donnant $p^{(k+1)}$ se simplifie comme suit :

$$p^{(k+1)} = -S(\varphi_1)\, v$$

où

$$S(\varphi_1) = g^{+} H g + \varphi_1 \frac{g^{(k+1)+} H g^{(k+1)}}{q^{+} H q}$$

est ici une quantité scalaire dépendant linéairement de φ_1 et est nulle quand

$$\varphi_1 = \frac{-(g^{+} H g)(q^{+} H q)}{g^{(k+1)+} H g^{(k+1)}}$$

pour laquelle la direction $p^{(k+1)}$ est indéfinie.
Pour les autres valeurs de φ_1, $p^{(k+1)}$ est parallèle à v et dû à la définition de la procédure de la recherche linéaire donnée précédemment, le fait suivant $d^{(k+1)}$ est indépendant de φ_1.

La valeur de φ_1 donnée par cette équation est définie et la matrice $H^{(k+1)}$ est donc singulière. Cela développe le résultat comme avec la formule symétrique de rang un à savoir que si $\alpha = +1$ correspond au minimum le long de la ligne, alors $p^{(k+1)}$ est indéfini et $H^{(k+1)}$ est singulière. Comme on sait que l'algorithme de DFP engendre des matrices définies positives et donc non dégénérées, il est possible de réécrire la fonction engendrée pour la famille de Broyden comme :

$$H^{(k+1)} = H_D^{(k+1)} + \varphi_2 \, d_D^{(k+1)} \, d_D^{(k+1)^T}$$

où $H_D^{(k+1)}$ et $d_D^{(k+1)}$ sont les valeurs qui seraient engendrées si les formules originales étaient employées.

Théorème 1

Si à l'itération (k) dans l'application des algorithmes à métrique variable de D.F.P. à une fonction, la matrice H_D est modifiée par l'addition d'un terme de rang un tel que

$$H^{(k)} = H_D^{(k)} + \varphi_2 \, d_D^{(k)} \, d_D^{(k)^T}$$

où φ_2 ne rend pas $H^{(k)}$ singulière
alors : après l'itération suivante on a :

$$H^{(k+1)} = H_D^{(k+1)} + \varphi_3 \, d_D^{(k+1)} \, d_D^{(k+1)^T}$$

Remarque : d_D, H_D, $d_D^{(k+1)}$ sont les valeurs qui auraient été obtenues si la modification n'avait pas été faite.

Démonstration

La matrice modifiée : $H^{(k)} = H_D^{(k)} + \varphi_2 \, d_D^{(k)} \, d_D^{(k)^T}$ satisfait à l'algorithme de D.F.P.
Ainsi :

$$H^{(k+1)} = H_D + \varphi_2 d_D d_D^+ - \frac{H\gamma\gamma^+H}{\gamma^+H\gamma} + \frac{dd^+}{d^+\gamma}$$

En effet :

$$H^{(k)} = H_D^{(k)} + \varphi_2 d_D^{(k)} d_D^{(k)+}$$

$$H^{(k+1)} = H^{(k)} + \frac{dd^+}{d^+\gamma} - \frac{H\gamma\gamma^+H}{\gamma^+H\gamma}$$

$$\to H^{(k+1)} = H_D + \varphi_2 d_D d_D^+ - \frac{H\gamma\gamma^+H}{\gamma^+H\gamma} + \frac{dd^+}{d^+\gamma}.$$

A partir du lemme 1 : $d = d_D$

$\gamma = \gamma_D$

comme le pas suivant est indépendant de φ et le cas dégénéré est exclu du théorème

Si nous remplaçons maintenant pour $H_D^{(k+1)}$ on obtient :

$$H^{(k+1)} = H_D^{(k+1)} + \varphi_2 d_D d_D^+ - \frac{H\gamma_D\gamma_D^+H}{\gamma_D^+H\gamma_D} + \frac{H_D\gamma_D\gamma_D^+H_D}{\gamma_D^+H_D\gamma_D}$$

qui est équivalente à :

$$H^{(k+1)} = H_D^{(k+1)} + \varphi_2 \frac{v_D v_D^+ (d_D^+\gamma_D)^2 (\gamma_D^+H_D\gamma_D)}{(\gamma_D^+H_D\gamma_D + \varphi_2 (d_D^+\gamma_D)^2)}$$

v. appendice II

Donc comme la suite de D.F.P n'est pas singulière $d_D^{(k+1)}$ est définie et est parallèle à v_D et de là, l'équation donnant $H^{(k+1)}$ peut s'écrire comme :

$H^{(k+1)} = H_D^{(k+1)} + \varphi_3^{(k+1)} d_D^{(k+1)} d_D^{(k+1)+}$ pour un scalaire $\varphi_3^{(k+1)}$

Théorème 2

Considérons la suite de points $x^{(k)}$ engendrée en utilisant un algorithme à métrique variable, avec une recherche linéaire exacte et une formule adaptée à la famille de Broyden. Supposons qu'on démarre avec un point donné $x^{(0)}$ et une matrice initiale $H^{(0)}$ symétrique et non singulière alors la suite $x^{(k)}$ est indépendante du choix de la formule à chaque itération, en admettant que la formule correspondant à la valeur dégénérée de φ_1 n'est jamais employée.

Démonstration

A la 1ère itération : $p^{(0)} = -H^{(0)} g^{(0)}$
et comme la recherche linéaire est indépendante de la formule adaptée, chaque formule aura la même valeur de $x^{(1)}$
A la 2de itération, les conditions du lemme 1 (puisque $x^{(2)}$ dépend de $x^{(1)}$) s'appliquent et de là chaque formule engendra la même valeur de $x^{(2)}$

Donc :

$$H^{(1)} = H_D^{(1)} + \varphi_2^{(1)} d_D^{(1)} d_D^{(1)T} \quad \left(\text{car on a : } H^{(k)} = H_D^{(k)} + \varphi_2 d_D^{(k)} d_D^{(k)T} \right)$$

et donc par le théorème 1 . on aura :

$$H^{(2)} = H_D^{(2)} + \varphi_3^{(2)} d_D^{(2)} d_D^{(2)T} + \varphi_2^{(2)} d_D^{(2)} d_D^{(2)T}$$

où le terme en $\varphi_3^{(2)}$ découle du fait que $\varphi_2^{(1)}$ est

non nul et le terme $\varphi_2^{(2)}$ laisse le libre choix de la formule à l'itération 2
On peut combiner ces deux termes et alors le lemme 1 implique que $x^{(3)}$ est indépendant du choix de φ (non dégénéré)
$H^{(2)}$ est donc de la forme requise par le théorème 2 et on peut recommencer le même procédé.
Par récurrence, la suite de points $x^{(k)}$ est indépendante du choix de φ à chaque itération, admettant que la valeur conduisant au cas dégénéré du lemme 1 n'est pas choisie.

Corollaire

Si avec un algorithme particulier, on peut montrer que la suite $x^{(k)}$ converge vers le minimum de la fonction sous certaines conditions, alors : le théorème 2 implique que la suite engendrée par un autre algorithme de la famille convergera vers le minimum sous les mêmes conditions, ~~pourvu~~ admettant qu'il n'y a pas de dégénérescence

En particulier Powell a montré que la suite engendrée par la formule de D.F.P convergeait vers le minimum de fonctions strictement convexes. Donc le théorème 2 implique que la suite engendrée par la formule complémentaire converge aussi.

Théorème 3.

Sous les conditions établies dans le théorème 2, la suite des directions engendrées peut être représentée comme suit :

$$p^{(k)} = -\beta q^{(k)}$$

où

$$q^{(k)} = \left\{ \prod_{j=0}^{k-1} \left[I - \frac{d^{(j)} y^{(j)+}}{d^{(j)+} y^{(j)}} \right] \right\} H^{(0)+} g^{(k)}$$

$$+ \sum_{j=0}^{k-2} \left\{ \prod_{m=j+1}^{k-1} \left(I - \frac{d^{(m)} y^{(m)+}}{d^{(m)+} y^{(m)}} \right) \right\} \frac{d^{(j)+} g^{(k)}}{d^{(j)+} y^{(j)}} d^{(j)}$$

Démonstration.

A partir du lemme 1 nous pouvons écrire :

$$p^{(k+1)} = \beta y^{+} H y \left(\frac{d}{d^{+} y} - \frac{H y}{y^{+} H y} \right)$$

En effet : lemme 1 $\Rightarrow$ $p^{(k)} = -H^{(k)} g^{(k)}$

$$v = \frac{d}{d^{+} y} - \frac{H y}{y^{+} H y}$$

$$p^{(k+1)} = -S(\phi_1) \left(\frac{d}{d^{+} y} - \frac{H y}{y^{+} H y} \right)$$

-, ici : $p^{(k+1)} = \beta y^{+} H y \left(\frac{d}{d^{+} y} - \frac{H y}{y^{+} H y} \right)$

avec β une certaine constante.

En utilisant le fait que $d_D^{(k+1)}$ est un vecteur unique dans la direction $p^{(k+1)}$, on peut écrire

$$\frac{Hy}{y^T H y} = \frac{d}{d^T y} + \gamma\, d_D^{(k+1)}$$

pour une certaine constante γ

En effet :

$$p^{(k+1)} = \beta\, y^T H y \left(\frac{d}{d^T y} - \frac{Hy}{y^T H y} \right)$$

$$\beta\, y^T H y \frac{d}{d^T y} - \beta\, y^T H y \frac{Hy}{y^T H y} = p^{(k+1)}$$

$$\to \quad \beta H y = \beta\, y^T H y \frac{d}{d^T y} - p^{(k+1)}$$

$$\to \quad \frac{Hy}{y^T H y} = \frac{d}{d^T y} - \frac{1}{\beta\, y^T H y}\, p^{(k+1)}$$

$$= \frac{d}{d^T y} + \gamma\, d_D^{(k+1)}$$

En développant les termes de l'expression de $p^{(k+1)}$ on trouve :

$$p^{(k+1)} = \beta\, y^T H y \left(\frac{d}{d^T y} - \frac{Hy}{y^T H y} \right)$$

$$= \beta \left(y^T H y \frac{d}{d^T y} - y^T H y \frac{Hy}{y^T H y} \right)$$

or on sait que : $\dfrac{d}{d^T y} = \dfrac{-Hg}{g^T H g}$ et que $y^{(k)} = g^{(k+1)} - g^{(k)}$

vu que $y^T H y = g^T H g + g^{(k+1)T} H g^{(k+1)}$

$$\Rightarrow = \beta\left(-\frac{Hg}{g^T H g}\left(g^T H g + g^{(k+1)T} H g^{(k+1)}\right) - \left(H g^{k+1} - Hg\right)\right)$$

$$= \beta\left(-Hg\,\frac{g^T H g}{g^T H g} - \frac{Hg\, g^{(k+1)T} H g^{(k+1)}}{g^T H g} - Hg^{(k+1)} + Hg\right)$$

$$= \beta\left(-\frac{Hg}{g^T H g}\left(g^{(k+1)T} H g^{(k+1)}\right) - Hg^{(k+1)}\right)$$

$$= \beta\left(\frac{d}{d^T y}\, g^{(k+1)T} H g^{(k+1)} - Hg^{(k+1)}\right)$$

$$= \beta\left(\frac{d}{d^T y}\, g^{(k+1)T} - I\right) H g^{(k+1)}$$

$$= -\beta\left(I - \frac{d y^T}{d^T y}\right) H g^{(k+1)}$$

$$\Rightarrow g^{(k+1)} = \left(I - \frac{d y^T}{d^T y}\right) H g^{(k+1)}$$

qui dans le cas où $k=0$ satisfait à la formule du théorème.

Considérons maintenant le terme $H^{(k+1)} s$ pour une direction s

$$H^{(k+1)} s = \left(H - \frac{H y y^T H}{y^T H y} + \frac{d d^T}{d^T y} + \varphi_2\, d_D^{(k+1)} d_D^{(k+1)T}\right) s$$

En remplaçant $\frac{Hy}{y^T H y}$ par sa valeur donnée plus haut:

$$H^{(k+1)} s = \left(H - \frac{d y^T H}{d^T y} - \gamma d_0^{(k+1)} y^T H + \frac{d d^T}{d^T y} + \varphi_e d_0^{(k+1)} d_0^{(k+1)T} \right) s.$$

et $$\left(I - \frac{d^{(k+1)} y^{(k+1)T}}{d^{(k+1)T} y^{(k+1)}} \right) H^{(k+1)} s =$$

$$\left(I - \frac{d^{(k+1)} y^{(k+1)T}}{d^{(k+1)T} y^{(k+1)}} \right) \left(\left(I - \frac{d y^T}{d^T y} \right) H s + \frac{d d^T s}{d^T y} \right)$$

(les termes en γ et φ_e tombent).

En remplaçant dans l'expression de $g^{(k+1)}$ on aura :

$$g^{(k+1)} = \left(I - \frac{d^{(k)} y^{(k)T}}{d^{(k)T} y^{(k)}} \right) \left(\left(I - \frac{d^{(k-1)} y^{(k-1)T}}{d^{(k-1)T} y^{(k-1)}} \right) H^{(k-1)} g^{(k+1)} + \frac{d^{(k-1)} d^{(k-1)T} \cdot g^{(k+1)}}{d^{(k-1)T} y^{(k-1)}} \right)$$

qui satisfait la condition du théorème si $k = 1$.
Si on continue ce procédé en substituant à partir de l'équation donnant $H^{(k+1)} s$ dans le premier terme de celle donnant $g^{(k+1)}$, un terme semblable apparaît.
Le terme :
$$\left(I - \frac{d^{(j)} y^{(j)T}}{d^{(j)T} y^{(j)}} \right) H^{(j)} g^{(k+1)}$$ peut être réduit jusqu'à $j = 0$
donnant ainsi l'équation demandée par le théorème.

<u>Remarque</u> : • à partir de ce théorème, on peut établir le théorème 2.
• Ayant montré que tous les membres de la famille de Broyden engendraient la même

suite de points, on pourrait se demander si on peut étendre ce résultat à d'autres formules.
Huang a introduit une famille à 3 degrés de liberté, comprenant les formules non symétriques, et satisfaisant la propriété : $H^{(k+1)^T} y^{(k)} = \rho^{(k)} d^{(k)}$
avec $\rho^{(k)}$ un des 4 degrés de liberté.
Dixon a constaté que si $\rho^k = 1$ pour toutes les valeurs de k, les équations sont identiques.

Théorème 4

Si $x^{(k)}$ est une suite de points engendrés par la formule de D.F.P. alors la matrice $H^{(k)}$ qui peut remplacer la matrice $H_D^{(k)}$ à l'itération k et laisser le pas suivant $x^{(k)}$ inchangé est :

$$H^{(k)} = H_D^{(k)} + \varphi\, d_D^{(k)} d_D^{(k)^T} \qquad \text{si } n \geq 3.$$

$$\text{ou } H^{(k)} = \theta H_D^{(k)} + \varphi\, d_D^{(k)} d_D^{(k)^T} \qquad \text{si } n = 2.$$

où φ et θ sont choisis de façon à ce que la matrice $H^{(k)}$ soit non singulière.

Conclusions.

Nous avons donné 4 théorèmes relatifs au comportement de la famille de Broyden pour des algorithmes à métrique variable.
Nous avons montré qu'avec des recherches linéaires précises la suite de points engendrée est indépendante des algorithmes employés à chaque itération pourvu que la matrice résultante est non singulière.
Le résultat étend la preuve que la suite de points engendrée par la formule originale de D.F.P. converge pour une fonction convexe, pour les autres membres de la famille.
Il implique aussi que l'efficacité et la fiabilité de la méthode avec les membres différents de la famille quand les recherches linéaires ne sont pas réalisées exactement est essentiellement dépendante du procédé de recherche linéaire non précise employé.

Appendice I

*) $$p^{(k+1)} = -H^{(k+1)} g^{(k+1)}$$

$$H^{(k+1)} g^{(k+1)} = H_D^{(k+1)} g^{(k+1)} + \varphi_1 v v^+ g^{(k+1)}$$

$$H_D^{(k+1)} g^{(k+1)} = H^{(k)} g^{(k+1)} + \overbrace{\cancel{\frac{d d^+}{d^+ y} g^{(k+1)}}}^{=0} - \frac{H y y^+ H}{y^+ H y} g^{(k+1)}$$

$$v^+ = \frac{d^+}{y^+ d} - \frac{y^+ H^+}{y^+ H y}$$

$$\varphi_1 v v^+ g^{(k+1)} = \underbrace{\cancel{\varphi_1 v \frac{d^+}{y^+ d} g^{(k+1)}}}_{=0} - \varphi_1 v \frac{y^+ H^+}{y^+ H y} g^{(k+1)}$$

$$H^{(k+1)} g^{(k+1)} = H^{(k)} g^{(k+1)} - \frac{H y y^+ H}{y^+ H y} g^{(k+1)} - \varphi_1 v \frac{y^+ H^+}{y^+ H y} g^{(k+1)}$$

$$\Rightarrow p^{(k+1)} = -H g^{(k+1)} + H y \frac{y^+ H g^{(k+1)}}{y^+ H y} + \varphi_1 v \frac{y^+ H g^{(k+1)}}{y^+ H y}$$

---

*) $$y^+ H g^{(k+1)} = \left(g^{(k+1)} - g\right)^+ H g^{(k+1)}$$
$$= g^{(k+1)+} H g^{(k+1)} - \underbrace{\cancel{g^+ H g^{(k+1)}}}_{=0}$$

) $$y^+ H y = \left(g^{(k+1)+} - g^+\right) H \left(g^{(k+1)} - g\right)$$
$$= \left(g^{(k+1)+} - g^+\right)\left(H g^{(k+1)} - H g\right)$$

$$= g^{(k+1)^+} H g^{(k+1)} - g^{(k+1)^+} H g - g^+ H g^{(k+1)} + g^+ H g$$

$$= g^+ H g + g^{(k+1)^+} H g^{(k+1)}$$

4*) $$\frac{d}{d^+ y} = \frac{-\alpha H g}{-\alpha g^+ H y} = \frac{-Hg}{-g^+ H (g^{(k+1)} - g)}$$

$$= \frac{-Hg}{-g^+ H g^{(k+1)} + g^+ H g} = -\frac{Hg}{g^+ H g}$$

Appendice II

Equivalence des deux relations.

$$\varphi_2 \delta_D \delta_D^+ - \frac{(H_D + \varphi_2 \delta_D \delta_D^+)\gamma_D \gamma_D^+ (H_D + \varphi_2 \delta_D \delta_D^+)}{\gamma_D^+ (H_D + \varphi_2 \delta_D \delta_D^+)\gamma_D}$$

$$+ \frac{H_D \gamma_D \gamma_D^+ H_D}{\gamma_D^+ H_D \gamma_D}$$

1°) $(H_D + \varphi_2 \delta_D \delta_D^+)\gamma_D \gamma_D^+ (H_D + \varphi_2 \delta_D \delta_D^+)$

$$= H_D \gamma_D \gamma_D^+ H_D + \varphi_2 H_D \gamma_D \gamma_D^+ \delta_D \delta_D^+$$

$$+ \varphi_2 \delta_D \delta_D^+ \gamma_D \gamma_D^+ H_D + \varphi_2^2 \delta_D \delta_D^+ \gamma_D \gamma_D^+ \delta_D \delta_D^+$$

2°) $\varphi_2 \delta_D \delta_D^+ (\gamma_D^+ [H_D + \varphi_2 \delta_D \delta_D^+] \gamma_D) =$

$$\varphi_2 \delta_D \delta_D^+ \gamma_D^+ H_D \gamma_D + \varphi_2^2 \delta_D \delta_D^+ \gamma_D^+ \delta_D \delta_D^+ \gamma_D$$

3°) $\varphi_2 \delta_D \delta_D^+ \gamma_D^+ H_D \gamma_D + \cancel{\varphi_2^2 \delta_D \delta_D^+ \gamma_D^+ \delta_D \delta_D^+ \gamma_D}$

$$- H_D \gamma_D \gamma_D^+ H_D - \varphi_2 H_D \gamma_D \gamma_D^+ \delta_D \delta_D^+$$

$$- \varphi_2 \delta_D \delta_D^+ \gamma_D \gamma_D^+ H_D - \cancel{\varphi_2^2 \delta_D \delta_D^+ \gamma_D \gamma_D^+ \delta_D \delta_D^+}$$

En effet : $\delta_D \delta_D^+ \gamma_D^+ \delta_D \delta_D^+ \gamma_D = \delta_D^+ \gamma_D (\delta_D \delta_D^+ \gamma_D^+ \delta_D)$

$$= (\delta_D^+ \gamma_D)^2 \delta_D \delta_D^+$$

et $\delta_D \delta_D^+ \gamma_D \gamma_D^+ \delta_D \delta_D^+ = \delta_D^+ \gamma_D (\delta_D \delta_D^+ \gamma_D \delta_D^+)$

$$= (d_D^T y_D)^2 d_D d_D^T$$ $\Rightarrow$ ces 2 termes tombent.

