



HAL
open science

Algorithmes robustes en optimisation non convexe : codes et simulations numériques en grande dimension

Abderrazek Chine

► **To cite this version:**

Abderrazek Chine. Algorithmes robustes en optimisation non convexe : codes et simulations numériques en grande dimension. Modélisation et simulation. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 1991. Français. NNT: . tel-00340403

HAL Id: tel-00340403

<https://theses.hal.science/tel-00340403>

Submitted on 20 Nov 2008

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

107 46380

THESE

Présentée par

Abderrazek CHINE

pour obtenir le titre de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE JOSEPH FOURIER-GRENOBLE I

(Spécialité : Mathématiques Appliquées)

(Arrêté ministériel du 5 Juillet 1984)

**ALGORITHMES ROBUSTES EN OPTIMISATION
NON CONVEXE.
CODES ET SIMULATIONS NUMERIQUES
EN GRANDE DIMENSION**

Date de soutenance : 28 Septembre 1991

Composition du jury :

P.J. LAURENT

Président

J.P. CROUZEIX

V.H. NGUYEN

R. CLERMONT

Ph. MAHEY

PHAM DINH TAO

Examineurs

G. D'AUBIGNY

A.YASSINE

Invités

THESE PREPAREE AU SEIN DU LABORATOIRE L.M.C

" Ce qui se conçoit bien s'énonce clairement. Et les mots pour le dire arrivent aisément. "
Boileau

Ce travail a été réalisé au sein des laboratoires LMC (Institut d'Informatique et de Mathématiques Appliquées de Grenoble) et LMAI de l'INSA-Rouen.

Je veux exprimer toute ma reconnaissance à Monsieur Pham Dinh Tao, Professeur à l'INSA-Rouen, qui m'a accepté au sein de sa dynamique Equipe, m'a bien guidé dans ce domaine d'Optimisation très vaste, pour son soutien, sa disponibilité, ses conseils et sa sympathie. Qu'il trouve ici l'expression de ma profonde gratitude.

Je tiens beaucoup à exprimer ma gratitude envers Monsieur le Professeur P.J. Laurent pour l'honneur qu'il m'a fait en acceptant de présider ce jury et pour tout ce qu'il a fait pour m'aider à reprendre et à finir ce travail dans les bonnes conditions. En dehors des soutiens et des conseils qu'ils nous a prodigués (à nous tous les chercheurs de la Formation Doctorale de Mathématiques Appliquées qu'il dirige au sein de l'Université Joseph Fourier) dans les moments difficiles, il est un des pionniers dans les développements de l'Analyse et Optimisation convexes modernes. Il a laissé à l'Ecole française et à notre Equipe de Modélisation & Optimisation Appliquées un héritage intellectuel inestimable que nous nous promettons d'enrichir et de transmettre aux générations futures.

Je tiens à exprimer mon profond regret quant à l'absence "remarquée" (pour des raisons de calendriers) du Professeur J.B. Hiriart-Urruty, Directeur du Laboratoire d'Analyse Numérique, de l'Université Paul Sabatier, (Toulouse III). Qu'il me permette de lui témoigner ma sincère et respectueuse gratitude

J'adresse mes remerciements à Monsieur Clermont Robert pour ses encouragements et les discussions amicales dans des moments difficiles. Les modélisations mathématiques et leurs simulations numériques en mécanique qu'il m'a proposées sont pour moi des expériences très enrichissantes.

Monsieur Nguyen Van Hien, Professeur à l'Université de Namur, s'est intéressé à mes travaux de recherche dès le début. Il a suivi régulièrement leur avancement et m'a donné des conseils judicieux. Qu'il trouve ici l'expression de ma profonde gratitude.

Mes vifs remerciements vont également à :

Messieurs Jean Pierre Crouzeix, Professeur à l'Université de Clermont-Ferrand, D'Aubigny Gérard, Professeur à l'Université de Grenoble II, Mahey Philippe de l'Université Grenoble I et Yassine Adnan de l'Université de Nancy I pour l'intérêt qu'ils portent à mon travail et pour avoir accepté de prendre part au jury.

Je n'oublierai jamais les moments d'ambiance, d'amitié et de collaboration "parfaite" avec Monsieur Yassine Adnan. Un grand Merci à lui pour son soutien et sa gentillesse.