4°/ H rel :

$$\frac{\varphi_2 d_D d_D^T y_D^T H_D y_D - H_D y_D y_D^T H_D}{y_D^T H_D y_D + \varphi_2 y_D^T d_D d_D^T y_D}$$

$$- \frac{\varphi_2 (H_D y_D y_D^T d_D d_D^T + d_D d_D^T y_D y_D^T H_D)}{y_D^T H_D y_D + \varphi_2 y_D^T d_D d_D^T y_D}$$

$$+ \frac{H_D y_D y_D^T H_D}{y_D^T H_D y_D}$$

5°/ $$\frac{\varphi_2 d_D d_D^T (y_D^T H_D y_D)^2 - H_D y_D y_D^T H_D \cdot y_D^T H_D y_D}{y_D^T H_D y_D (y_D^T H_D y_D + \varphi_2 y_D^T d_D d_D^T y_D)}$$

$$- \frac{\varphi_2 (H_D y_D y_D^T d_D d_D^T + d_D d_D^T y_D y_D^T H_D) y_D^T H_D y_D}{y_D^T H_D y_D (y_D^T H_D y_D + \varphi_2 y_D^T d_D d_D^T y_D)}$$

$$+ \frac{H_D y_D y_D^T H_D y_D^T H_D y_D + H_D y_D y_D^T H_D \cdot \varphi_2 y_D^T d_D d_D^T y_D}{y_D^T H_D y_D (y_D^T H_D y_D + \varphi_2 y_D^T d_D d_D^T y_D)}$$

6°/ $$\frac{\varphi_2 d_D d_D^T (y_D^T H_D y_D)^2 + \varphi_2 H_D y_D y_D^T H_D y_D^T d_D d_D^T y_D}{D}$$

$$- \frac{\varphi_2 (H_D y_D y_D^T d_D d_D^T + d_D d_D^T y_D y_D^T H_D) y_D^T H_D y_D}{D}$$

avec $D = y_D^T H_D y_D (y_D^T H_D y_D + \varphi_2 y_D^T d_D d_D^T y_D)$

A comparer avec l'autre équation.

1) $$v_D = \frac{d_D}{d_D^T y_D} - \frac{H_D y_D}{y_D^T H_D y_D}$$

2) $$v_D^T = \frac{d_D^T}{d_D^T y_D} - \frac{y_D^T H_D}{y_D^T H_D y_D}$$

3) $$v_D v_D^T = \frac{d_D d_D^T}{(d_D^T y_D)^2} - \frac{d_D y_D^T H_D}{(d_D^T y_D)(y_D^T H_D y_D)} - \frac{H_D y_D d_D^T}{(y_D^T H_D y_D)(d_D^T y_D)}$$

$$+ \frac{H_D y_D y_D^T H_D}{(y_D^T H_D y_D)^2}$$

4) $$v_D v_D^T (d_D^T y_D)^2 = \frac{d_D d_D^T \cancel{(d_D^T y_D)^2}}{\cancel{(d_D^T y_D)^2}} - \frac{d_D y_D^T H_D (d_D^T y_D)^{\cancel{2}}}{\cancel{(d_D^T y_D)}(y_D^T H_D y_D)}$$

$$- \frac{H_D y_D d_D^T (d_D^T y_D)^{\cancel{2}}}{(y_D^T H_D y_D)\cancel{(d_D y_D^T)}} + \frac{(H_D y_D y_D^T H_D)(d_D^T y_D)^2}{(y_D^T H_D y_D)^2}$$

5) $$v v_D^T (d_D^T y_D)^2 (y_D^T H_D y_D) =$$

$$d_D d_D^T (y_D^T H_D y_D) - \frac{d_D y_D^T H_D d_D^T y_D \cancel{y_D^T H_D y_D}}{\cancel{y_D^T H_D y_D}}$$

$$- \frac{H_D y_D d_D^T d_D^T y_D y_D^T H_D y_D}{y_D^T H_D y_D} + \frac{(H_D y_D y_D^T H_D)(d_D^T y_D)^2 \cancel{(y_D^T H_D y_D)}}{(y_D^T H_D y_D)^{\cancel{2}}}$$

6) $$\frac{d_D d_D^T (y_D^T H_D y_D)^2 - d_D y_D^T H_D d_D^T y_D y_D^T H_D y_D}{y_D^T H_D y_D}$$

$$\frac{- H_D y_D d_D^T d_D^T y_D y_D^T H_D y_D + H_D y_D y_D^T H_D (d_D^T y_D)^2}{y_D^T H_D y_D}$$

$(y_D^t H_D y_D + \varphi_2 (d_D^t y_D)^2)$ dans le dénominateur de toute l'expression 6.

$\Rightarrow$ dénominateur $= y_D^t H_D y_D (y_D^t H_D y_D + \varphi_2 (d_D^t y_D)^2)$
= le dénominateur de la 1ère expression.

Il reste à comparer l'équivalence des numérateurs en considérant le fait que toute l'expression est multipliée par φ_2

* $\varphi_2 d_D d_D^t (y_D^t H_D y_D)^2 \overset{?}{=} \varphi_2 d_D d_D^t (y_D^t H_D y_D)^2$ oui

* $\varphi_2 H_D y_D y_D^t H_D y_D^t d_D d_D^t y_D \overset{?}{=} \varphi_2 H_D y_D y_D^t H_D (d_D^t y_D)^2$
oui car:
$$y_D^t d_D d_D^t y_D = (d_D^t y_D)^2$$

* $(-\varphi_2 H_D y_D y_D^t d_D d_D^t - \varphi_2 d_D d_D^t y_D y_D^t H_D) y_D^t H_D y_D \overset{?}{=}$

$(-\varphi_2 d_D y_D^t H_D d_D^t y_D y_D^t H_D y_D - H_D y_D d_D^t d_D^t y_D y_D^t H_D y_D)$
oui car:

$$\begin{cases} \varphi_2 H_D y_D \underline{y_D^t d_D} d_D^t y_D^t H_D y_D = \varphi_2 y_D^t d_D (H_D y_D d_D^t y_D^t H_D y_D) \\ \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad // \\ \varphi_2 H_D y_D d_D^t \underline{d_D^t y_D} y_D^t H_D y_D = \varphi_2 d_D^t y_D (H_D y_D d_D^t y_D^t H_D y_D) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \varphi_2 d_D d_D^t y_D y_D^t H_D y_D^t H_D y_D = \varphi_2 d_D^t y_D (d_D y_D^t H_D y_D^t H_D y_D) \\ \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad // \\ \varphi_2 d_D y_D^t H_D d_D^t y_D y_D^t H_D y_D = \varphi_2 d_D^t y_D (d_D y_D^t H_D y_D^t H_D y_D) \end{cases}$$

$\Rightarrow$ équivalence des deux expressions.

Partie 2

La recherche linéaire n'est pas précise.

[8], [9], [10], [11], [12].

Introduction : Chapitre I.

~~Nous~~ Nous proposons une forme modifiée de la famille Quasi-Newton des algorithmes à métrique variable utilisé dans la minimisation d'une fonction. Cette forme modifiée a une fin quadratique et ne demande pas de recherches linéaire.

La plupart des membres de la famille Quasi-Newton se base sur, pour une fonction quadratique, sur le fait que grâce à des recherches linéaire précises, les directions engendrées forment une série conjuguée quand la fonction est quadratique.

Pour quelques membres de la famille, la convergence de la suite des matrices hessian inverses approximées vers la vraie matrice hessian inverse est stable.

Avec la modification proposée la même suite de matrices et la même série de directions conjuguées seront engendrées sans recherche linéaire exacte.

Pour une fonction quadratique, la proposition est aussi apparentée à celle de hestenes, celle-ci engendrant la même suite de directions conjuguées sans recherche linéaire exacte. Les deux méthodes trouvent le minimum d'une fonction quadratique de dimension n en au plus n+2 évaluations de la fonction et de son gradient.

Pour des fonctions non quadratiques la proposition conserve les principaux avantages cités par les deux ~~(méthodes)~~ approches stables de Quasi-Newton et de hestenes.

Nous avons comme but de montrer qu'en modifiant l'équation : $p^{(k)} = -H^{(k)} g^{(k)}$ qui définit la direction de recherche $p^{(k)}$, on peut, avec une formule particulière de la famille de Quasi-Newton engendrer pour une fonction quadratique la même suite de matrices $H^{(k)}$ et les mêmes directions conjuguées $p^{(k)}$ que si on utilisait des recherches linéaires précises. En particulier si la formule stable

$$H^{(k+1)} = H - \frac{d y^t H + H y d^t - \left(1 + \frac{y^t H y}{d^t y}\right)}{d^t y}$$

est employée la ~~technique~~ méthode modifiée donne une technique stable pour trouver le minimum d'une fonction quadratique en au plus $n+2$ évaluations de la fonction et du gradient.

Hestenes a noté que la suite de directions engendrées par la formule

$$H^{(k+1)} = H - \frac{H y y^t H}{y^t H y} \qquad k = 1, \dots n-1$$

était indépendante de la grandeur du pas pris à chaque itération. La suite des directions conjuguées engendrées par la nouvelle proposition sera donc identique à celle engendrée par la méthode de Hestenes. Cette méthode a cependant le désavantage que si n pas arbitraires sont pris le long des directions conjuguées alors : $H^{(n)} = 0$

Donc la méthode n'est pas stable au sens de Broyden et demande une deuxième suite de matrices B engendrées par :

$$B^{(k+1)} = B + \frac{d d^t}{d^t y} \qquad k = 0, \dots n-1$$

avec $B^{(0)} = 0$

Pour les fonctions quadratique les deux méthodes sont effectivement équivalents. Mais la proposition de Dixon a l'avantage de pouvoir stocker un vecteur n au lieu d'une matrice n^2
Nous présenterons la technique modifiée et de là un théorème en décélération.
Le théorème étant valable pour les fonctions quadratiques, nous présenterons un algorithme qui pourra s'appliquer aux fonctions non quadratiques

Technique modifiée

Considérons l'effet d'une recherche linéaire non précise sur une fonction quadratique.
Dans cette analyse l'indice * indiquera la valeur qu'aurait la variable si on employait les recherches linéaires.
Au point initial $x^{(0)}$, $H^{(0)}$, f, $g^{(0)}$ sont donnés et donc la direction de recherche

$$p^{(0)} = -H^{(0)} g^{(0)}$$

Si un pas non précis d est pris dans cette direction, d sera proportionnel à d^* et on peut l'écrire :

$$d^{(0)} = \theta\, d^{(0)*}$$

Comme la fonction est quadratique :

$$y^{(0)} = G\, d^{(0)} = \theta\, G\, d^{(0)*} = \theta\, y^{(0)*}$$

et à cause de la nature homogène de la formule :

$$H^{(k+1)} = H + \frac{d\,d^T}{d^T y} - \frac{H y y^T H}{y^T H y} + \varphi v v^T$$

on aura :

$$H^{(1)} = H^{(0)} + \frac{d^0\, d^{0T}}{d^{0T} y^{(0)}} - \frac{H^{(0)} y^0 y^{0T} H^{(0)}}{y^{(0)T} H^{(0)} y^{(0)}} + \varphi v v^T$$

$$H^{(1)*} = H^{(0)*} + \frac{d^{0*}\, d^{0*T}}{d^{0*T} y^{(0)*}} - \frac{H^{(0)*} y^{(0)*} y^{(0)*T} H^{(0)*}}{y^{(0)*T} H^{(0)*} y^{(0)*}} + \varphi v v^T$$

$$H^{(1)} = H^{(0)*} + \frac{\theta\theta\, d^{0*}\, d^{0*T}}{\theta\theta\, d^{0*T} y^{*}} - \frac{\theta\theta\, H^{(0)*} y^{(0)*} y^{(0)*T} H^{(0)*}}{\theta\theta\, y^{(0)*T} H^{(0)*} y^{(0)*}} + \varphi v v^T$$

$$\Rightarrow H^{(1)} = H^{(1)*}$$

Comme $g^{(1)} = g^{(0)} + y^{(0)} = g^{(0)} + \theta y^{(0)*}$

est aussi égal à

$$g^{(1)} = g^{(1)*} + (\theta - 1)\, y^{(0)*}$$

En effet :

$$g^{(1)*} = g^{(0)*} + y^{(0)*} = g^{(0)} + y^{(0)*}$$

$$\Rightarrow g^{(0)} = g^{(1)*} - y^{(0)*}$$

$$\Rightarrow g^{(1)} = g^{(0)} + \theta y^{(0)*}$$

$$= g^{(1)*} - y^{(0)*} + \theta y^{(0)*} =$$

$$= g^{(1)*} + (\theta - 1)\, y^{(0)*}$$

Donc nous avons :

$$H^{(1)} g^{(1)} = H^{(1)*} g^{(1)*} + (\theta - 1) H^{(1)*} y^{(0)*}$$

Par la propriété de Quasi-Newton : nous avons :

$$H^{(1)} y^{(0)*} = d^{(0)*}$$

et donc :

$$H^{(1)} g^{(1)} = H^{(1)*} g^{(1)*} + \frac{(\theta - 1)}{\theta} d^{(0)} \quad \text{car } d^{(0)} = \theta d^{(0)*}$$

Définissons maintenant :

$$p^{(1)} = -H^{(1)} g^{(1)} + \left(\frac{\theta - 1}{\theta}\right) d^{(0)}$$

donc alors : $p^{(1)} = -H^{(1)*} g^{(1)*}$

et donc :

$$p^{(1)} = p^{(1)*}$$

Si nous prenons un pas arbitraire le long de $p^{(1)}$ nous obtenons :

$$d^{(1)} = \theta_1 d^{(1)*}$$

tel que

$$y^{(1)} = \theta_1 \, y^{(1)*}$$

et

$$H^{(2)} = H^{(2)*}$$

En procédant par récurrence, supposons $H^{(k)} = H^{(k)*}$ et

$$d^{(j)} = \theta_j \, d^{(j)*} \quad \text{pour tout } j < k$$

alors :

$$g^{(k)} = g^{(0)} + \sum_{j=0}^{k-1} y^{(j)}$$

ce qui est équivalent à

$$g^{(k)} = g^{(k)*} + \sum_{j=0}^{k-1} (\theta_j - 1) \, y^{(j)*}$$

et de là

$$H^{(k)} g^{(k)} = H^{(k)*} g^{(k)*} + \sum_{j=0}^{k-1} (\theta_j - 1) \, H^{(k)*} \cdot y^{(j)*}$$

les termes marqués avec un * ont les valeurs qu'ils prendraient si les recherches linéaires étaient précises c'est-à-dire que les directions sont conjuguées.

$$H^{(k)*} \cdot y^{(j)*} = d^{(j)*} \quad \text{pour tout } j < k$$

En remplaçant dans l'équation donnant $H^{(k)} g^{(k)}$ on a :

$$H^{(k)} g^{(k)} = H^{(k)*} g^{(k)*} + \sum_{j=0}^{k-1} \left(\frac{\theta_j - 1}{\theta_j} \right) d^{(j)}$$

car $d^{(0)} = \theta \, d^{(0)*}$

signifiant que si nous définissons $p^{(k)}$ par

$$p^{(k)} = - H^{(k)} g^{(k)} + \sum_{j=0}^{k-1} \left(\frac{\theta_j - 1}{\theta_j} \right) d^{(j)}$$

alors $p^{(k)} = p^{(k)*}$

Si nous prenons un pas arbitraire suivant p^k

$$\Rightarrow d^{(k)} = \theta_k \, d^{(k)*}$$

$$\text{et} \quad H^{(k+1)} = H^{(k+1)*}$$

Nous avons montré que ces équations sont vraies pour $k = 1$ et que si elles sont vraies pour un k alors elles le sont pour les valeurs suivantes de k. La preuve par récurrence est donc complète.

Donc si nous définissons $p^{(k)}$ par l'équation

$$p^{k} = -H^{(k)} g^{(k)} + \sum_{j=0}^{k-1} \left(\frac{\theta_{j-1}}{\theta_j}\right) d^{(j)}$$ au lieu de

l'équation

$$p^{(k)} = -H^{(k)} g^{(k)}$$

nous engendrons une suite de directions conjuguées sans les recherches linéaires précises

Donc si avec des recherches linéaires précises, n itérations sont nécessaires pour trouver le minimum alors nous avons :

$$H^{(n)} = H^{(n)*} = G^{-1}$$

et un pas de plus

$$d^{(n)} = p^{(n)} = -H^{(n)} g^{(n)}$$

donnera le minimum de la fonction quadratique

Il est cependant possible pour la procédure de recherche linéaire précise de trouver le minimum en moins de n itérations dans le cas où :

$$g^{(k)*} = 0 \quad \text{et donc} \quad p^{(k)*} = 0 \quad \text{pour un } k < n$$

Avec des pas arbitraires ça arrive quand $p^{(k)}$ s'annule (puisque : $p^{(k)} = p^{(k)*}$) si à cette

s'arrête en k fini : $p^{(k)} = -H^{(k)} g^{(k)}$
alors à partir de l'équation

$$g^{(k)} = g^{(k)*} + \sum_{j=0}^{k-1} (\sigma_j - 1)\, y^{(j)*}$$

$$\Rightarrow \quad p^{(k)} = -H^{(k)*} \sum_{j=0}^{k-1} (\sigma_j - 1)\, y^{(j)*}$$

$$= -\sum_{j=0}^{k-1} (\sigma_j - 1)\, d^{(j)*} \quad \text{car} \quad H^{(k)*} y^{(j)*} = d^{(j)*}$$

Soit $\alpha^{(k)} = 1$ alors la somme de tous les mouvements faits est :

$$\sum_{j=0}^{k-1} d^{(j)} + p^{(k)} = \sum_{j=0}^{k-1} \left(\sigma_j - (\sigma_j - 1)\right) d^{(j)*} = \sum_{j=0}^{k-1} d^{(j)*}$$

Comme ce pas est précisément celui fait dans la recherche linéaire précise, on a donc atteint le minimum

Pour appliquer ces résultats il est nécessaire de connaître σ_j sans une recherche linéaire précise c'est possible puisque :

$$y^{(j)} = \sigma_j\, y^{(j)*} = \sigma_j \left(g^{(j+1)*} - g^{(j)*} \right)$$

$$\Rightarrow \quad y^{(j)T} d^{(j)} = \sigma_j \left(g^{(j+1)T} d^{(j)} - g^{(j)*T} d^{(j)} \right)$$

Puisque

$$g^{(k+1)T} p^{(k)} = 0$$

$$\Rightarrow \quad g^{(j+1)*T} d^{(j)} = 0$$

et à partir de $g^{(k)} = g^{(k)*} + \sum_{j=0}^{k-1} (\sigma_j - 1)\, y^{(j)*}$

$$\rightarrow \quad g^{(j)*T} d^{(j)} = g^{(j)T} d^{(j)}$$

$$\Rightarrow \quad \theta_j = \frac{-y^{(j)T} d^{(j)}}{q^{(j)T} d^{(j)}}$$

En combinant tous ces résultats on peut énoncer le théorème suivant :

Théorème

Considérons le procédé suivant pour une fonction quadratique

(1) ~~Au~~ En un point $x^{(k)}$ où nous avons une matrice $H^{(k)}$ définie ~~nous~~ une direction

$$p^{(k)} = -H^{(k)} g^{(k)} + w^{(k)}$$

où initialement

$$H^{(0)} = I$$

et

$$W^{(0)} = 0$$

(2) Prendre un pas arbitraire d dans la direction p et accorder H par un membre non dégénéré de la famille quasi-Newton et poser :

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + d^{(k)}$$

et

$$W^{(k+1)} = W^{(k)} + \frac{d^{(k)T} g^{(k)}}{d^{(k)T} y^{(k)}} d^{(k)}$$

(3) Continuer de cette manière jusqu'au moment où $p^{(k)}$ s'annule et alors prendre un pas

$$d = -H^{(k)} g^{(k)}$$

On peut alors en tirer :

(1) les directions $p^{(k)}$ engendrées sont les mêmes

directions conjuguées que celles qui seraient obtenues avec des recherches linéaires précises. et sont les mêmes que celles obtenues par la méthode de Davidon

(2) Les matrices $H^{(k)}$ obtenues sont les mêmes que celles qui seraient obtenues avec des recherches linéaires exactes et de là si la formule

$$H^{(k+1)} = H - \frac{d y^{T} H + H y d^{T} - \left(1 + \frac{y^{T} H y}{d^{T} y}\right) d d^{T}}{d^{T} y}$$

est employée la mise à Wolfe au lieu de Broyden.

(3) Le vecteur $p^{(k)}$ s'annule en au plus n itérations comme dans le cas de la recherche linéaire exacte

(4) Le pas final $d = -H^{(n)} g^{(k)}$ donne le minimum d'une fonction quadratique qui peut être obtenu en au plus $n+2$ évaluations de la fonction et du gradient.

Fonctions non-quadratiques

On se demande comment appliquer ce résultat à des fonctions plus générales non linéaires.
Dans ce cas, pour des raisons de stabilité, le pas à chaque itération ne peut pas plus être arbitraire.
On modifie le point (2) du théorème de la façon suivante

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + d^{(k)} \longrightarrow x^{(k+1)} = x^{(k)}$$

$$W^{(k+1)} = W^{(k)} + \frac{d^{(k)t}\, g^{(k+1)}}{d^{(k)t}\, y^{(k)}}\, d^{(k)} \longrightarrow W^{(k+1)} = W^{(k)} + \frac{d^{(k)t}\, g^{(k)}}{d^{(k)t}\, y^{(k)}}\, d^{k}$$

où $d^{(k)}$ est le pas pris, mais rejeté, à la $k^{ème}$ itération et $y^{(k)}$ la différence correspondante du gradient. Le seul changement dans la formule est l'indice du gradient au numérateur.
De cette façon, la théorie reste valide.
Un algorithme a été écrit en se basant sur ce résultat.
Il est décrit de la manière suivante :

Algorithme :

1) Se donner une valeur initiale pour x et une grandeur de pas initiale S de même qu'une constante de précision ε et une limite supérieure du nombre d'évaluations de la fonction.

2) Poser la matrice $H = I$

3) Poser le vecteur $W = 0$

4) Pour $k = 1 \rightarrow n$

4.1 calcule la direction $p^{(k)}$ à partir de

$$p^{(k)} = -H^{(k)} g^{(k)} + w^{(k)}$$

4.2. Si la grandeur $p^{(k)T} g^{(k)} < E$, ce qui implique soit que $p^{(k)}$ est petit soit que la direction de $p^{(k)}$ est vers le haut,

alors continue jusque 5) sans poursuivre $k+1$.

4.3 D'autre part : prendre un pas de grandeur S dans la direction $p^{(k)}$ et calcule la fonction et le gradient en ce point.

4.4. Si $d^{(k)T} y^{(k)} > \varepsilon_1$, alors accorde H à partir de l'équation

$$H^{(k+1)} = H - \frac{\left(d y^T H + H y d^T - \left(1 + \frac{y^T H y}{d^T y}\right) d d^T \right)}{d^T y}$$

$\varepsilon_1 = 10 E\_12$.

4.5 Accorde x et w en utilisant

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + d^{(k)} \text{ et } w^{(k+1)} = w^{(k)} + \frac{d^{(k)T} g^{(k+1)}}{d^{(k)T} y^{(k)}} d^{(k)}$$

ou $$x^{(k+1)} = x^{(k)} \text{ et } w^{(k+1)} = w^{(k)} + \frac{d^{(k)T} g^{(k)}}{d^{(k)T} y^{(k)}} d^{(k)}$$

comme approprié

5) Pose le vecteur $w = 0$

6) Calculer la direction $p^{(k)}$ à partir de $p^{(k)} = -H^{(k)} g^{(k)} + w^{(k)}$

7) Si $-p^{(k)T} g^{(k)} < E$, reposer $H = I$ et retourner en 6)

8) Prendre un pas de longueur s dans la direction $p^{(k)}$ et calculer la valeur de la fonction en ce point.
Effectuer une interpolation parabolique en utilisant la fonction et le gradient en $x^{(k)}$ et la valeur de la fonction en le nouveau point.
Si l'un de ces points satisfait :

$$f < f(x)^{(k)} - \varepsilon_3 d^T g \qquad \varepsilon_3 = 10E-6)$$

alors on accepte $x^{(k+1)}$ comme le meilleur, autrement, on diminue le pas de moitié jusqu'au moment où on trouve un meilleur point.

9) Si la grandeur du pas pris est inférieure à E : Stop

10) Calculer le gradient au point choisi et accorder H suivant la formule donnée au pas 4.4.
Si :

$$d^{(k)T} y^{(k)} > \varepsilon_1 \qquad (\varepsilon_1 = 10E-12)$$

11) Poser S pour la grandeur du pas final pris dans

$$H^{(k+1)} = H + \frac{(d-Hy)(d-Hy)^T}{(d-Hy)^T y}$$

et retourner en 4).

<u>Remarque</u> : L'alg. se termine aussi si on trouve un point tel que la grandeur du gradient g^2 est inférieure à E ou si on dépasse le nombre maximum d'évaluations de f.

Rappel des formules utilisées dans la famille de Quasi-Newton.

Une direction $p^{(k)}$ est engendrée par l'équation :

$$p^{(k)} = -H^{(k)} g^{(k)} \qquad k = 0, 1, \ldots$$

où $g^{(k)}$ est le gradient de f au point $x^{(k)}$.
Un pas est pris dans la direction $\pm p^{(k)}$ pour définir un nouveau point

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \alpha^{(k)} p^{(k)}$$

Le scalaire $\alpha^{(k)}$ est choisi pour assurer au moins que

$$f(x^{(k+1)}) < f(x^{(k)}) - E\alpha^{(k)} p^{(k)T} g^{(k)}$$

pour E donné ou dans les analyses théoriques est choisi pour satisfaire :

$$\min_{\alpha} f(x^{(k)} - \alpha^{(k)} p^{(k)})$$

tel que $g^{(k+1)T} p^{(k)} = 0$
Ayant déterminé le point $x^{(k+1)}$, une matrice hessian inverse $H^{(k+1)}$ est obtenue en incorporant l'information de la dernière itération.
La nouvelle matrice $H^{(k+1)}$ est donnée par :

$$H^{(k+1)} = H + \frac{d d^T}{d^T y} - \frac{H y y^T H}{y^T H y} + \varphi v v^T$$

où $y = g^{(k+1)} - g^{(k)} = \Delta g^{(k)}$; $d = x^{(k+1)} - x^{(k)} = \Delta x^{(k)}$

$$v = \frac{d}{d^T y} - \frac{H y}{y^T H y} \quad ; \quad H^{(0)} = I$$

d'où l'indice k de H, d, y, v, φ a été sous-entendu. Différentes valeurs du scalaire φ correspondent aux différents membres de la famille Quasi-Newton de Broyden

Remarque : φ = 0 correspond à l'algorithme à métrique variable original de D.F.P. qui engendre des directions conjuguées et minimise une fonction quadratique en au plus n itérations

Commentaires

On a testé une série de fonctions pour comparer la performance de cette méthode avec les autres algorithmes
On a pu en conclure que méthode était pleine de succès et efficace.

Conclusions.

Nous avons proposé une forme modifiée d'un algorithme à métrique variable. Pour une fonction quadratique il engendre les mêmes directions conjuguées que celles que nous aurions si on employait la famille de Quasi-Newton avec des recherches linéaires et la méthode de Nesmen sans recherches linéaires. Il converge donc vers le minimum de la fonction quadratique en au plus $n+2$ évaluations de la fonction et de son gradient. Pour une fonction quadratique, la suite de matrices engendrée est identique à celle qui serait obtenue avec des recherches linéaires exactes et de là par exemple si la formule de Broyden-Fletcher-Shanno

est employée, la suite est stable au sens de Broyden. Pour une fonction non quadratique, la méthode combine la propriété de stabilité avec la fin quadratique sans exiger les recherches linéaires. En pratique, la méthode est concurrente avec la plupart des algorithmes sans contraintes valables jusqu'à présent

Chapitre 2

Conditions de convergence pour
l'optimisation sous contraintes.

(tiré de la thèse de
Mélanie L. Lenard
University of Toledo)
[.

Conditions de convergence pour l'optimisation sans contrainte

Introduction

On a proposé de nombreuses techniques pour trouver le minimum sans contraintes d'une fonction non linéaire différentiable. Parmi celles-ci, les "méthodes gradient" demandant uniquement le calcul des dérivées premières. Les techniques de ce genre procèdent d'une manière itérative: partant d'un point de départ dans une direction choisie jusqu'à atteindre un nouveau point qui donne à la fonction une valeur inférieure. Ce nouveau point est alors pris comme point de départ pour l'itération suivante.
Pour démontrer la valeur d'un algorithme donné, il est nécessaire de prouver, au moins, que la suite de points engendrée converge vers l'endroit du minimum d'une classe spéciale de fonctions non-linéaires différentiables.
Plus récemment on a insisté sur l'étude du rapport de convergence à cause de son importance dans les applications pratiques.
En général, on n'obtient jamais la solution exacte. Il est donc intéressant de connaître l'effet de la non précision dans les recherches linéaires pour les propriétés de convergence des algorithmes.
Nous présentons des conditions suffisants pour établir différentes propriétés de convergence des méthodes gradient, qui prennent en considération les erreurs dans les recherches linéaires.

Comme exemple de l'emploi de ces résultats, on montre que méthode gradient conjugué converge linéairement pourvu que l'erreur à chaque itération est convenablement limitée.

Nous considérons des méthodes qui minimisent une fonction objectif $f(x)$; le point $x^{(k+1)}$ est obtenu à partir du point $x^{(k)}$ de l'itération k de la manière suivante :

$$x^{k+1} = x^k + \alpha^k p^k$$ où p^k est la direction

et où α^k est une approximation de α_m^k qui est défini comme suit :

Soit $f^k(\alpha) = f(x^k + \alpha p^k)$ alors :

$$f^k(\alpha_m^k) = \min \{ f^k(\alpha) : \alpha > 0 \}.$$

On suppose que $f(x)$ a des dérivées secondes $\forall$ continues et que la matrice des dérivées secondes $\nabla^2 f(x)$ est définie positive $\Rightarrow f(x)$ est convexe.

On suppose aussi que les valeurs propres du hessien sont uniformément limitées supérieurement et inférieurement par des constantes positives : E et ε.

$$\varepsilon |u|^2 \leq u^T \nabla^2 f(x)\, u \leq E |u|^2$$ pour un vecteur arbitraire u.

<u>Remarque</u>: La différence avec les méthodes gradient vues précédemment réside dans l'introduction d'erreurs dans les recherches linéaires.

Nous donnerons quelques propriétés des méthodes de descente. Nous ne démontrerons qu'un théorème, accordant plus d'importance à la convergence de la méthode où là nous en démontrerons deux.

Propriétés des méthodes de descente

Définition 1 :

Une méthode de descente est un procédé itératif pour trouver le minimum sans contraintes d'une fonction objective $f(x)$, pour laquelle étant donné x^0

$$f(x^{k+1}) < f(x^k) \quad k = 0, 1, \ldots$$

Définition 2

Le vecteur p est une direction de descente à partir du point x si il existe un $\delta > 0$ tel que $\forall \alpha \in [0, \delta]$

$$f(x + \alpha p) < f(x)$$

Lemme 1

Le vecteur p est une direction de descente à partir de x si $\nabla f^T(x)\, p < 0$.

Lemme 2

Pour tout couple de points x et x', si $s = x' - x$ et $y = \nabla f(x') - \nabla f(x)$

alors :

$$\varepsilon |s| \leq |y| \leq E |s| \quad \text{et} \quad s^T y \geq \varepsilon E^{-1} |s| |y|$$

On tient compte des résultats donnés par Wolfe mais en considérant les erreurs dans les recherches linéaires. L'erreur dans la solution du problème de minimisation unidimensionnel, à la $k^{\text{ème}}$ itération sera mesurée par : $$\theta^k = \frac{\nabla f(x^{k+1})^T p^k}{\nabla f(x^k)^T p^k}$$

Ce rapport est indépendant de l'échelle de la fonction ou du vecteur direction. De plus, si x^{k+1} est le lieu exact du minimum, $\theta^k = 0$.

Considérons une fonction $h(\alpha)$ d'une variable, définie pour tout $\alpha \geq 0$.
Supposons : $h(0) = 0$; $h'(0) < 0$ et $\varepsilon \leq h''(\alpha) \leq E$.
Alors : par intégration $\Rightarrow$

$$\int_0^\alpha \varepsilon \, d\alpha \leq \int_0^\alpha h''(t) \, d\alpha \leq \int_0^\alpha E \, d\alpha.$$

$$\varepsilon \alpha \leq h'(\alpha) - h'(0) \leq E\alpha$$

$$\varepsilon \alpha + h'(0) \leq h'(\alpha) \leq E\alpha + h'(0). \qquad (*)$$

Soit $\bar{\alpha}_\ell$ une approximation du minimum de $h(\alpha)$ tel que

$$h'(\bar{\alpha}_\ell) = \theta h'(0) \quad \text{pour} \quad 0 \leq \theta \leq 1$$

A partir de l'équation :

$$\varepsilon \bar{\alpha}_\ell + h'(0) \leq h'(\bar{\alpha}_\ell) \leq E \bar{\alpha}_\ell + h'(0).$$

en remplaçant $h'(\bar{\alpha}_\ell)$ par $\theta h'(0)$ on trouve.

$$-\frac{(1-\theta) h'(0)}{E} \leq \bar{\alpha}_\ell \leq -\frac{(1-\theta) h'(0)}{\varepsilon}.$$

En intégrant l'équation $(*)$

$$\int_0^\alpha (\varepsilon \alpha + h'(0)) \, d\alpha \leq \int_0^\alpha h'(\alpha) \, d\alpha \leq \int_0^\alpha (E\alpha + h'(0)) \, d\alpha$$

$$\Rightarrow \underbrace{\frac{\varepsilon}{2}\alpha^2 + [h'(0)]\alpha}_{q(\alpha)} \le h(\alpha) - \underbrace{h(0)}_{=0} \le \underbrace{\frac{1}{2}E\alpha^2 + (h'(0))\alpha}_{Q(\alpha)}$$

$$q(\alpha) \le h(\alpha) \le Q(\alpha).$$

Soient $\bar\alpha_q$ tel que $q'(\bar\alpha_q) = \theta\, q'(0)$

et $\bar\alpha_Q$ tel que $Q'(\bar\alpha_Q) = \theta\, Q'(0)$.

Dérivons $q(\alpha)$ au point $\bar\alpha_q$

$$\Rightarrow \varepsilon\bar\alpha_q + h'(0) = \theta\, q'(0).$$

$$\varepsilon\bar\alpha_q = \theta\, q'(0) - h'(0)$$

$$q'(0) = \underbrace{\varepsilon\alpha}_{=0} + h'(0) = h'(0)$$

puisque $\alpha = 0$.

$$\varepsilon\bar\alpha_q = \theta\, h'(0) - h'(0) = (\theta - 1)\, h'(0)$$

$$\bar\alpha_q = \frac{(\theta-1)\, h'(0)}{\varepsilon} = -\frac{(1-\theta)\, h'(0)}{\varepsilon}$$

En dérivant $Q(\alpha)$ on obtient de même :

$$\bar\alpha_Q = -\frac{(1-\theta)\, h'(0)}{E}$$

$$\Rightarrow -\frac{(1-\theta)\, h'(0)}{E} \le \bar\alpha_h \le -\frac{(1-\theta)\, h'(0)}{\varepsilon}$$

$$\Rightarrow \bar\alpha_Q \le \bar\alpha_h \le \bar\alpha_q.$$

On sait que $q(t)$ est monotone décroissante sur $(0, \bar\alpha_q)$ on peut donc employer :

$$\begin{cases} q(t) \le h(t) \le Q(t) \\ \bar\alpha_Q \le \bar\alpha_h \le \bar\alpha_q \end{cases}$$

pour obtenir :

$$\begin{cases} h(\bar{\alpha}_h) = q(\bar{\alpha}_h) \geq q(\bar{\alpha}_q) \\ h(\bar{\alpha}_h) \leq h(\bar{\alpha}_Q) \leq Q(\bar{\alpha}_Q). \end{cases}$$

En combinant ces équations : nous obtenons :

$$q(\bar{\alpha}_q) \leq h(\bar{\alpha}_h) \leq Q(\bar{\alpha}_Q)$$

ou : $\frac{1}{2}\, \varepsilon(\bar{\alpha}_q)^2 + [h'(0)]\,\bar{\alpha}_q \leq h(\bar{\alpha}_h) \leq$

$$\frac{1}{2}\, E(\bar{\alpha}_Q)^2 + [h'(0)]\,\bar{\alpha}_Q.$$

$$\frac{1}{2}\,\varepsilon\,\frac{(1-\theta)^2[h'(0)]^2}{\varepsilon^2} - [h'(0)]\,\frac{(1-\theta)[h'(0)]}{\varepsilon} \leq h(\bar{\alpha}_h) \leq$$

$$\frac{1}{2}\,E\,\frac{(1-\theta)^2[h'(0)]^2}{E^2} - [h'(0)]\,\frac{(1-\theta)[h'(0)]}{E}$$

en remplaçant $\bar{\alpha}_q$ et $\bar{\alpha}_Q$ par leur valeurs respectives

$$-\frac{1}{2}\,\varepsilon^{-1}(1-\theta)^2[h'(0)]^2 \leq h(\bar{\alpha}_h) \leq -\frac{1}{2}\,E^{-1}(1-\theta)^2[h'(0)]^2.$$

Supposons maintenant que $h(\alpha) = f(x+\alpha p) - f(x)$

$$\Rightarrow h'(\alpha) = \nabla f^T(x+\alpha p)\,p$$

$$h''(\alpha) = p^T\,\nabla^2 f(x+\alpha p)\,p.$$

$h(0) = 0$

$h'(0) < 0$ si p = une direction de descente à partir de x.

En utilisant les limites des valeurs propres du Hessian :

$$\varepsilon\,|p|^2 \leq h''(\alpha) \leq E\,|p|^2$$

A partir de

$$-\frac{(1-\theta)\,k'(0)}{\varepsilon} \leq \bar{\alpha}_k \leq -\frac{(1-\theta)\,k'(0)}{\varepsilon}$$

on obtient :

$$\varepsilon\,|p|^2\,\bar{\alpha}_k \leq -1\,(1-\theta)\,\nabla f^T(x)\,p \leq \varepsilon\,|p|^2\,\bar{\alpha}_k$$

Posons : $\bar{x} = x + \bar{\alpha}_k p$

=> à partir de :

$$-\frac{1}{2}\,\varepsilon^{-1}(1-\theta^2)\left[k'(0)\right]^2 \leq k(\bar{\alpha}_k) \leq -\frac{1}{2}\,\varepsilon^{-1}(1-\theta^2)\left[k'(0)\right]^2$$

$$\Rightarrow -\frac{1}{2}\,\varepsilon^{-1}(1-\theta^2)\left[\nabla f^T(x)\,p\right]^2 |p|^{-2} \leq f(\bar{x}) - f(x) \leq$$

$$-\frac{1}{2}\,\varepsilon^{-1}(1-\theta^2)\left[\nabla f^T(x)\,d\right]^2 |d|^{-2}$$

Nous avons par cela demontré le lemme suivant :

<u>Lemme 3.</u>

Soit $\bar{x} = x + \bar{\alpha} p$ où $\nabla f^T(x)\,p < 0$ et

$\nabla f^T(\bar{x})\,p = \theta\,\nabla f^T(x)\,p$

$0 \leq \theta < 1.$

et soit $\cos\psi = \nabla f^T(x)\,p * |\nabla f(x)|^{-1}\,|p|^{-1}$

alors :

$$\frac{1}{2}\,\varepsilon^{-1}(1-\theta^2)\,|\nabla f(x)|^2 \cos^2\psi \leq f(x) - f(\bar{x})$$

$$\leq \frac{1}{2}\,\varepsilon^{-1}(1-\theta^2)\,|\nabla f(x)|^2 \cos^2\psi$$

Remarque : Explication de $(1-\theta^2)$:

$$1-\theta \leq 1+\theta \quad (1-\theta)(1-\theta) \leq (1-\theta)(1+\theta)$$

$$(1-\theta)^2 \leq (1-\theta^2).$$

Commentaire:

Nous avons demandé que la dérivée orientée à l'endroit du minimum approché ait le même signe que la dérivée orientée au commencement de la recherche en imposant la condition $\theta \geq 0$. Donc nous avons exigé que l'approximation du minimum se trouve entre le point de départ et l'endroit du minimum exact. Par conséquent, nous sommes sûrs que la valeur de la fonction au minimum approché sera inférieure à la valeur de la fonction au départ de la recherche. De plus, la condition $\theta \geq 0$ est compatible avec l'opinion générale acceptée parmi les praticiens à savoir que les meilleurs résultats sont obtenus par sous-estimation, plutôt que par sur-estimation, de la distance du minimum dans la recherche de direction.

Lemme 4.

Si ξ est la position du minimum de $f(x)$ alors:
$$\frac{1}{2} E^{-1} |\nabla f(x)|^2 \leq f(x) - f(\xi) \leq \frac{1}{2} \varepsilon^{-1} |\nabla f(x)|^2.$$

Théorème 1

Si une méthode de descente est telle que $1-(\theta^k)^2 \geq c > 0$ et $\cos^2 t^k \geq r > 0$ pour certaines constantes c et r, pour $k = 0, 1 \dots$ alors:

la suite de points engendrée par la méthode converge vers la solution dans un rapport qui est au plus linéaire.

Théorème 2

Si une méthode de descente est telle que $1-(\theta^{k})^2 \geq c > 0$ pour une certaine constante c, $k=0,1..$ alors, la suite de points engendrées converge vers la solution ssi

$$\sum_{j=1}^{\infty} \cos^2 t^j = \infty$$

Lemme 5

Soit $r(\alpha)$ une fonction continue de α telle que $r(\alpha)>0$ $\forall\ \alpha>0$. Soit $\{\alpha_j\}$ une suite qui converge vers α_m. Supposons que si la suite $\{r(\alpha_j)\}$ converge vers zéro, alors la suite $\{|\nabla f(x+\alpha_j p)|\}$ converge vers zéro. Alors, soit, il est possible de satisfaire l'inégalité $\theta(\alpha_j) < r(\alpha_j)$ pour une valeur finie de j, soit, la suite de points $\{x+\alpha_j p\}$ converge vers z la position du minimum de $f(x)$.

Convergence de la méthode gradient conjugué

Nous donnons une illustration de l'emploi du rapport de convergence pour la méthode des gradients conjugués.
Les méthodes gradient conjugués utilisent comme direction de recherche une combinaison linéaire du gradient et d'un autre vecteur de l'itération précédente.

$$p^{k+1} = a^k p^k + b^k g^{k+1}$$

où a^k et b^k sont des scalaires et g^{k+1} le gradient de la fonction
Pour simplifier les notations, on marquera d'une astérisque les quantités de $k+1$ ème itération et sans indice celles de la k ème itération.

$$\Rightarrow \quad p^* = a p + b g^*$$

Supposons que la fonction soit quadratique.
a et b sont choisis tels que p^* soit conjugué à p en tenant compte de la matrice $G = \nabla^2 f$.

$$\Rightarrow \quad \frac{a}{b} = -\frac{g^{*T} G p}{p^T G p}$$

En effet : condition de conjugaison : $p^{*T} G p = 0$

$$\Rightarrow \quad p^{*T} G p = a p^T G p + b g^{*T} G p = 0$$

$$\rightarrow \quad a p^T G p = - b g^{*T} G p$$

$$\rightarrow \quad \frac{a}{b} = -\frac{g^{*T} G p}{p^T G p}.$$

Posons : $y = g^* - g = \Delta g$.

$$\Rightarrow \quad \frac{a}{b} = -\frac{g^{*T} y}{p^T y}$$

Comme nous nous intéressons uniquement à la direction de p^* et non à sa grandeur, par conséquent, nous pouvons prendre $b = -1$.

$$\Rightarrow \quad a = \frac{g^{*T} y}{p^T y} \qquad (= \text{méthode G.})$$

Sous la supposition d'une minimisation exacte :

$$g^{*T} p = 0$$

Puisque p est une combinaison linéaire de g et de la direction de recherche précédente :

$$g^T p = -|g|^2$$

$$\Rightarrow \quad a = \frac{g^{*T} y}{|g|^2}$$

Avant d'~~exag~~ examiner les propriétés de convergence de la méthode G, développons quelques formules géométriques.

Posons : $\begin{cases} \cos\theta = g^T p\,|g|^{-1}|p|^{-1} \\ \cos\psi = g^{*T} p\,|g^*|^{-1}|p|^{-1} \end{cases}$

($\cos\psi = 0$ pour une minimisation exacte.)

et $$T = \frac{a|p|}{b|g^*|}$$

Multiplions : $p^* = a p + b g^*$ par g^*

$$\Rightarrow \quad g^{*T} p^* = a\, g^{*T} p + b\,|g^*|^2$$

$$= b|q^*|^2(1 + T\cos\varphi)$$

(En effet :

$$b|q^*|^2 + b|q^*|^2 T\cos\varphi =$$

$$b|q^*|^2 + \cancel{b}\,\cancel{|q^*|^2}\frac{a\,\cancel{|p|}}{\cancel{b}\,\cancel{|q^*|}}\, q^{*T} p\, \cancel{|q^*|^{-1}}\,\cancel{|p|^{-1}}$$

$$= b|q^*|^2 + a\, q^{*T} p \quad)$$

Donc : $b^{-1}\cos\psi^* = |p^*|^{-1}|q^*|(1 + T\cos\varphi)$

(En effet :

$$b^{-1}\cos\psi^* = |p^*|^{-1}|q^*|(1 + \frac{a|p|}{b|q^*|}\, q^{*T} p\, |q^*|^{-1}|p|^{-1})$$

$$= |p^*|^{-1}|q^*| + \frac{|p^*|^{-1}|q^*|\, a\, |a|\, q^{*T} p\, |q^*|^{-1}|p|^{-1}}{b|q^*|}$$

$$= |p^*|^{-1}|q^*| + \frac{|p^*|^{-1}\, a\, q^{*T} p}{b|q^*|}$$

$$b^{-1} q^{*T} p^*\, |q^*|^{-1}|p^*|^{-1} = \frac{(b|q^*|\,|p^*|^{-1}|q^*|) + (|p^*|^{-1} a\, q^{*T} p)}{b|q^*|}$$

$$b|q^*|\, b^{-1} q^{*T} p^*\, |q^*|^{-1}|p^*|^{-1} =$$

$$b|q^*|\,|p^*|^{-1}|q^*| + a|p^*|^{-1} q^{*T} p$$

$$q^{*T} p^*\, |p^*|^{-1} = b|q^*|\,|p^*|^{-1}|q^*| + a|p^*|^{-1} q^{*T} p$$

$$\rightarrow q^{*T} p^* = b|q^*|^2 + a\, q^{*T} p \quad \Rightarrow \text{CQFD} \quad).$$

Prenons maintenant le carré de $p^* = ap + bq^*$.

$$\rightarrow |p^*|^2 = a^2|p|^2 + 2ab\,p g^{*T} + b^2|g^*|^2$$

$$\frac{|p^*|^2}{|g^*|^2} = b^2 + \frac{2ab\,p g^{*T}}{|g^*|^2} + a^2\frac{|p|^2}{|g^*|^2}$$

$$= b^2\left(1 + 2\frac{a}{b}\frac{g^{*T}p}{|g^*|^2} + \frac{a^2}{b^2}\frac{|p|^2}{|g^*|^2}\right)$$

Puisque $b = -1$

$$\Rightarrow \frac{|p^*|^2}{|g^*|^2} = 1 - 2a\frac{g^{*T}p}{|g^*|^2} + a^2\frac{|p|^2}{|g^*|^2}$$

or $T = -\dfrac{a|p|}{|g^*|}$ (avec $b=-1$)

$$T\cos\varphi = \frac{a|p|}{b|g^*|}\, g^{*T}p\,|g^*|^{-1}|p|^{-1}$$

$$= \frac{a}{b}\frac{g^{*T}p}{|g^*|^2} = -a\frac{g^{*T}p}{|g^*|^2} \text{ dans ce cas}$$

$$\Rightarrow \frac{|p^*|^2}{|g^*|^2} = 1 + 2T\cos\varphi + T^2$$

$$= (1+|T|)^2$$

La mesure de l'erreur à une dimension est:

$$\theta = \frac{g^{*T}p}{g^T p}.$$

Pour prouver la convergence linéaire pour la méthode 6 on impose la condition sur θ (cf. théorème 1)

$\rightarrow$ nous exigeons:

$$(g^{*T}g)\,\theta < (1-\eta)|g^*|^2$$

Puisque $g^{*t} p^* < 0$ est satisfaite si

$$g^{*t}(a.p + b g^*) < 0$$

$$a g^{*t} p + b g^{*t} g^* < 0$$

$$\frac{a}{b} g^{*t} p + g^{*t} g^* < 0$$

$$-\frac{g^{*t} y}{p^t y} g^{*t} p + g^{*t} g^* < 0$$

$$-|g^*|^2 + g^{*t} y (p^t y)^{-1} (g^{*t} p) < 0$$

$$-\left[|g^*|^2 + \frac{\theta}{1-\theta} |g^*|^2 - \frac{\theta}{1-\theta} g^{*t} g\right] < 0$$

ou $-(1-\theta)^{-1}(|g^*|^2 - \theta g^{*t} g) < 0.$,

une CNS pour que p^* soit une direction de descente est la suivante :

$$(g^{*t} g)\,\theta < |g^*|^2.$$

Théorème 3.

La suite de points engendrée par la méthode 6 converge linéairement vers le minimum de $f(x)$, si, à chaque itération $k = 0, 1, 2 \ldots$ l'erreur θ^k satisfait l'inégalité :

$$\theta^k (g^{k+1})^t g^k < (1-\eta)|g^{k+1}|^2 \quad , 0 \le \theta^k \le 1-c$$

où c et η sont des constantes

$$0 < c < 1 \text{ et } 0 < \eta < 1.$$

Démonstration

Considérons la quantité : $T = \frac{a}{b}\frac{|p|}{|g^*|}$

$$= -\frac{g^{*T}y}{p^T y}\frac{|p|}{|g^*|} = -\frac{g^{*T} y\,|p|\,|y|}{|g^*|\,|y|\,p^T y}$$

$$|T| \leq \frac{|p|\,|y|}{p^T y}\,|\cos(g^*, y)|$$

Utilisons les limites de valeurs propres du hessien, ε et E

$$\Rightarrow |T| \leq \varepsilon^{-1} E.$$

Considérons ensuite :

$$1 + T\cos\varphi = 1 + \frac{a}{b}\frac{g^{*T}p}{|g^*|^2}$$

$$= 1 + \frac{g^{*T}y}{p^T y}\frac{g^{*T}p}{|g^*|\,|g^*|}$$

$$= 1 + \frac{g^{*T}g}{p^T y}\frac{|p|}{|g^*|}\frac{g^{*T}p}{|g^*|\,|p|}$$

$$= 1 + (1-\theta)^{-1}\,\theta\, g^{*T}y\,|g^*|^{-2}$$

$$= (1-\theta)^{-1}\left(1 - \theta\, g^{*T}g\,|g^*|^{-2}\right)$$

Par hypothèse :

$$1 + T\cos\varphi \geq \frac{\eta}{c}$$

Substituons $\frac{|p^*|^2}{|g^*|^2} \leq (1 + |T|)^2$ et $|T| \leq \varepsilon^{-1} E$

et $1 + T\cos\varphi > \frac{\eta}{c}$ dans

l'équation :

$$b^{-1}\cos\psi^* = |p^*|^{-1}|g^*|(1+\tau\cos\varphi)$$

nous devons :

$$-\cos\psi^* > \eta\,[c(1+\delta^{-1}\varepsilon)]^{-1}$$

Par le théorème 1, la suite engendrée par la méthode converge vers le minimum de $f(x)$ en un rapport qui est au plus linéaire.

<u>Théorème 4.</u>

La valeur d'une fonction objective quadratique décroît à chaque pas d'une méthode gradient conjugué au moins aussi fort qu'un pas de descente très incliné pris au même point si la méthode gradient conjugué satisfait la relation :

$$|p^k|^2\,|g^k|^{-2}\cos^2\psi^k > 1 \qquad \forall k = 0, 1, 2 \ldots$$

<u>Démonstration.</u>

Par le même raisonnement que pour le lemme 3. nous avons :

$$f(\bar{x}) - f(x) = -\frac{(1-\sigma^4)\,[\nabla f^T(x)\,p]^2}{2\,p^T(\nabla^2 f)\,p}$$

En posant $G = \nabla^2 f$

$$\Rightarrow p^{*T} G p^* = g^{*T} G g^* - 2a\,g^{*T} G p + a^2 p^T G p$$

En élevant p^* au carré et en multipliant par G

En utilisant la relation :

$$\frac{a}{b} = -\frac{g^{*T} G p}{p^T G p}$$

$$\Rightarrow p^{*T} G p^* = g^{*T} G g^* - 2a g^{*T} G p + a^2 p^T G p$$

$$= g^{*T} G g^* - 2\frac{g^{*T} G p}{p^T G p} g^{*T} G p + \frac{(g^{*T} G p)^2}{(p^T G p)^2} p^T G p$$

$$= g^{*T} G g^* - 2\frac{(g^{*T} G p)^2}{p^T G p} + \frac{(g^{*T} G p)^2}{p^T G p}$$

$$= g^{*T} G g^* - \frac{(g^{*T} G p)^2}{p^T G p}.$$

$$\Rightarrow p^* G p^* > g^* G g^*.$$

Considérons maintenant :

$$(g^{*T} p^*)^2 = |g^*|^4 \underbrace{|p^*|^2 \cos^2 \psi^* |g^*|^{-2}}_{>1}$$

Alors, par hypothèse :

$$(g^{*T} p^*)^2 > |g^*|^4 \quad \text{car}$$

A cause de :
$$\begin{cases} f(\bar{x}) - f(x) = -\dfrac{(1-\sigma^2)[\nabla f^T(x) p]^2}{2p^T(\nabla^2 f)p} \\ p^* G p^* > g^* G g^* \\ (g^{*T} p^*)^2 > |g^*|^4. \end{cases}$$

nous avons le résultat demandé.

Conclusion.

Nous avons étendu la théorie de convergence pour les méthodes gradient au cas où les erreurs sont introduites dans la recherche linéaire atteinte à chaque itération.
En particulier, nous avons établi des conditions suffisantes pour qu'une méthode donnée converge de converger en un rapport linéaire.
Étant donné cela, ~~nous~~ nous avons montré que la méthode G convergeait en un rapport linéaire.
On espère que ces conditions simplifieront le procédé de la preuve de la convergence pour les autres méthodes gradient réalisées sans l'exigence d'une ~~r~~ recherche linéaire exacte.
Les résultats de ce type apportent pour la solution d'un problème plus grand quelques principes pour l'optimisation non linéaire tels que de nouveaux algorithmes puissent être évalués sans la nécessité pour des démonstrations spécialisées de leurs ~~p~~ propriétés.

Elle a comparé les trois méthodes : la méthode de Fletcher-Reeves, la méthode G et la méthode de Davidon-Fletcher-Powell appliquées aux problèmes suivants :

Banana Valley :

Minimiser : $F(x_1, x_2) = 100\,(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$

avec comme point de départ : $(-1, 2, 1.0)$
La solution est $(1, 1)$

Helical Valley

Minimiser : $F(x_1, x_2, x_3) = 100\,\{[x_3 - 10\,\theta(x_1, x_2)]^2$

$$+ [r(x_1, x_2) - 1]^2 + x_3^2$$

où

$2\pi\,\theta(x_1, x_2) = \operatorname{arctang}(x_2/x_1) \quad x_1 > 0$
$\qquad = \pi + \operatorname{arctang}(x_2/x_1) \quad x_1 < 0$
et $r(x_1, x_2) = (x_1^2 + x_2^2)^{1/2}$
dans l'intervalle : $-\pi/2 < 2\theta.\pi < 3\pi/2$
c'est-à-dire : $2.5 < x_3 < 7.5$
Le point de départ est : $(-1, 0, 0)$
Le minimum est $(1, 0, 0)$

Les limites d'erreur sont les suivantes :

• Méthode de Fletcher-Reeves : $\theta^k < 1 - \eta$
avec $0 < \eta < 1$ et $\varepsilon = 1 - \eta$

• Méthode 6 : $\theta^k < 1-\eta \qquad 0<\eta<1$

et $\left[(\theta^k)^T g^{k+1}\right]\theta^k < (1-c)|g^{k+1}|^2 \qquad 0<c<1$

avec $T = 1-c$.

• La méthode de Davidon Fletcher Powell :

$$\theta^k \leq 1-\eta$$

$$\theta^k \leq R|g^k|^2 / (g^k)^T H^k g^k$$

$$\theta^k \leq S(g^k)^T H^k g^k / |g^k|^2$$

$$\theta^k \leq T(g^{k+1})^T H^k g^{k+1} / |g^k|^2$$

$$RT \leq 1-c.$$

A chaque itération, on pose :

$$\varepsilon = \min\{\varepsilon_0,\ R|g|^2/g^T H g,\ S g^T H g / |g|^2\}$$

Les résultats ci-après nous donnent le nombre d'évaluations de fonctions nécessaires dans chaque méthode. Les nombres entre parenthèses donnent la valeur de ε ~~et~~. On a repris dans cette table les meilleurs résultats obtenus quand on traite les méthodes séparément.

	Banana Valley	Helical Valley.
Davidon - Fletcher - Powell	136 (.5)	131 (.1)
Méthode G	170 (.5)	.361 (.9)
Fletcher - Reeves	.527 (.9)	261 (.1)

On peut constater que la méthode de Davidon-Fletcher-Powell donne les meilleurs résultats. Vient ensuite la méthode G pour le problème de Banana Valley et enfin la méthode de Fletcher-Reeves.

Pour le ~~[illegible]~~ problème Helical Valley la méthode G donne les plus mauvais résultats.

Chapitre 3

Modifications de la méthode gradient conjugué.

La méthode gradient conjugué avec minimisation linéaire non exacte.

Introduction

On peut minimiser $f(x^k)$ sur le long de $x^k + \alpha p^k$ à chaque itération de façon à atteindre la convergence. Mais comme cette précision est impossible techniquement il est important de savoir qu'on peut maintenir cette convergence sous certaines approximations.

. On peut arrêter la minimisation linéaire quand

$$\left| \frac{\langle -g^{(k+1)}, p^{(k)} \rangle}{\| g^{(k+1)} \| \| p^{(k)} \|} \right| \leq \varepsilon$$

pour un $\varepsilon > 0$ suffisamment petit.
Le nombre d'itérations varie suivant le choix de ε. Ce choix est donc important.
Il n'existe pas encore de procédés systématiques pour déterminer une valeur de ε.
Dans ce qui va suivre, nous proposons plusieurs manières de choisir ε et nous montrons leurs propriétés.

Soit $f(.) : E^n \longrightarrow E^1$ une fonction de classe C^2 sur un domaine D ouvert convexe contenant $S(x^{(0)})$, $S(x^{(0)})$ étant limité et le spectre de $Q(x)$ étant limité inférieurement par $\mu > 0$ et supérieurement par λ pour tout $x \in S(x^{(0)})$

Soient les scalaires σ et c tels que $0 < \sigma < 1$

$0 < c < \frac{1}{2}$

Soit de plus : $\varepsilon^k = \left| \dfrac{\langle -g^{k+1}, p^k \rangle}{\| g^{k+1} \| \| p^k \|} \right|$

et $\delta^k = c \dfrac{\langle -g^k, p^k \rangle}{\| p^k \|^2}$,

δ^k donnant une limite inférieure pour τ^k.

Nous donnerons des méthodes modifiées de la méthode du gradient conjugué et nous donnerons des théorèmes relatifs au comportement de ces méthodes modifiées.

Modifications de la méthode gradient conjugué (CG

Méthode 1. (MCG méthode 1)

On choisit α^k tel que l'inégalité suivante soit satisfaite à savoir :

$$\varepsilon^k < \min\left\{\left(\frac{r}{\lambda}\right)^{3/2}\frac{\langle -g^k, p^k\rangle}{\|g^{k+1}\|\,\|p^k\|}, \frac{\theta\|g^k\|^2}{\|g^{k+1}\|\,\|p^k\|}\right\}$$

C'est l'unique modification que nous ferons. Cette inégalité est équivalente à :

$$|\langle -g^{k+1}, p^k\rangle| < \min\left\{\left(\frac{r}{\lambda}\right)^{3/2}\langle -g^k, p^k\rangle, \theta\|g^k\|^2\right\}$$

car $\varepsilon = \left|\dfrac{\langle -g^{k+1}, p^k\rangle}{\|g^{k+1}\|\,\|p^k\|}\right|$

Méthode 2 (MCG méthode 2).

La minimisation linéaire est stoppée quand les conditions suivantes sont satisfaites :

i) $\alpha^k \leq \delta^k$

ii) $f(x^k + \alpha^k p^k) \leq f(x^k + \delta^k p^k)$

iii) $\varepsilon^k < \min\left\{\left(\frac{r}{\lambda}\right)^{1/2}\frac{\langle -g^k, p^k\rangle}{\|g^{k+1}\|\,\|p^k\|}, \frac{\theta\|g^k\|^2}{\|g^{k+1}\|\,\|p^k\|}\right\}$

Ces conditions impliquent que la $k^{ième}$ grandeur du pas α^k doit être au moins aussi grande que δ^k et que la minimisation linéaire est arrêtée quand

$|\cos \varphi|$ (ou φ = l'angle entre p^k et g^{k+1}) devient plus petit que

$$\frac{\left(\frac{r}{d}\right)^{3/2} \langle -g^k, p^k \rangle}{\| g^{k+1} \| \| p^k \|} \quad \text{et} \quad \frac{\| g_i^k \|^2}{\| g^{k+1} \| \| p^k \|}$$

Méthode 3 (MCG méthode 3)

La minimisation linéaire est arrêtée quand :

i) $\alpha^k > \rho^k$

ii) $f(x^k + \alpha^k p^k) \leq f(x^k + \rho^k p^k)$

iii) $\varepsilon^k \leq \dfrac{\theta \| g^k \|^2}{\| g^{k+1} \| \| p^k \|}$

Cette méthode ne diffère de la méthode 2 que par la 3ème condition. Elle ne demande pas la connaissance du rapport $\frac{r}{d}$.

La condition iii) est équivalente à :

$$|\langle -g^{k+1}, p^k \rangle| \leq \theta \| g^k \|^2$$

Commentaires :

Nous constatons que la méthode 1 demande le moins de ~~(suppositions)~~ restrictions mais elle donne aussi le moins d'informations.
La méthode 2 nous en donne plus mais elle nécessite la connaissance du rapport $\frac{r}{d}$.
La méthode 3 nous donne des résultats semblables mais elle ne demande pas la connaissance de ce rapport. Elle semble à première vue la plus préférable des 3.

Nous nous proposons de montrer dans la suite que ces 3 méthodes sont bien définies. Nous allons atteindre ce but par des lemmes.

Lemme 1

Les méthodes 1, 2, 3 ne satisfont l'inégalité que si $\|g^k\| \neq 0$, alors :

$$< -g^k, p^k > > 0 \quad \forall k$$

Démonstration :

Pour $k = 0$ c'est évident.

Soit $k \geq 1$

$$\rightarrow \; < -g^k, p^k > = \|g^k\|^2 - \beta^{k-1} < g^k, p^{k-1} >$$

Si $< g^k, p^{k-1} > \leq 0$ ça le fait. Nous allons donc supposer que $< g^k, p^{k-1} > > 0$.

Nous savons que :

$$|< -g^{k+1}, p^k >| < \min\left\{\left(\frac{4}{5}\right)^{3/2} < -g^k, p^k >, \theta \|g^k\|^2\right\}$$

et $|< -g^{k+1}, p^k >| \leq \theta \|g^k\|^2$

$$\Rightarrow \beta^{k-1} < g^k, p^{k-1} > \leq \beta^{k-1} \theta \|g^{k-1}\|^2 = \theta \|g^k\|^2$$

$$\Rightarrow \; < -g^k, p^k > > 0 \quad \forall k$$

Lemme 2

Soit α^{k*} la longueur du pas qui donne le minimum suivant la direction $x^k + \alpha\, p^k$
Si $\|g^k\| \neq 0$ alors, dans les méthodes 1, 2, 3
α^{k*} satisfait l'inégalité

$$\frac{1}{\lambda}\,\frac{\langle -g^k, p^k\rangle}{\|p^k\|^2} \leq \alpha_k^{k*} \leq \frac{1}{r}\,\frac{\langle -g^k, p^k\rangle}{\|p^k\|^2} \leq \frac{1}{r}\,\frac{\|g^k\|}{\|p^k\|}$$

Démonstration

Soit $\varphi(\alpha) = \langle g(x^k + \alpha p^k), p^k\rangle$
Par le lemme 1 : $\varphi(0) = \langle g^k, p^k\rangle < 0$
et $\varphi'(\alpha) = \langle p^k, G(x^k + \alpha p^k)\, p^k\rangle$ implique que

$$r\,\|p^k\|^2 \leq \varphi'(\alpha) \leq \lambda\,\|p^k\|^2 \quad \text{pour tout } \alpha$$

$$\begin{cases} \varphi(0) = \langle g^k, p^k\rangle < 0 \\ r\,\|p^k\|^2 \leq \varphi'(\alpha) \leq \lambda\,\|p^k\|^2 \quad \text{pour tout } \alpha \end{cases}$$

impliquent que

$$\frac{1}{\lambda}\,\frac{\langle -g^k, p^k\rangle}{\|p^k\|^2} \leq \alpha^{k*} \leq \frac{1}{r}\,\frac{\langle -g^k, p^k\rangle}{\|p^k\|^2}$$

Finalement par l'inégalité de Schwartz.

$$\frac{1}{r}\,\frac{\langle -g^k, p^k\rangle}{\|p^k\|^2} \leq \frac{1}{r}\,\frac{\|g^k\|}{\|p^k\|}.$$

Lemme 3

[La méthode 1 est bien définie

Démonstration :

Soient $\{x^k\}$, $\{g^k\}$ et $\{p^k\}$ les suites engendrées par la méthode 1.
Soit α^{k*} le premier zéro de $\frac{df}{d\alpha}(x^k+\alpha p^k)$
Le procédé pour obtenir x^{k+1} à partir de x^k est d'employer une méthode qui engendre une suite $\{\alpha^{kj}\}$ avec $\alpha^{kj} \longrightarrow \alpha^{k*}$ mais d'arrêter après un nb fini d'itérations
Nous allons montrer que pour une suite $\{\alpha^{kj}\}$ ayant la propriété ci-dessus, $\exists\ N^k < \infty$ tel que α^{kN_k} satisfait les conditions de la méthode 1
Supposons qu'à la $k^{\text{ième}}$ itération, $g^k = 0$
$\Rightarrow$ on a atteint le minimum et on arrête.
Supposons que $g^k \neq 0 \quad \forall k$
Soit :

$$\sigma^k = \frac{1}{2}\min\left\{\left(\frac{\mu}{\lambda}\right)^{3/2}\frac{<-g^k, p^k>}{\|p^k\|^2},\ \theta\frac{\|g^k\|^2}{\|p^k\|^2}\right\}$$

$$\sigma^k = 0 \underset{\text{ssi}}{\Longleftrightarrow} g^k = 0$$

donc $\sigma^k > 0 \quad \forall i$.

Soit $\alpha > 0$. Alors :

$g(x^k + \alpha^{k*}p^k) = g(x^k+\alpha p^k) + (\alpha^{k*}-\alpha)\,Q(\eta)\,p^k$
pour un certain $\eta \in L(x^k + \alpha^{k*}p^k,\ x^k+\alpha p^k)$
Conséquence :

$$|\alpha^{k*} - \alpha| = \frac{|<-g(x^k+\alpha p^k), p^k>|}{<p^k, Q(\eta)p^k>} \geq \frac{|<-g(x^k+\alpha p^k), p^k>|}{\lambda\|p^k\|^2}$$

Alors :

$$\frac{|\langle -g(x^k+\alpha p^k), p^k\rangle|}{\alpha \|p^k\|^2} \leq \frac{1}{\alpha} \min\left\{\left(\frac{r}{\alpha}\right)^{3/2} \frac{\langle -g^k, p^k\rangle}{\|p^k\|^2}, \sigma \frac{\|g^k\|^2}{\|p^k\|^2}\right\}$$

Conséquence :

$$|\langle -g(x^k+\alpha p^k), p^k\rangle| < \min\left(\frac{r}{\alpha}\right)^{3/2} \langle -g^k, p^k\rangle, \sigma \|g^k\|^2\}$$

ce qui est équivalent à :

$$|\langle -g^{k+1}, p^k\rangle| < \min\left\{\left(\frac{r}{\alpha}\right)^{3/2} \langle -g^k, p^k\rangle, \sigma \|g^k\|^2\right\}.$$

Pour chaque procédé de minimisation linéaire pour lequel $\alpha^{kj} \longrightarrow \alpha^{k*}$ donnant un $\varepsilon > 0$, $\exists N > 0$ tel que $|\alpha^{kj} - \alpha^{k*}| < \varepsilon \quad \forall j \geq N$ soit vrai

donc :

$\exists$ un $N^k > 0$ tel que $|\alpha^{kj} - \alpha^{k*}| < \sigma^k \quad \forall j \geq N^k$

et la minimisation linéaire est arrêtée quand $j = N^k$.

Lemme 4

[La méthode ε est bien définie

Démonstration :

Soient les suites $\{x^k\}$, $\{g^k\}$ et $\{p^k\}$ engendrées par la méthode ε.

Soit α^{k*} le 1er zéro de $\frac{d}{d\alpha} f(x^k+\alpha p^k)$ et supposons que

$$g^k \neq 0 \quad \forall k.$$

$\Rightarrow \forall \alpha \in (\alpha^{k*} - \sigma^k, \alpha^{k*} + \sigma^k)$ comme dans le lemme 3 on aura :

$$|<-g(x^k+\alpha p^k), p^k>| < \min\{\left(\frac{r}{1}\right)^{3/2} <-g^k, p^k>, \sigma\|g^k\|^2\}$$

Par le théorème de la moyenne :

$$f(x^k+\delta^k p^k) = f(x^k)+\delta^k <g^k, p^k> + \frac{(\delta^k)^2}{2} <p^k, Q(\eta^k)p^k>$$

pour un certain $\eta^k \in L(x^k, x^k+\delta^k p^k)$

Conséquence :

$$f(x^k+\delta^k p^k) \leq f(x^k) - c\frac{<g^k, p^k>^2}{\|p^k\|^2} + \frac{1}{2}\frac{c^2<g^k, p^k>^2 \cdot \|p^k\|}{\|p^k\|^4}$$

$$< f(x^k) - c\frac{<g^k, p^k>^2}{\|p^k\|^2}$$

Conséquence :

$$f(x^k+\delta^k p^k) < f(x^k).$$

A nouveau, par le théorème de la moyenne nous aurons :

$$f(x^k+\delta^k p^k) = f(x^k+\alpha^{k*}p^k) + \frac{1}{2}(\delta^k-\alpha^{k*})^2 * <p^k, Q(\psi^k)p^k>$$

pour $\psi^k \in L(x^k+\delta^k p^k, x^k+\alpha^{k*}p^k)$

Par le lemme 2 et la définition de δ^k $(\alpha^k \geq \delta^k)$

$$\Rightarrow \delta^k < \alpha^{k*}$$

$$\Rightarrow f(x^k+\delta^k p^k) > f(x^k+\alpha^{k*}p^k)$$

Soit $\bar{\alpha}^k > \delta^k$ tel que

** $f(x^k+\bar{\alpha}^k p^k) = f(x^k+\delta^k p^k)$

Par le théorème de la moyenne :

** $f(x^k+\bar{\alpha}^k p^k) = f(x^k+\alpha^{k*}p^k) + \frac{(\bar{\alpha}^k-\alpha^{k*})^2}{2} <p^k, Q(\tau^k)p^k>$

pour un

$$\tau^k \in L(x^k+\alpha^{k*}p^k, x^k+\bar{\alpha}^k p^k)$$

** $\Delta^k = f(x^k+\delta^k p^k) - f(x^k+\alpha^{k*}p^k)$

$\Delta^k > 0 \quad \forall k.$

Les trois relations marquées de $**$ impliquent :

$$\frac{\mu}{2}(\bar{\alpha}^k - \alpha^{k*})^2 \leq \Delta^k \leq \frac{\lambda}{2}(\bar{\alpha}^k - \alpha^{k*})^2$$

Conséquence : $\sqrt{\frac{2\Delta^k}{\lambda}} \leq |\bar{\alpha}^k - \alpha^{k*}| \leq \sqrt{\frac{2\Delta^k}{\mu}}$

Puisque f est convexe : pour $\forall \alpha \in [\delta^k, \alpha^{k*} + \sqrt{\frac{2\Delta^k}{\mu}}]$ nous avons :

$$f(x^k + \alpha p^k) \leq f(x^k + \delta^k p^k) \quad \text{qui est égal à}$$
$$f(x^k + \alpha^k p^k) \leq f(x^k + \delta^k p^k)$$

Donc, chaque α tel que

$$\alpha \in (\alpha^{k*} - \sigma^k, \alpha^{k*} + \sigma^k) \cap [\delta^k, \alpha^{k*} + \sqrt{\frac{2\Delta^k}{\mu}}]$$

satisfait les équations.

$$\begin{cases} \alpha^k \geq \delta^k \\ f(x^k + \alpha^k p^k) \leq f(x^k + \delta^k p^k) \\ \varepsilon^k < \min\left\{ \left(\frac{\mu}{\lambda}\right)^{3/2} \frac{\langle -g^k, p^k\rangle}{\|g^{k+1}\| \|p^k\|}, \frac{\theta \|g^k\|^2}{\|g^{k+1}\| \|p^k\|} \right\} \end{cases}$$

de la méthode 2.

Par chaque procédé de minimisation linéaire pour lequel $\alpha^{kj} \longrightarrow \alpha^{k*}$ étant donné $\varepsilon > 0$, $\exists N > 0$ tel que $\alpha^{kj} \in (\alpha^{k*} - \varepsilon, \alpha^{k*} + \varepsilon)$ $\forall j \geq N$

$\Rightarrow \exists$ ~~N~~ : $0 < \hat{N}^k < \infty$ tel que α appartienne à l'intervalle :

$$(\alpha^{k*} - \sigma^k, \alpha^{k*} + \sigma^k) \cap [\delta^k, \alpha^{k*} + \sqrt{\frac{2\Delta^k}{\mu}}] \quad \forall j \geq \hat{N}^k$$

<u>Lemme 5</u>

[La méthode 3 est bien définie

Démonstration

Supposons que $g_i \neq 0 \quad \forall i$

Exactement comme dans le lemme 4

$\forall \alpha$ tel que

$$\alpha \in \left[\delta^k, \alpha^{k*} + \sqrt{\frac{2\Delta^k}{r}} \right]$$

nous avons :

$$f(x^k + \alpha p^k) \leq f(x^k + \delta^k p^k)$$

ce qui est égal à

$$f(x^k + \alpha^k p^k) \leq f(x^k + \delta^k p^k)$$

Soit

$$w^k = \frac{\theta \| g^k \|^2}{\lambda \| p^k \|^2}$$

alors $w^k = 0 \iff g^k = 0$. donc $w^k > 0 \quad \forall k$

Exactement le même que dans le lemme 3,

donc, $\forall \alpha \in [\alpha^{k*} - w^k, \alpha^{k*} + w^k]$

$$\frac{|\langle -g(x^k + \alpha p^k), p^k \rangle|}{\lambda \| p^k \|^2} < \frac{\theta}{\lambda} \frac{\| g^k \|^2}{\| p^k \|^2}$$

Conséquence : $|\langle -g(x^k + \alpha p^k), p^k \rangle| < \theta \| g^k \|^2$

qui est équivalent à :

$$|\langle -g^{k+1}, p^k \rangle| \leq \theta \| g^k \|^2$$

Donc chaque α tel que

$$\alpha \in \left[\delta^k, \alpha^{k*} + \sqrt{\frac{2\Delta^k}{r}} \right] \cap \left[\alpha^{k*} - \frac{\theta}{\lambda} \frac{\| g^k \|^2}{\| p^k \|^2}, \alpha^{k*} + \frac{\theta}{\lambda} \frac{\| g^k \|^2}{\| p^k \|^2} \right]$$

satisfait

$$\begin{cases} \alpha^k \geq \delta^k \\ f(x^k + \alpha^k p^k) \leq f(x^k + \delta^k p^k) \\ \varepsilon^k \leq \dfrac{\theta \| g^k \|^2}{\| g^{k+1} \| \| p^k \|} \end{cases}$$

qui sont les équations de la méthode 3.
Puisque $\alpha^{kj} \longrightarrow \alpha^{k*}$ il existe $0 < \bar{N}^k < \infty$ tel que
$\alpha \in \left[\delta^k , \alpha^{k*} + \sqrt{\frac{2\Delta^k}{\mu}} \right] \cap \left[\alpha^{k*} - \frac{\sigma}{\lambda} \frac{\|g^k\|^2}{\|p^k\|^2} , \alpha^{k*} + \frac{\sigma}{\lambda} \frac{\|g^k\|^2}{\|p^k\|^2} \right]$
soit vrai $\forall \alpha^{kj}$, $j \geq \bar{N}^k$ et la minimisation linéaire est arrêtée quand $j = \bar{N}^k$

Convergence des 3 méthodes gradient conjugué modifié avec une minimisation linéaire non exacte.

<u>Théorème 1.</u>

Soit $f(\cdot) : E^n \longrightarrow E^1$ de classe C^2 sur un domaine D ouvert convexe contenant $S(x^0)$; $S(x^0)$ est limité et le spectre de $Q(x)$ limité inférieurement par $\mu > 0$ et supérieurement par λ $\forall x \in S(x^0)$
alors : la méthode 1 est stable c'est-à-dire que si $\|g^k\| \neq 0 \Rightarrow f(x^{k+1}) < f(x^k)$ $\forall k$

<u>Démonstration</u>

Soit $x^{k+1*} = x^k + \alpha^{k*} p^k$ le point minimal suivant la direction $x^k + \alpha p^k$ et $x^{k+1} = x^k + \alpha^k p^k$
alors : $< g^{k+1*}, p^k > = 0$
Par le théorème de la moyenne

$$f(x^{k+1}) - f(x^{k+1*}) = \frac{1}{2} (\alpha^k - \alpha^{k*})^2 < p^k, Q(\xi) p^k >$$

$$\xi \in L(x^{k+1}, x^{k+1*})$$

$$\leq \frac{1}{2} \lambda (\alpha^k - \alpha^{k*})^2 \|p^k\|^2$$

Nous avons semblablement :

$$f(x^k) - f(x^{k+1*}) \geq \frac{1}{2} \mu (\alpha^{k*})^2 \, \|p^k\|^2$$

Par le lemme 2 :

$$\alpha^{k*} \geq \frac{1}{\lambda} \frac{\langle -g^k, p^k\rangle}{\|p^k\|^2}$$

Conséquence : $f(x^k) - f(x^{k+1*}) \geq \frac{1}{2} \frac{\mu}{\lambda^2} \frac{\langle -g^k, p^k\rangle^2}{\|p^k\|^2}$

Maintenant : $g^{k+1*} = g^{k+1} + (\alpha^{k*} - \alpha^k)\, Q(\eta)\, p^k$

pour un $\eta \in L(x^{k+1*}, x^{k+1})$

Alors :

$$|\alpha^{k*} - \alpha^k| = \frac{|\langle -g^{k+1}, p^k\rangle|}{\langle p^k, Q(\eta) p^k\rangle} \leq \frac{\varepsilon^k \, \|g^{k+1}\| \, \|p^k\|}{\mu \, \|p^k\|^2}$$

Par hypothèse : $\varepsilon^k < \left(\frac{\mu}{\lambda}\right)^{3/2} \frac{\langle -g^k, p^k\rangle}{\|g^{k+1}\| \|p^k\|}$

$$|\alpha^{k*} - \alpha^k| < \frac{1}{\lambda}\left(\frac{\mu}{\lambda}\right)^{1/2} \frac{\langle -g^k, p^k\rangle}{\|p^k\|^2}$$

ou : $\frac{1}{2} \lambda |\alpha^{k*} - \alpha^k|^2 \, \|p^k\|^2 < \frac{1}{2} \frac{\mu}{\lambda^2} \frac{\langle -g^k, p^k\rangle^2}{\|p^k\|^2}$

(en élevant au carré et en multipliant par un $\frac{1}{2}$)

En substituant cette équation dans :

$$f(x^k) - f(x^{k+1*}) \geq \frac{1}{2} \frac{\mu}{\lambda^2} \frac{\langle -g^k, p^k\rangle^2}{\|p^k\|^2}$$

$$\Rightarrow f(x^k) - f(x^{k+1*}) > \frac{1}{2} \lambda |\alpha^{k*} - \alpha^k|^2 \, \|p^k\|^2$$
$$> \frac{1}{2} \lambda (\alpha^{k*} - \alpha^k)^2 \, \|p^k\|^2$$

$$\left\{\begin{array}{l} f(x^{k+1}) - f(x^{k+1*}) \leq \frac{1}{2} \lambda (\alpha^k - \alpha^{k*})^2 \, \|p^k\|^2 \\ \text{et} \quad f(x^{k*}) - f(x^{k+1*}) > \frac{1}{2} \lambda (\alpha^{k*} - \alpha^k)^2 \, \|p^k\|^2 \end{array}\right.$$

$$\Rightarrow f(x^k) - f(x^{k+1*}) > f(x^{k+1}) - f(x^{k+1*}) \Rightarrow f(x^k) > f(x^{k+1})$$

C.Q.F.D.

Théorème 2

Soit $f(.) : E^n \longrightarrow E^1$ de classe C^2 sur un domaine D ouvert convexe contenant $S(x^0)$; $S(x^0)$ est limité et le spectre de $Q(x)$ limité inférieurement par $\mu > 0$ et supérieurement par λ, $\forall x \in S(x^0)$
Soit z le minimum unique de $f(x)$; alors, la méthode $\mathcal{C}$ a les propriétés :

i) $f(x^k)$ converge vers $f(z)$

ii) $\{x^k\} \longrightarrow z$.

Démonstration :

Comme dans le théorème 1, tout algorithme qui satisfait la relation : $|\langle -g^{k+1}, p^k \rangle| \leq \theta \, \|g^k\|^2$ est stable.
Donc la méthode $\mathcal{C}$ est stable

i) Supposons que $f(x^k)$ ne converge pas vers $f(z)$
Par le théorème 1, $\exists$ un $m > 0$ tel que $\|g^k\| \geq m \ \forall k$
Alors : $\|p^k\|^2 = \|g^k\|^2 + (\beta^{k-1})^2 \|p^{k-1}\|^2 + 2\beta^{k-1} \langle -g^k, p^{k-1} \rangle$

$$\leq \|g^k\|^2 + (\beta^{k-1})^2 \|p^{k-1}\|^2 + 2\beta^{k-1} |\langle -g^k, p^{k-1} \rangle|$$

$$= \|g^k\|^2 + (\beta^{k-1})^2 \|p^{k-1}\|^2 + 2\beta^{k-1} \varepsilon^{k-1} \|g^k\| \|p^{k-1}\|$$

$$\left(\text{par } \varepsilon^k = \left| \frac{\langle -g^{k+1}, p^k \rangle}{\|g^{k+1}\| \|p^k\|} \right| \right)$$

$$< \|g^k\|^2 + (\beta^{k-1})^2 \|p^{k-1}\|^2 + 2\theta\beta^{k-1} \|g^{k-1}\|^2$$

$$\left(\text{par } \varepsilon^k \leq \frac{\theta \, \|g^k\|^2}{\|g^{k+1}\| \|p^k\|} \right)$$

$$= \|g^k\|^2 + (\beta^{k-1})^2 \|p^{k-1}\|^2 + 2\theta \, \|g^k\|^2$$

Conséquemment :

$$\|p^k\|^2 \leq (1 + 2\theta) \|g^k\|^2 + (\beta^{k-1})^2 \|p^{k-1}\|^2$$

Donc :

$$\|p^k\|^2 \leq (1+2\theta)\|g^k\|^2 + (\beta^{k-1})^2\left((1+2\theta)\|g^{k-1}\|^2 + (\beta^{k-1})^2\|p^{k-1}\|^2\right)$$

$$\leq (1+2\theta)\left(\|g^k\|^2 + (\beta^{k-1})^2\|g^{k-1}\|^2 + \dots + (\beta_{k-1})^2(\beta^{k-2})\dots(\beta^0)^2\|g^0\|\right)$$

$$= (1+2\theta)\sum_{i=0}^{k}\frac{\|g^k\|^4}{\|g^i\|^2}$$

d'où : $\|p^k\|^2 \leq \dfrac{(1+2\theta)}{m^2} M^4 (k+1) \quad \forall k$

avec M = borne supérieure de $\|g^k\|$ sur $S(x^0)$

Considérons maintenant :

$$\langle -g^k, p^k\rangle = \|g^k\|^2 + \beta^{k-1}\langle -g^k, p^{k-1}\rangle$$
$$\geq \|g^k\|^2 - \beta^{k-1}\theta\|g^{k-1}\|^2$$

$$(\text{car } |\langle -g^{k+1}, p^k\rangle| \leq \theta\|g^k\|^2)$$

Conséquence :

$$\langle -g^k, p^k\rangle \geq (1-\theta)\|g^k\|^2 \geq (1-\theta)m^2$$

En substituant

$$\begin{cases} \|p^k\|^2 \leq \dfrac{(1+2\theta)M^4}{m^2}(k+1) \\ \text{et } \langle -g^k, p^k\rangle \geq (1-\theta)\|g^k\|^2 \geq (1-\theta)m^2 \end{cases}$$

dans :

$$d^k = c\,\frac{\langle -g^k, p^k\rangle}{\|p^k\|^2}$$

$$\Rightarrow d^k \geq c\,\frac{(1-\theta)m^2\,m^2}{(1+2\theta)M^4(1+k)} \geq c\,\frac{(1-\theta)m^4}{(1+2\theta)M^4}\left(\frac{1}{k+1}\right)$$

Par le théorème de la moyenne nous avons :

$$\|g^k - g(x^k + \alpha p^k)\| \leq \alpha\lambda\|p^k\|$$

d'où : $\forall \alpha$ tel que $0 \leq \alpha \leq d^k$ nous avons :

$$\| g^k - g(x^k + \alpha p^k) \| \leq \delta c \frac{\langle -g^k, p^k \rangle}{\| p^k \|}$$

D'où : $|\langle -g^k, p^k \rangle - \langle -g(x^k + \alpha p^k), p^k \rangle| \leq \delta c \langle -g^k, p^k \rangle$

ou :

$$\langle -g(x^k + \alpha p^k), p^k \rangle \geq (1 - \delta c) \langle -g^k, p^k \rangle \qquad 0 \leq \alpha \leq \delta^k$$

Posons :

$$\Delta^k(\alpha) = f(x^k) - f(x^k + \alpha p^k)$$

Alors : $\Rightarrow \dfrac{d}{d\alpha} \Delta^k(\alpha) = \langle -g(x^k + \alpha p^k), p^k \rangle$

Soit α^{k*} le dernier zéro non négatif de $\dfrac{d}{d\alpha} \Delta^k(\alpha)$

$$\Rightarrow \frac{d}{d\alpha} \Delta^k(\alpha) \begin{cases} = \langle -g^k, p^k \rangle \geq (1-\theta) m^2 > 0 & \text{en } \alpha = 0 \\ \geq (1 - \delta c) \langle -g^k, p^k \rangle > 0 & \text{en } \alpha = c^k \\ = 0 & \text{en } \alpha = \alpha^{k*} \\ = \langle -g^{k+1}, p^k \rangle & \text{en } \alpha = \alpha^k \end{cases}$$

Considérons $\langle -g^{k+1}, p^k \rangle$

<u>1er cas</u> : $\langle -g^{k+1}, p^k \rangle > 0$ Puisque on a supposé $f(x)$ convexe : $\delta^k \leq \alpha^k \leq \alpha^{k*}$

Conséquence :

$$\Delta^k(\alpha^k) = \int_0^{\alpha^k} \langle -g(x^k + \alpha p^k), p^k \rangle \, d\alpha$$

$$\geq \int_0^{\delta^k} \langle -g(x^k + \alpha p^k), p^k \rangle \, d\alpha$$

<u>2ème cas</u> : $\langle -g^{k+1}, p^k \rangle \leq 0 \Rightarrow \delta^k < \alpha^{k*} \leq \alpha^k$

$$\Delta^k(\alpha^k) = \int_0^{\delta^k} \langle -g(x^k + \alpha p^k), p^k \rangle \, d\alpha$$

$$+ \int_{\delta^k}^{\alpha^{k*}} \langle -g(x^k + \alpha p^k), p^k \rangle \, d\alpha + \int_{\alpha^{k*}}^{\alpha^k} \langle -g(x^k + \alpha p^k), p^k \rangle \, d\alpha$$

Alors:

$$\int_{\delta^k}^{\alpha^{k*}} \langle -g(x^k+\alpha p^k), p^k\rangle d\alpha = -f(x^k+\alpha^{k*}p^k) + f(x^k+\delta^k p^k)$$

et

$$\int_{\alpha^{k*}}^{\alpha^k} \langle -g(x^k+\alpha p^k), p^k\rangle d\alpha = -f(x^k+\alpha^k p^k) + f(x^k+\alpha^{k*} p^k)$$

Conséquence:

$$\int_{\delta^k}^{\alpha^{k*}} \langle -g(x^k+\alpha p^k), p^k\rangle d\alpha + \int_{\alpha^{k*}}^{\alpha^k} \langle -g(x^k+\alpha p^k), p^k\rangle d\alpha =$$

$$f(x^k+\delta^k p^k) - f(x^k+\alpha^k p^k) \geq 0 \text{ par hypothèse.}$$

D'où, en tenant compte du signe de $\langle -g(x^k+\alpha p^k), p^k\rangle$ dans $\alpha^{k*} \leq \alpha \leq \alpha^k$ nous avons:

$$\Delta^k(\alpha^k) \geq \int_0^{\delta^k} \langle -g(x^k+\alpha p^k), p^k\rangle d\alpha$$

Donc: $\Delta^k(\alpha^k) \geq \int_0^{\delta^k} \langle -g(x^k+\alpha p^k), p^k\rangle d\alpha$

$$\text{or } \langle -g(x^k+\alpha p^k), p^k\rangle \geq (1-\lambda c)\langle -g^k, p^k\rangle$$

$$\Rightarrow \Delta^k(\alpha^k) \geq \int_0^{\delta^k} \langle -g(x^k+\alpha p^k), p^k\rangle d\alpha$$

$$> (1-\lambda c)\,\delta^k \langle -g^k, p^k\rangle$$

En substituant les équations:

$$\begin{cases} \langle -g^k, p^k\rangle \geq (1-\theta)\|g^k\|^c \geq (1-\theta)m^c \\ \delta^k \geq \dfrac{c(1-\theta)\,m^4}{(1+2\theta)M^4}\,\dfrac{1}{k+1} \end{cases}$$

dans:

$$\Delta^k(\alpha^k) > (1-\lambda c)\,\delta^k \langle -g^k, p^k\rangle$$

$$\Rightarrow \Delta^k(\alpha^k) > (1-2c)\,\frac{c(1-\theta)m^4}{(1+c\theta)M^4}\,\frac{1}{k+1}\,(1-\theta)\,m^2$$

$$> \underbrace{\frac{c(1-2c)(1-\theta)^2 m^6}{(1+2\theta)M^4}}_{C^0}\,\frac{1}{k+1}$$

$$> C^0\,\frac{1}{k+1}$$

c-à-dire: $f(x^k) - f(x^k + \alpha p^k) > C^0 \frac{1}{k+1}$

$$\iff f(x^k + \alpha p^k) - f(x^k) < -C^0 \frac{1}{k+1}$$

$$\iff f(x^{k+1}) - f(x^k) < -C^0 \frac{1}{k+1}$$

Conséquence: $f(x^{k+1}) < f(x^k) - C^0 \sum_{j=0}^{k} \frac{1}{j+1}$

$\sum_{j=1}^{k} \frac{1}{j+1} \longrightarrow \infty$ quand $k \longrightarrow \infty$ $\Rightarrow$ cette équation implique que $f(x^k)$ est non limité ce qui contredit le fait que $f(x^k)$ est limité inférieurement puisque $f(x^k)$ est continue sur un domaine limité $\Rightarrow$ $f(x^k)$ converge vers $f(z)$.

c) Puisque $f(x^k) \longrightarrow f(z)$ étant donné $\varepsilon > 0$, il existe un $N > 0$ tel que $f(x^k) - f(z) < \varepsilon \quad \forall k > N$

Or le théorème de Taylor nous donne:

$$f(x^k) = f(z) + \langle g(z), x^k - z \rangle + \frac{1}{2}\langle x^k - z, Q(\zeta)(x^k - z)\rangle$$

$$\geq f(z) + \frac{1}{2} r \|x^k - z\|^2 \quad (\text{où } \zeta \in \mathcal{L}(x^k, z).)$$

$$\left.\begin{aligned} f(x^k) - f(z) &< \varepsilon \\ f(x^k) &\geq f(z) + \frac{1}{2} r \|x^k - z\|^2 \end{aligned}\right\} \Rightarrow \varepsilon > \frac{1}{2} r \|x^k - z\|^2$$

c'est à dire :

$$\| x^k - z \| < \sqrt{\frac{2}{r}}\ \varepsilon \qquad \forall k > N$$

C'est vrai pour tout $\varepsilon \Rightarrow x^k \xrightarrow[\text{fortement}]{} z$.

Théorème 3

Soit $f(x) : E^n \longrightarrow E^1$ de classe C^2 sur un domaine D ouvert et convexe contenant $S(x^0)$; $S(x^0)$ borné et le spectre de $Q(x)$ est borné inférieurement par $r > 0$ et supérieurement par δ, $\forall x \in S(x^0)$.
Soit z le minimum unique de $f(x)$. Alors, la méthode 3 a les propriétés suivantes :

i) $\{ f(x^k) \} \longrightarrow f(z)$

ii) $\{ x^k \} \xrightarrow[\text{fortement}]{} z$

Démonstration

i) Par le théorème de la moyenne :

$$f(x^k + \rho^k p^k) = f(x^k) + \rho^k \langle g^k, p^k \rangle + \frac{\rho^{k^2}}{2} \langle p^k, Q(t^k) p^k \rangle$$

pour un certain $t^k \in L(x^k, x^k + \rho^k p^k)$

A partir de l'hypothèse faite sur $Q(x)$ et de

$$\rho^k = c \, \frac{\langle -g^k, p^k \rangle}{\| p^k \|^2}$$

$$\Rightarrow f(x^k + \rho^k p^k) \leq f(x^k) - \frac{c}{2} \, \frac{\langle -g^k, p^k \rangle^2}{\| p^k \|^2}$$

Conséquence : $f(x^k + \rho^k p^k) \leq f(x^k)$.

$$\left\{\begin{array}{l} f(x^k + \delta^k p^k) \leq f(x^k) \\ f(x^k + \alpha^k p^k) \leq f(x^k + \delta^k p^k) \end{array}\right. \Rightarrow f(x^{k+1}) < f(x^k)$$

=> la méthode 3 est valable

Si $f(x^k) \xrightarrow{\not\,} f(z)$, par le lemme 1 $\exists\, m > 0$ tel que $\|g^k\| \geq m > 0 \quad \forall k$. Alors, comme pour le théorème 2 nous avons :

$$f(x^{k+1}) \leq f(x^0) - \frac{c(1-2c)(1-\theta)^2 m^4}{(1+2\theta_0) M^4} \sum_{j=0}^{k} \frac{1}{j+1}$$

qui contredit le fait que $f(x)$ est limitée inférieurement sur $S(x^0) \Rightarrow f(x^k) \longrightarrow f(z)$

On peut démontrer de la même façon que dans le théorème 2 que $x^k \xrightarrow{\text{fort}} z$.

Conclusions.

La méthode 1 demande le moins de restrictions sur les conditions d'arrêt mais on peut uniquement démontrer qu'elle est valable tandis que pour les méthodes 2 et 3 on peut montrer plus qu'elles sont convergentes.

On espère que le rapport $\left|\frac{\langle -g^{k+1}, p^k\rangle}{\|g^{k+1}\|\,\|p^k\|}\right| < \varepsilon$ amène rapidement à la convergence pour un ε suffisamment petit.

Inconvénients : 1°) on doit calculer le gradient suivant la direction $x^k + \alpha p^k$

2°) on demande soit L, soit M/c.

La pratique de ces méthodes est limitée.

Partie 3

La recherche uni-dimensionnelle est évitée
la méthode par des matrices duales

[13], [14].

Méthode des matrices duales pour minimiser une fonction

Introduction

Nous traitons cette méthode sur le modèle des fonctions quadratiques dont la forme générale est la suivante :

$$f(x) = a + b^t x + \frac{1}{2} x^t c x$$

où $f(x)$, a sont des scalaires
b = vecteur $(n \times 1)$
c = matrice $n \times n$ symétrique, supposée définie positive ou semi-définie
la matrice (c, b) et la matrice c ont le même rang m avec $m \leq n$

Le gradient de cette fonction est :

$$g(x) = b + cx$$; c'est un vecteur $n \times 1$.

Si h est un point minimal on a la propriété suivante :

$$g(h) = b + ch = 0$$

Cette méthode est caractérisée par l'emploi de deux matrices à chaque itération :

- une matrice telle qu'une suite de directions linéairement indépendantes soit engendrée sans tenir compte de la longueur du pas employé
- l'autre matrice telle que, lorsque la première matrice ne donne pas un

gradient linéairement indépendant des précédents, elle engendre un déplacement conduisant au point minimal.

Donc, la recherche uni-dimensionnelle sera évitée. Pour une fonction quadratique, le point minimal sera obtenu en au plus $n+1$ itérations et puisque la recherche uni-dimensionnelle n'est pas employée, le nombre total d'évaluations du gradient pour la convergence sera au plus $n+2$

Nous présentons 3 algorithmes de la méthode et nous donnons aussi un algorithme inverse qui emploie seulement une matrice.
Nous donnons aussi quelques considérations en ce qui concerne les applications de cette méthode à une fonction quadratique et non quadratique.

<u>Intérêt de cette méthode</u> : Puisque la recherche uni-dimensionnelle est dépassée, un gain considérable de calculs peut être atteint.

<u>Principe de base</u>

Il existe n gradients linéairement indépendants et chaque gradient peut s'exprimer comme une combinaison linéaire des n gradients linéairement indépendants.
Le principe de base d'une méthode itérative qui conduit à la solution de $g(h) = b + Ch = 0$

en au plus $(n+1)$ itérations sans utiliser les recherches uni-dimensionnelles est la suivante :

Plaçons-nous à la $i^{\text{ème}}$ itération $(i \geq 0)$:

$$g_i = g(x_i)$$
$$\Delta x_i = x_{i+1} - x_i$$
$$\Delta g_i = g_{i+1} - g_i = c\,\Delta x_i$$

à cause de la relation : $g(x) = b + cx$.
Il existe n différences gradient linéairement indépendantes et chaque gradient ou différence gradient peut être exprimé comme une combinaison linéaire de n différences gradient linéairement indépendantes
Prenons x_0 comme point de départ et prenons aussi une suite de déplacements non nuls

$$\Delta x_0, \Delta x_1, \ldots \Delta x_{i-1}, \Delta x_i$$

qui se trouvent dans un espace gradient-related et qui sont conjugués mutuellement par rapport à la matrice c c'est à dire tel que

$$\Delta x_i^T c\, \Delta x_j = 0 \qquad 0 \leq j \leq i-1$$

On peut donc obtenir une suite de points :

$$x_0, x_1, \ldots x_i$$

et $g_0, g_1, \ldots g_i$ la suite des gradients donc, la suite

$$\Delta g_0, \Delta g_1, \Delta g_2 .$$

peut être évalué.
Puisque les déplacements sont dans un espace gradient related on aura au maximum n itérations. Les déplacements sont linéairement indépendants à cause de la relation :

$$\Delta x_i^T c\, \Delta x_j = 0$$

donc les différences gradient sont aussi linéairement indépendantes.

Supposons maintenant qu'à la fin de la $l^{ème}$ itération g_l soit une combinaison linéaire des différences gradient précédentes

$$g_l = \sum_{r=0}^{l-1} h_r \Delta g_r \quad \text{avec } h_r \text{ un coefficient scalaire}$$

$$\Delta x_j^t g_l = \sum_{r=0}^{l-1} h_r \Delta x_j^t \Delta g_r \qquad 0 \leq j \leq l-1$$

On obtient donc pour h_j l'expression suivante :

$$h_j = \frac{\Delta x_j^t g_l}{\Delta x_j^t \Delta g_j}$$

car nous avons les relations : $\Delta g_i = g_{i+1} - g_i = C \Delta x_i$

et : $\Delta x_i^t C \Delta x_j = 0 \qquad 0 \leq j \leq i-1$

$$g_l = \sum_{r=0}^{l-1} \left(\Delta x_r^t g_l / \Delta x_r^t \Delta g_r \right) \Delta g_r$$

$$\Rightarrow g_l - \sum_{r=0}^{l-1} \left(\frac{\Delta g_r \Delta x_r^t}{\Delta x_r^t \Delta g_r} \right) g_l = 0 \quad (\text{car } \Delta g_i = C \Delta x_i)$$

$$\Rightarrow g_l - \sum_{r=0}^{l-1} \left(\frac{C \Delta x_r \Delta x_r^t}{\Delta x_r^t \Delta g_r} \right) g_l = 0$$

$$\Rightarrow g_l - C \left(\sum_{r=0}^{l-1} \frac{\Delta x_r \Delta x_r^t}{\Delta x_r^t \Delta g_r} \right) g_l = 0$$

et le déplacement $\Delta x_l = x_{l+1} - x_l$ est pris comme étant égal à :

$$\Delta x_l = - \sum_{r=0}^{l-1} \left(\frac{\Delta x_r \, \Delta x_r^+}{\Delta x_r^+ \, \Delta g_r} \right) g_l$$

on aura :

$$g_{l+1} = g_l + c \Delta x_l = 0$$

car $g_l + c \Delta x_l = 0$

A ce moment le point x_{l+1} est un point minimal de la fonction.

l est au plus égal à m, donc, un point minimal satisfaisant l'équation $g(h) = b + ch = 0$ est obtenu en au plus $m+1$ itérations.
Or comme $m \leq n$, on peut établir que la solution est obtenue en au plus $n+1$ itérations.

Méthode des matrices duales

La méthode est caractérisée par l'emploi simultané de deux matrices.

1°/ <u>Matrice A</u> (matrice de base)

Cette matrice est telle que : $\Delta x_i = - \alpha_i A_i g_i$ satisfasse la condition de conjugaison $\Delta x_i^+ c \, \Delta x_j = 0$ sans tenir compte du choix de la longueur des pas scalaires non nuls α_i

Mécanisme

Considérons un mécanisme défini comme suit :

$$p_i = A_i\, g_i \qquad \Delta x_i = -\alpha_i\, p_i \qquad x_{i+1} = x_i + \Delta x_i$$

où p_i est un vecteur $n \times 1$
A_i une matrice $n \times n$ symétrique
α_i un scalaire.

⚠ : α_i peut être une valeur imposée non nulle (permet donc de dépasser la recherche unidimensionnelle).

Partant du point initial x_0, une suite de directions p_i et de points x_i peuvent être engendrés si la suite des matrices symétriques A_i est ~~assignée~~ connue.

Grâce aux relations suivantes :

$$\begin{cases} \Delta g_i = C\, \Delta x_i \\ p_i = A_i\, g_i \\ \Delta x_i = -\alpha_i\, p_i \\ \Delta x_i^t = -\alpha_i\, p_i^t \\ \qquad = -\alpha_i\, g_i^t A_i^t \end{cases}$$

la condition de conjugaison $\left\{ \Delta x_i^t\, C\, \Delta x_j = -\alpha_i\, g_i^t A_i\, \Delta g_j = 0 \qquad 0 \le j \le j-1 \right.$

peut être écrite de la manière suivante :

$$g_i^t A_i\, \Delta g_j = 0 \qquad 0 \le j \le i-1$$

Cette équation peut être satisfaite pour un gradient g_i non nul si la matrice A_i satisfait l'équation :

$$A_i\, \Delta g_j = 0 \qquad 0 \le j \le i-1.$$

Construction de la matrice A

Supposons que la matrice initiale A_0 soit connue.
On veut engendrer la suite :

$$A_i = A_{i-1} + \Delta A_{i-1}$$ avec ΔA_{i-1} la matrice correction symétrique $(n \times n)$ à déterminer.

Supposons que à la $i^{\text{ème}}$ itération, la relation $A_i \Delta q_j = 0$ soit vérifiée pour toutes les itérations précédentes.
En particulier :

$$A_{i-1} \Delta q_j = 0 \qquad 0 \leq j \leq i-2$$

donc : $A_i \Delta q_j = 0$ se divise en deux groupes :

$$\text{i)} \; * \; A_i \Delta q_{i-1} = 0$$

$$\text{ii)} \; * \; A_i \Delta q_j = 0 \qquad 0 \leq j \leq i-2$$

Or $A_i = A_{i-1} + \Delta A_{i-1}$ et $A_{i-1} \Delta q_j = 0 \quad 0 \leq j \leq i-2$
ce qui permet de récrire i) sous la forme :

$$A_{i-1} \Delta q_{i-1} + \Delta A_{i-1} \Delta q_{i-1} = 0$$

$$\Rightarrow \Delta A_{i-1} \Delta q_{i-1} = - A_{i-1} \Delta q_{i-1}$$

et ii) sous la forme :

$$A_{i-1} \Delta q_j + \Delta A_{i-1} \Delta q_j = 0$$

$$\Rightarrow \Delta A_{i-1} \Delta q_j = 0 \qquad 0 \leq j \leq i-2$$

Donc, une matrice correction symétrique satisfaisant :

$$\Delta A_{i-1} \Delta q_{i-1} = - A_{i-1} \Delta q_{i-1}$$

et $$\Delta A_{i-1} \Delta q_j = 0 \qquad 0 \leq j \leq i-2$$

peut être la suivante :

$$\Delta A_{i-1} = \frac{- A_{i-1} \Delta q_{i-1} \Delta q^{t}_{i-1} A_{i-1}}{\Delta q^{t}_{i-1} A_{i-1} \Delta q_{i-1}}$$

$A_i = A_{i-1} + \Delta A_{i-1}$ s'écrit donc comme suit :

$$A_i = A_{i-1} - \frac{A_{i-1} \Delta q_{i-1} \Delta q^{t}_{i-1} A_{i-1}}{\Delta q^{t}_{i-1} A_{i-1} \Delta q_{i-1}}$$ avec la ~~détermi-~~ correction nation de rang un

<u>Matrice initiale A_0</u>

Pour que le mécanisme décrit plus haut puisse démarrer, il faut que la matrice initiale symétrique soit connue.
Choisissons cette matrice telle que
$q_0^{t} p_0 = q_0^{t} A_0 q_0 \neq 0$ pour un q_0 non nul soit vérifiée.
Cette condition établit que p_0 et q_0 ne sont pas orthogonaux.
A_0 doit être soit définie positive
soit définie négative
Si c'est le cas, $q_0^{t} p_0 = q_0^{t} A_0 q_0$ est équivalent à :

$$p_0 = A_0 q_0 \neq 0$$

signifiant qu'on peut ~~pr~~ obtenir une direction non nulle telle qu'on puisse prendre un déplacement Δx_0.

<u>Arrêt du mécanisme</u>

A_0 étant choisie comme nous l'avons demandé, le mécanisme :

$$\begin{cases} p_i = A_i q_i \qquad \Delta x_i = -\alpha_i p_i \qquad x_{i+1} = x_i + \Delta x_i \\ A_i = A_{i-1} - \dfrac{A_{i-1}\,\Delta q_{i-1}\,\Delta q_{i-1}^t\,A_{i-1}}{\Delta q_{i-1}^t\,A_{i-1}\,\Delta q_{i-1}} \end{cases}$$

est réalisé si, à l'itération i, p_i est non nul ce qui arrive si le gradient q_i est linéairement indépendant de toutes les différences gradient précédentes. (Si le gradient q_i devient une combinaison linéaire de toutes les différences gradient précédentes, p_i s'annule).

En utilisant la condition de conjugaison $\Delta x_i^t C \Delta x_j$ la direction p_i peut s'écrire comme :

$$p_i = \beta_i \left[I - \sum_{r=0}^{i-1} \left(\Delta x_r \Delta q_r^t \,\Delta x_r^t \Delta q_r \right) \right] A_0 q_i$$

où β_i est un scalaire tel que :

$$\beta_0 = 1$$

$$\beta_i = -\Delta q_{i-1}^t\, p_{i-1} / \Delta q_{i-1}^t A_{i-1} \Delta q_{i-1} \qquad i \geq 1$$

Soit l'équation :

$$p_j = \beta_j \left[I - \sum_{r=0}^{j} \left(\Delta x_r \Delta q_r^t \,\Delta x_r^t \Delta q_r \right) \right] A_0 q_j$$

multiplions-la par Δq_i

$\Rightarrow$

$$q_i^t p_j = \beta_j \Delta q_i^t \left[I - \sum_{r=0}^{j-1} \left(\Delta x_r \Delta q_r^t \,\Delta x_r^t \Delta q_r \right) \right] A_0 q_j$$

$$\beta_j \Delta q_i^t A_0 q_j - \beta_j \Delta q_i^t \sum_{r=0}^{j-1} \left(\Delta x_r \Delta q_r^t \,\Delta x_r^t \Delta q_r \right)$$

$\Delta g_i^T p_j = \Delta g_i^T A_j g_j = 0$ (car $g_j^T A_i \Delta g_i = 0$)

donc : $\beta_j \Delta g_i^T A_0 g_j = 0$ et puisque $\beta_j \neq 0$ on a :

$$\Delta g_i^T A_0 g_j = 0$$

Si on utilise les équations :

$$p_i = \beta_i A_0 g_i - \beta_i \left(\sum_{r=0}^{i-1} \Delta x_r \Delta g_r^T \Delta x_r^T \Delta g_r \right) A_0 g_i$$

et $\Delta x_i^T c \Delta x_j = 0 \quad 0 \leq j \leq i-1$,
l'équation $\Delta g_i^T A_0 g_j = 0 \quad 0 \leq j \leq i-1$
donne :

$$g_i^T A_0 \Delta g_j = 0 \qquad 0 \leq j \leq i-1$$

Considérons maintenant l'équation :

$$g_i^T A_0 \Delta g_j = 0 \qquad 0 \leq j \leq i-1$$

pour $i = 1, 2, 3 \ldots$

. Pour $i = 1$ et $p_1 \neq 0$, l'équation $g_1^T A_0 \Delta g_0 = 0$ établit que g_1 est linéairement indépendant de Δg_0 ou que g_0 et g_1 sont linéairement indépendants

. Pour $i = 2$ et $p_2 \neq 0$ les équations :

$$\left.\begin{aligned} g_2^T A_0 \Delta g_0 &= 0 \\ g_2^T A_0 \Delta g_1 &= 0 \end{aligned}\right\}$$ établissent que g_2 est linéairement indépendant de Δg_0 et Δg_1

ou que g_0, g_1, g_2 sont linéairement indépendants

. Pour $i \geq 3$ et $p_i \neq 0$ on fait le même raisonnement

Donc, à la $i^{ème}$ itération où $p_i \neq 0$, on conclut

que g_i est linéairement indépendant de toutes les différences gradient précédentes ou que tous les gradients g_r $0 \leq r \leq i$ sont linéairement indépendants. Il s'ensuit que les i différences gradient sont aussi linéairement indépendantes.
Puisque il existe au plus n différences gradient linéairement indépendantes, le gradient g_e devient une combinaison linéaire des différences gradient précédentes avec l au plus égal à n.
En le point x_e, la direction p_l s'annule,
g_e est donné par $\sum_{r=0}^{l-1} h_r \Delta g_r$,

Δx_l est défini par: $\Delta x_l = - \sum_{r=0}^{l-1} \left(\frac{\Delta x_r \Delta x_r^t}{\Delta x_r^t \Delta g_r} \right) g_e$

ce qui donne le point x_{l+1} qui est le point minimal pour la fonction:

$$f(x) = a + b^t x + \frac{1}{2} x^t c x$$

Sans se référer au rang m, on peut établir que la solution est obtenue en au plus $n+1$ itérations où n est la dimension de x.
Finalement quand p_i est non nulle, on peut obtenir à partir de $p_i = \beta_i [I - \sum_{r=0}^{i-1} \Delta x_r \Delta g_r^t \Delta x_r^t \Delta g_r)] A_0 g_i$

et de $g_i^t A_0 \Delta g_j = 0 \qquad 0 \leq j \leq i-1$

la relation:

$$g_i^t p_i = \beta_i g_i^t A_0 g_i \neq 0.$$

Donc, l'annulation de p et celle du produit $g^t p$ se passent à la même itération soit la l ème, donc, le mécanisme défini par $p_i = A_i g_i$, $\Delta x_i = \alpha_i p_i$, $x_{i+1} = x_i + \Delta x_i$ peut être arrêté quand on a une des conditions: $p_l = 0 \qquad g_e^t p_e = 0$

2°/ Matrice B convergente

Quand la matrice A, à la $l^{ème}$ itération n'amène pas à un gradient linéairement indépendant, on introduit une matrice B telle que le déplacement :

$$\Delta x_l = -B_l g_l$$

conduit au point x_{l+1}, solution de

$$g(h) = b + ch = 0$$

- $$\Delta x_l = -\sum_{r=0}^{l-1} (\Delta x_r \Delta x_r^t / \Delta x_r^t \Delta g_r)\, g_l$$

peut être défini de la façon suivante :

Soit - une suite de matrices $n \times n$:

$$B_0 = 0$$

$$B_i = B_{i-1} + \Delta x_{i-1} \Delta x_{i-1}^t / \Delta x_{i-1}^t \Delta g_{i-1} \qquad i \geq 1$$

- des valeurs $(n \times 1)$ q_i :

$$q_i = B_i g_i$$

Alors, le déplacement Δx_l peut être défini par :

$$\Delta x_l = -q_l$$

Donc, cette matrice B, combinée avec la matrice de base A, constitue un algorithme complet de matrices duales.

Pour donner à l'algorithme plus de flexibilité, on donne à B quelques modifications.

On sait que $B_i \Delta g_j = \Delta x_j \qquad 0 \leq j \leq i-1$

on construira donc la matrice B symétrique qui satisfait cette propriété.

Construction de la matrice B

On suppose que le mécanisme

$$\begin{cases} p_i = A_i g_i \qquad \Delta x_i = -\alpha_i p_i \qquad x_{i+1} = x_i + \Delta x_i \\ A_i = A_{i-1} - A_{i-1}\Delta g_{i-1}\Delta g_{i-1}^T A_{i-1} / \Delta g_{i-1}^T A_{i-1}\Delta g_{i-1} \end{cases}$$

est utilisé.

Partant de la matrice initiale symétrique B_0, on voudrait engendrer la suite des matrices symétriques B par la relation : $B_i = B_{i-1} + \Delta B_{i-1}$

On procède par récurrence.

Supposons qu'à la $i^{ème}$ itération : $B_i \Delta g_j = \Delta x_j$ est satisfaite pour toutes les itérations précédentes.

En particulier : $B_{i-1}\Delta g_j = \Delta x_j \qquad 0 \leq j \leq i-2$

Alors l'équation $B_i \Delta g_j = \Delta x_j$ est divisée en 2 groupes comme suit :

i) $B_i \Delta g_{i-1} = \Delta x_{i-1}$

ii) $B_i \Delta g_j = \Delta x_j \qquad 0 \leq j \leq i-2$

En utilisant les relations : $\begin{cases} B_i = B_{i-1} + \Delta B_{i-1} \\ B_{i-1}\Delta g_j = \Delta x_j \qquad 0 \leq j \leq i-2 \end{cases}$

ces équations peuvent s'écrire de la manière suivante :

i) $B_i \Delta g_{i-1} = (B_{i-1} + \Delta B_{i-1})\Delta g_{i-1} = \Delta x_{i-1}$

$$B_{i-1}\Delta g_{i-1} + \Delta B_{i-1}\Delta g_{i-1} = \Delta x_{i-1}$$

$$\Rightarrow \quad \Delta B_{i-1}\Delta g_{i-1} = \Delta x_{i-1} - B_{i-1}\Delta g_{i-1}$$

ii) $B_i \Delta g_j = (B_{i-1} + \Delta B_{i-1})\Delta g_j = \Delta x_j$

$$B_{i-1}\Delta g_j + \Delta B_{i-1}\Delta g_j = \Delta x_j$$

$$\Delta B_{i-1}\Delta g_j = \Delta x_j - \underline{B_{i-1}\Delta g_j}$$
$$\Delta x_j$$

$$\Rightarrow \Delta B_{i-1}\Delta g_j = 0 \qquad 0 \le j \le i-2$$

On peut choisir deux matrices correction ΔB_{i-1} satisfaisant :

$$\begin{cases} \Delta B_{i-1}\Delta g_{i-1} = \Delta x_{i-1} - B_{i-1}\Delta g_{i-1} \\ \Delta B_{i-1}\Delta g_j = 0 \qquad\qquad 0 \le j \le i-2 \end{cases}$$

comme suit :

$$\begin{cases} \Delta B_{i-1} = (\Delta x_{i-1}\Delta x_{i-1}^{t} / \Delta x_{i-1}^{t}\Delta g_{i-1}) - \dfrac{B_{i-1}\Delta g_{i-1}\Delta g_{i-1}^{t} B_{i-1}}{\Delta g_{i-1}^{t} B_{i-1}\Delta g_{i-1}} \\ \Delta B_{i-1} = \dfrac{(\Delta x_{i-1} - B_{i-1}\Delta g_{i-1})(\Delta x_{i-1} - B_{i-1}\Delta g_{i-1})^{t}}{(\Delta x_{i-1} - B_{i-1}\Delta g_{i-1})^{t}\Delta g_{i-1}} \end{cases}$$

En combinant l'équation $B_i = B_{i-1} - \Delta B_{i-1}$ avec chacune de ces équations on obtient :

$$\begin{cases} B_i = B_{i-1} + \dfrac{\Delta x_{i-1}\Delta x_{i-1}^{t}}{\Delta x_{i-1}^{t}\Delta g_{i-1}} - \dfrac{B_{i-1}\Delta g_{i-1}\Delta g_{i-1}^{t} B_{i-1}}{\Delta g_{i-1}^{t} B_{i-1}\Delta g_{i-1}} \\ B_i = B_{i-1} + \dfrac{(\Delta x_{i-1} - B_{i-1}\Delta g_{i-1})(\Delta x_{i-1} - B_{i-1}\Delta g_{i-1})^{t}}{(\Delta x_{i-1} - B_{i-1}\Delta g_{i-1})^{t}\Delta g_{i-1}} \end{cases}$$

<u>Matrice initiale B_0</u>

Pour employer les relations précédentes il faut que B_0 soit connue. On peut choisir cette matrice initiale arbitrairement pourvu qu'elle soit symétrique. Avec une matrice initiale B_0 symétrique, toutes les

suites des matrices B sont aussi symétriques.
On peut choisir B_0 comme étant la matrice nulle. A ce moment les équations donnant B_i se réduisent à:

$$B_i = B_{i-1} + \Delta x_{i-1} \Delta x_{i-1}^t / \Delta x_{i-1}^t \Delta g_{i-1}$$

Ce choix a la propriété que la suite des matrices B a des rangs croissants avec pr B_0 un rang nul.
. Des choix différents de B_0 donnent des suites différentes de B
. Parmi ces choix une classe de matrices est recommandable celle où les matrices initiales symétriques B_0 sont
soit définies positives
soit définies négatives.
A ce moment toutes les matrices B sont de rang n

Pas de convergence

Supposons qu'à la $l^{\text{ème}}$ itération l'équation
$p_l = 0$ ou $g_l^t p_l = 0$ soit satisfaite
telle qu'un déplacement défini par $q_i = B_i g_i$ et $\Delta x_l = -q_l$
soit fait c. à d. : $\Delta x_l = -B_l g_l$
le gradient au point suivant est donné par:

$$g_{l+1} = g_l - C B_l g_l$$

On sait que: (*) $g_l - \sum_{r=0}^{l-1} (\Delta g_r \Delta x_r^t / \Delta x_r^t \Delta g_r) g_l = 0$

donc on a: $g_{l+1} = g_l - C \sum_{r=0}^{l-1} (B_l \Delta g_r \Delta x_r^t / \Delta x_r^t \Delta g_r) g_l$

En utilisant: $B_i \Delta g_j = \Delta x_j \quad 0 \leq j \leq i-1$, et $\Delta g_i = C \Delta x_i$
il devient: $g_{l+1} = g_l - \sum_{r=0} (\Delta g_r \Delta x_r^t / \Delta x_r^t \Delta g_r) g_l$
car $B_l \Delta g_r = \Delta x_r$ et $C \Delta x_r = \Delta g_r$
qui à cause de (*) implique que $g_{l+1} = 0$.
Donc, le point x_{l+1} est un point minimal pour $f(x)$.

Algorithmes des matrices duales

A partir des considérations précédentes on peut obtenir trois algorithmes de matrices duales. Ils sont définis de la manière suivante :

- $p_i = A_i g_i \qquad q_i = B_i g_i$

- $$\Delta x_i = \begin{cases} -\alpha_i p_i & \text{si } |g_i^+ p_i \,/\, g_i^+ g_i| > \varepsilon_1 \\ -\alpha_i q_i & \text{si } |g_i^+ p_i \,/\, g_i^+ g_i| \leq \varepsilon_1 \end{cases}$$

  (ces conditions remplacent la condition $g_e^+ p_e = 0$ car celle-ci est difficile à réaliser sur ordinateur).

- $x_{i+1} = x_i + \Delta x_i$.

Algorithme I

A_0 = matrice définie

$$A_i = A_{i-1} - \frac{A_{i-1}\Delta g_{i-1}\Delta g_{i-1}^+ A_{i-1}}{\Delta g_{i-1}^+ A_{i-1}\Delta g_{i-1}}$$

$B_0 = 0$

$$B_i = B_{i-1} + \frac{\Delta x_{i-1}\Delta x_{i-1}^+}{\Delta x_{i-1}^+ \Delta g_{i-1}}.$$

Algorithme II

A_0 = matrice définie

$$A_i = A_{i-1} - \frac{A_{i-1}\,\Delta g_{i-1}\,\Delta g_{i-1}^t\,A_{i-1}}{\Delta g_{i-1}^t\,A_{i-1}\,\Delta g_{i-1}}$$

B_0 = matrice définie

$$B_i = B_{i-1} + \frac{\Delta x_{i-1}\,\Delta x_{i-1}^t}{\Delta x_{i-1}^t\,\Delta g_{i-1}} - \frac{B_{i-1}\,\Delta g_{i-1}\,\Delta g_{i-1}^t\,B_{i-1}}{\Delta g_{i-1}^t\,B_{i-1}\,\Delta g_{i-1}}$$

Algorithme III

A_0 = matrice définie

$$A_i = A_{i-1} - \frac{A_{i-1}\,\Delta g_{i-1}\,\Delta g_{i-1}^t\,A_{i-1}}{\Delta g_{i-1}^t\,A_{i-1}\,\Delta g_{i-1}}$$

B_0 = matrice définie

$$B_i = B_{i-1} + \frac{(\Delta x_{i-1} - B_{i-1}\,\Delta g_{i-1})(\Delta x_{i-1} - B_{i-1}\,\Delta g_{i-1})^t}{(\Delta x_{i-1} - B_{i-1}\,\Delta g_{i-1})^t\,\Delta g_{i-1}}$$

Grandeur du pas

Pour une fonction quadratique : le pas peut être fixé : $\lambda_i = 1$.

Il est vrai qu'avec une longueur de pas fixé la valeur de la fonction peut croître à la fin du déplacement donné par :

$$\Delta x_i = -\alpha_i p_i \quad \text{si} \quad |g_i^t p_i / g_i^t g_i| > \varepsilon_1$$

Mais néanmoins un déplacement donné par

$$\Delta x_i = -\alpha_i g_i \quad \text{si} \quad |g_i^t p_i / g_i^t g_i| \leq \varepsilon_1$$

converge toujours vers la solution. barring la perte de précision due aux erreurs d'arrondis.

Pour une fonction non quadratique la stabilité (ou la réduction dans la valeur de la fonction à chaque itération) peut être importante. Cela étant le cas, la longueur du pas α_i ne peut pas être fixée.

Nous observons que la 1ère variation de la fonction à la ième itération δf_i est donnée par:

$$\delta f_i = g_i^t \Delta x_i = \begin{cases} -\alpha_i g_i^t p_i \\ -\alpha_i g_i^t g_i \end{cases}$$

suivant qu'on emploie:

$$\Delta x_i = -\alpha_i p_i \quad \text{ou} \quad \Delta x_i = -\alpha_i g_i$$

Donc, si la grandeur du pas α_i est donnée par:

$$\alpha_i = \begin{cases} r \operatorname{sign}(g_i^t p_i) \\ r \operatorname{sign}(g_i^t g_i) \end{cases}$$

où r est un facteur positif pris dans l'intervalle $0 < r \leq r_0$

la première variation est réduite à:

$$\delta f_i = \begin{cases} -r\,|g_i^t p_i| \\ -r\,|g_i^t g_i| \end{cases}$$

Donc la 1ère variation est toujours négative : $\delta f_i < 0$ et la valeur de la fonction peut être réduite si le facteur positif r est suffisamment petit.
En utilisant la valeur de α_i, le déplacement devient :

$$\Delta x_i = -r \, \mathrm{sign}(g_i^T p_i)\, p_i \quad \text{si } |g_i^T p_i / g_i^T g_i| > \varepsilon_1$$

$$= -r \, \mathrm{sign}(g_i^T g_i)\, g_i \quad \text{si } |g_i^T p_i / g_i^T g_i| \leq \varepsilon_1$$

Donc on peut calculer f_{i+1}.
Si l'inégalité : $f_{i+1} < f_i$ est vérifiée on peut accepter le facteur r
Sinon, on réduit ce facteur (par un procédé itératif) jusqu'au moment où elle est satisfaite.
Ce procédé est garanti grâce à la relation $\delta f_i < 0$ de la 1ère variation.

- Une valeur initiale de r_0 peut être : $r_0 = 1$.
Dans certains cas cette valeur sera excessive et plusieurs itérations sont nécessaires.
- On peut aussi employer :

$$r_0 = \min \{ 1, |2(f_i - f_{lb}) / g_i^T p_i| \}$$

$$\text{quand } \Delta x_i = -r \, \mathrm{sign}(g_i^T p_i)\, p_i$$

et $r_0 = 1$

$$\text{quand } \Delta x_i = -r \, \mathrm{sign}(g_i^T g_i)\, g_i$$

f_{lb} est la borne inférieure estimée de f.

Redémarrage

Supposons que le pas $\Delta x_i = -r \, \mathrm{sign}(g_i^T g_i)\, g_i$ soit

employé à la $l^{ème}$ itération.
Si le point suivant x_{l+1} satisfait la précision demandée pour le point minimal, on arrête l'algorithme. Si d'autre part, on n'atteint pas cette précision au point x_{l+1}, on doit faire d'autres itérations.

A ce moment on doit repartir avec les matrices A_l et B_l de façon à obtenir A_{l+1} et B_{l+1} satisfaisant aux relations citées dans les algorithmes.
On distingue deux cas.

1°) Pour l'algorithme I : on repart avec la matrice A satisfaisant :

$$A_l = B_l \quad \text{si} \quad | g_l^T g\, g_l / g_l^T g_l | > \varepsilon_2$$

$$A_l = A_0 \quad \text{si} \quad | g_l^T g_l / g_l^T g_l | \leq \varepsilon_2$$

et la matrice B en posant : $B_l = B_0 = 0$

2°) Pour les algorithmes II et III

$$\begin{cases} A_l = B_l \\ \\ B_l = B_l \end{cases}$$

→ on établit que la matrice B pour les deux algorithmes peut être utilisée d'une manière ala et du au fait que les formules donnant B_i dans les algorithmes II et III ne demandent pas une matrice initiale nulle.

Remarque : Comparaison avec les algorithmes de Goldstein : ceux-ci permettent aussi l'emploi de facteurs de longueur de pas arbitraires.

Algorithme inverse.

Pour construire la matrice B on suppose que les déplacements sont mutuellement conjugués par rapport à la matrice Hessien C.
On démontre (dans l'appendice I) que cette supposition, vitale dans les algorithmes I et II, peut être relachée dans l'algorithme III.

L'algorithme inverse est défini par les opérations suivantes :

$$\begin{cases} q_i = B_i g_i \qquad p_i = A_i g_i \\ \Delta x_i = -\alpha_i q_i \\ x_{i+1} = x_i + \Delta x_i \end{cases}$$

avec $$B_i = B_{i-1} + \frac{(\Delta x_{i-1} - B_{i-1}\Delta g_{i-1})(\Delta x_{i-1} - B_{i-1}\Delta g_{i-1})^t}{(\Delta x_{i-1} - B_{i-1}\Delta g_{i-1})^t \Delta g_{i-1}}$$

et $$A_i = A_{i-1} - \frac{A_{i-1}\Delta g_{i-1}\Delta g_{i-1}^t A_{i-1}}{\Delta^t g_{i-1} A_{i-1} \Delta g_{i-1}}$$

dans le déplacement $\Delta x_i = -\alpha_i q_i$, α_i est donné par

$$\alpha_i = r \operatorname{sign}(g_i^t q_i) \qquad 0 < r \leq r_0.$$

$$r_0 = \min\{1, k(f_i - f_{eb})/|g_i^t q_i|\} \quad \text{si } |g_i^t p_i / g_i^t g_i| > \varepsilon_1$$

$$= 1 \quad \text{si } |g_i^t p_i / g_i^t g_i| \leq \varepsilon_1$$

Pour une fonction quadratique l'algorithme converge en au plus $n+1$ itérations.
Pour une fonction non quadratique on peut être réduit pour engendrer la propriété

Les conditions de redémarrage sont données par de descente : $f_{i+1} < f_i$

$$\begin{cases} A_l = B_l \\ B_l = B_l \end{cases}$$

où l est l'itération où $|g_i^t g_i / g_i^t g_i| \leq \varepsilon_1$.

<u>Simplification</u> : dans cet algorithme la fonction de A et de p est simple pour déterminer quand on doit employer telle ou telle valeur de ρ_0. Si on emploie toujours : $\rho_0 = \min\{1, 2(f_i - f(x))/g_i^t g_i\}$ ou toujours $\rho_0 = 1$, on évite le calcul de A et p et l'algorithme emploie uniquement la matrice B.

Conclusions.

. La méthode est caractérisée par l'emploi de 2 matrices à chaque itération :

- une matrice engendre une suite de directions linéairement indépendantes sans tenir compte de la valeur du pas
- l'autre matrice engendre, quand la 1re ne conduit pas à une ~~combinaison~~ gradient linéairement indépendant des précédents, un déplacement conduisant au point minimal.

=> on évite une recherche uni-dimensionnelle.

. Pour une fonction quadratique n+1 itérations sont nécessaires. (n = nb de variables).

Le nombre d'évaluations du gradient pour la

Convergence en $n+2$ (car on n'emploie pas la recherche uni-dimensionnelle).

- On présente trois algorithmes plus un algorithme inverse qui permet de n'utiliser qu'une seule matrice

<u>Intérêt</u> de cette méthode : on peut faire une économie considérable de calculs.

Appendice I

Preuve du relâchement de la supposition faite sur la matrice B pour l'algorithme III.

Déplacements non conjugués

Soit $\Delta x_0, \Delta x_1, \ldots$ une suite de déplacements non nuls non nécessairement conjugués par rapport à la matrice C.
Soit $\Delta g_0, \Delta g_1, \ldots$ la suite correspondante des différences gradient.
On veut établir les propriétés suivantes :

1°) La suite des matrices B engendrées par la formule donnant B_i dans l'algorithme III satisfait la condition : $B_i \Delta g_j = \Delta x_j$

2°) La suite des matrices A satisfait la condition : $A_i \Delta g_j = 0$

1°) Soit :

$$(*)\quad B_i = B_{i-1} + \frac{(\Delta x_{i-1} - B_{i-1}\Delta g_{i-1})(\Delta x_{i-1} - B_{i-1}\Delta g_{i-1})^T}{(\Delta x_{i-1} - B_{i-1}\Delta g_{i-1})^T \Delta g_{i-1}}$$

$$B_i \Delta g_{i-1} = B_{i-1}\Delta g_{i-1} + \frac{(\Delta x_{i-1} - B_{i-1}\Delta g_{i-1})(\Delta x_{i-1} - B_{i-1}\Delta g_{i-1})^T \Delta g_{i-1}}{(\Delta x_{i-1} - B_{i-1}\Delta g_{i-1})^T \Delta g_{i-1}}$$

$$= \Delta x_{i-1}$$

Donc en multipliant les deux membres de l'équation (*)

par Δg_j $\quad 0 \le j \le i-2$, on obtient :

$$B_i \Delta g_j = B_{i-1} \Delta g_j + \frac{(\Delta x_{i-1} - B_{i-1} \Delta g_{i-1})(\Delta x_{i-1}^T \Delta g_j - \Delta g_{i-1}^T B_{i-1} \Delta g_j)}{(\Delta x_{i-1} - B_{i-1} \Delta g_{i-1})^T \Delta g_{i-1}}$$

Donc, si la propriété :

$$B_i \Delta g_j = \Delta x_j \qquad 0 \le j \le i-1$$

est valable pour l'itération précédente c'est-à-dire

$$B_{i-1} \Delta g_j = \Delta x_j \qquad 0 \le j \le i-2$$

l'équation donnant $B_i \Delta g_j$ devient :

$$B_i \Delta g_j = \Delta x_j \qquad 0 \le j \le i-2$$

En continuant
$$\begin{cases} B_i \Delta g_{i-1} = \Delta x_{i-1} \\ \text{et} \quad B_i \Delta g_j = \Delta x_j \qquad 0 \le j \le i-2 \end{cases}$$

on aura : $B_i \Delta g_j = \Delta x_j \qquad 0 \le j \le i-1$

Partons maintenant d'une matrice initiale B_0.
La matrice B_1 a la propriété :

$B_1 \Delta g_0 = \Delta x_0$ à cause de $B_i \Delta g_{i-1} = \Delta x_{i-1}$

Pour B_2 on a : $B_2 \Delta g_1 = \Delta x_1$ à cause de $B_i \Delta g_{i-1} = \Delta x_{i-1}$

$B_2 \Delta g_0 = \Delta x_0$ car $B_{i-1} \Delta g_j = \Delta x_j$ $\quad 0 \le j \le i-2$

et B_2 a la propriété :

$$B_2 \Delta g_j = \Delta x_j \qquad 0 \le j \le 1$$

et ainsi de suite

Donc, la propriété $B_i \Delta g_j = \Delta x_j \quad 0 \le j \le i-1$ est vérifiée.

2°) Le même procédé peut être employé pour établir que la suite des matrices A satisfait :

$$A_i \Delta g_j = 0 \qquad 0 \leq j \leq i-1.$$

Déplacements linéairement indépendants.

Soit une suite de déplacements définis par

$$\Delta x_i = -\lambda_i q_i \qquad q_i = B_i g_i$$

λ_i est la grandeur du pas non nulle
B_i est obtenue à partir de l'algorithme II
Supposons que $p_i = A_i g_i$ soit calculé
Écrivons le gradient sous la forme :

$$g_i = \sum_{r=0}^{i-1} c_r \Delta g_r + c\, S_i$$

où c_r est un coefficient scalaire constant
S_i est un vecteur $(n \times 1)$ tel que le vecteur cS_i représente la partie du gradient g_i linéairement indépendante de toutes les différences gradient précédentes Δg_r $\quad 0 \leq r \leq i-1$

On a donc :

$$A_i c S_i \neq 0 \qquad B_i c S_i \neq 0 \qquad \text{si } cS_i \neq 0$$

$$A_i c S_i = 0 \qquad B_i c S_i = 0 \qquad \text{si } cS_i = 0$$

En utilisant l'expression de g_i on a :

$$p_i = A_i g_i \Rightarrow p_i = A_i c S_i \quad \text{car } A_i \Delta g_j = 0$$

pour $0 \leq j \leq i-1$

$$q_i = B_i g_i \Rightarrow q_i = \sum_{r=0}^{i-1} c_r \Delta x_r + B_i c S_i$$

car $B_i \Delta g_j = \Delta x_j \quad 0 \leq j \leq i-1$

Donc quand le gradient g_i est linéairement indépendant de tous les différents gradients précédents c'est-à-dire

$cS_i \neq 0 \quad A_i c S_i \neq 0 \quad B_i c S_i \neq 0$

on a : $p_i \neq 0$ et g_i est linéairement indépendant de tous les déplacements précédents Δx_r $0 \leq r \leq i-1$

Dans ce cas le déplacement défini par $\Delta x_i = -\lambda_i g_i$ devient une composante additionnelle du groupe linéairement indépendant : Δx_r $0 \leq r \leq i-1$

D'autre part quand à la $l^{ème}$ itération, g_l est combinaison linéaire des différents gradients précédents c'est-à-dire

$cS_l = 0 \quad A_l c S_l = 0 \quad B_l c S_l = 0$

On aura :

$$p_l = A_l c S_l = 0$$

$$g_l = \sum_{r=0}^{l-1} c_r \Delta x_r + B_l c S_l = \sum_{r=0}^{l-1} c_r \Delta x_r$$

Si on prend un pas défini par $\Delta x_l = -g_l$ le gradient au point x_{l+1} est donné par :

$$g_{l+1} = \boxed{g_l} - c g_l$$

qui s'annule car $g_{l+1} = \boxed{\sum_{r=0}^{l-1} c_r \Delta g_r + \underset{=0}{c S_l}} - c \sum_{r=0}^{l-1} c_r \Delta x_r$

car $c\Delta x_r = \Delta g_r$

$\Rightarrow g_{l+1} = 0$

Donc x_{l+1} est solution de l'équation $g(h) = b + ch = 0$

$g_{l+1} = g_l - c g_l$ car $g_{l+1} = g_l + c\Delta x_l$

$= g_l - c g_l$ (par définition de Δx_l)

Conclusions.

Lorsque nous considérons une recherche linéaire exacte unidimensionnelle, le minimum d'une fonction quadratique s'obtient en un nombre d'itérations au plus égal au nombre de variables et la suite de points engendrés est indépendante des algorithmes employés à chaque itération. En pratique, cette recherche exacte ne peut être atteinte et on emploie donc une recherche non exacte.

Nous avons proposé une forme modifiée d'un algorithme à métrique variable. Celui-ci engendre les mêmes directions et la même suite de matrices que celles obtenues en employant une recherche exacte.

Lorsque les erreurs sont introduites dans la recherche linéaire, à chaque itération, nous avons montré que la méthode gradient convergeait en un rapport linéaire

Enfin, nous avons considéré la recherche non uni-dimensionnelle. Nous avons analysé la méthode des matrices duales qui, pour une fonction quadratique, nécessite $n+1$ itérations et $n+2$ évaluations de la fonction et de son gradient.

L'intérêt de cette méthode réside dans la possibilité d'éviter de nombreux calculs.

Références.

[1]. Huang, H. Y. "Unified Approach to Quadratically Convergent Algorithms for Function Minimization", Rice University, Aero-Astronautics Report No. 64, 1969.

[2] Fletcher, R, and Reeves, C. M., "Function Minimization by Conjugate Gradients", Computer Journal, Vol 7, No. 2, 1964.

[3]. Davidon, W. C., "Variable Metric Method for Minimization", Argonne National Laboratory, Report No. ANL-5990, 1959.

[4] Pearson, J. D., "On Variable Metric Methods of Minimization", Research Analysis Corporation, Technical Paper No. RAC. TP-302, 1968.

[5] Huang H Y & Levy : "Numerical Experiments on Quadratically Convergent Algorithms for Function Minimization".
JOTA. 6. No. 3. 269-282

[6] Numerical Optimization Center
Technical Report n° 26 June 1971
Variable Metric Algorithms
Necessary and Sufficient Conditions for

"Identical Relation on Non-Quadratic Functions."
by LCW Dixon.

[7] Numerical Optimization Centre
Technical Report n° 28 November 71
"Quasi-Newton Techniques Generate
Identical Points"
by LCW Dixon

[8] Broyden CG (1967): "Quasi-Newton methods
and their Application to Function
Minimisation", Math. of Comp. 21
pp 368, 381.

[9] Numerical Optimization Centre
Technical Report n° 36 October 1972
"Conjugate Directions Without Linear
Search"
by LCW Dixon.

[10] Hestenes MR (69): "Multiplier and Gradient
Methods", Journal of Optimization
Theory and its Applications. Vol 4, No 5.
pp 303, 321.

[11] "Practical Convergence Conditions for
Unconstrained Optimization".
Melanie L. Lenard.
University of Toledo, Toledo, Ohio, USA.

[12] P. Wolfe : " Convergence Theory in Non Linear Programming ", in : Integer and non Linear programming, Ed. J. Abadie (North-Holland, Amsterdam, 1970) 1-36.

[13] Fletcher, R, " A new Approach to Variable Metric Algorithm ", Computer Journal Vol 13, No 3, 1970.

[14] Huang, H Y, " Method of Dual Matrices for Function Minimization " Rice University, Aero-Astronautics Report No 88. 1972.

Table des matières.