Merci à Mademoiselle Marie Emmanuelle De La Lande d'avoir acceptée de se déplacer à Rouen dans le cadre de notre collaboration fructueuse. Je garde de bons souvenirs des moments de travail ensemble.

Que ma femme et toute ma famille trouvent ici toute ma gratitude pour l'amour et le soutien permanent qu'ils m'ont offert.

Mes amitiés vont à tous mes collègues de Grenoble et de l'INSA-Rouen avec qui j'ai passé de bonnes années d'harmonie.

INTRODUCTION GENERALE

Au cours de ces dernières années, l'optimisation non convexe et non différentiable connaît un énorme regain d'intérêts et des développements importants tant sur le plan théorique que celui de l'élaboration des algorithmes de résolution. Les principales motivations sont

i) l'Analyse et l'Optimisation convexes sont suffisamment étudiées. Et on dispose depuis d'un ensemble des méthodes capables de résoudre numériquement tout problème convexe (i.e., minimisation d'une fonction convexe sur une partie convexe). Bien évidemment faut-il encore savoir faire une modélisation adéquate, adapter voire proposer des variantes des méthodes existantes pour un traitement approprié des problèmes concrets. D'autant plus que, comme retombées heureuses, les recherches sur l'optimisation non convexe donnent naissance à une classe intéressante de problèmes convexes pour lesquels les méthodes de résolution performantes et robustes restent à étudier. La quasi-totalité des problèmes pratiques sont de nature non convexe . On ne peut évidemment pas traiter d'emblée tous les problèmes non convexes. Une classification est ainsi nécessaire. La classification présentée ci-dessous, devenue maintenant classique, est assez large. Elle couvre l'ensemble des problèmes non convexes dits "réalistes" et permet d'utiliser "à fond" l'arsenal puissant des outils de l'analyse et de l'optimisation convexe. Ce point est vital dans l'élaboration des algorithmes numériques de résolution car il faut reconnaître que les nouveaux outils d'analyse non convexe (dérivées généralisées, première et seconde des fonctions localement lipschitziennes,...) développés au milieu des années 70, sont pratiquement inutilisables.

Cette thèse est consacrée à l'étude de cette classe de problèmes d'optimisation non convexe

$$(1) \quad \sup \{ f(x) : x \in C \}$$

$$(2) \quad \inf \{ \gamma(x) - h(x) : x \in C \}$$

$$(3) \quad \inf \{ f(x) : \gamma(x) \geq 0, x \in C \}$$

f, γ, h étant des fonctions convexes s.c.i et propres et C un ensemble convexe fermé.

A côté de l'aspect théorique, une grande partie est réservée aux développements des algorithmes numériques, à l'implémentation effective des codes et aux simulations numériques dans les problèmes concrets de grande taille, ce dernier point est important : il répond aux souhaits des spécialistes de voir fonctionner les algorithmes de l'optimisation non convexe en grande dimension pour pouvoir juger leurs qualités (performance, robustesse, fiabilité,...).

Les trois problèmes précédents sont équivalents en ce sens qu'une méthode de résolution d'un problème permet de résoudre les deux autres. Mais leurs degrés de difficulté vont en croissant. Le problème (1) est le plus ancien et le plus étudié en Recherche Opérationnelle (Programmation en nombre entier en optimisation combinatoire, ...) [Ph86,88]

Dans le cadre " continu" de l'optimisation non convexe les premiers travaux remontent à 1975 avec les développements des algorithmes de calcul des normes d'opérateurs de matrices [voir en particulier Ph81]. Le problème (2) est d'une nature particulièrement intéressante. Elle permet des développements théoriques importants à partir de 1979 avec les travaux de Toland [To79], Hiriart-Urruty [HU85], Pham Dinh T. &al. [Ph&al.86].

Quant aux aspects algorithmiques, on dispose actuellement des méthodes de sous gradients introduites récemment [Ph87] et raffinés depuis. Sans compter les méthodes des plans coupants (cutting plane methods) en optimisation combinatoire qui sont très nombreuses au cours de ces dernières années mais ne s'appliquent qu'aux problèmes de petite taille. Les méthodes de type combinatoire ne font pas l'objet des travaux présentés dans cette thèse.

Enfin, le problème (3), le plus difficile, ne connaît des développements propres ni sur le plan théorique ni sur celui des méthodes numériques. On se contente d'adapter les algorithmes de sous gradient (des problèmes (1) et (2)) à sa résolution. Nos travaux de recherches reposent sur les résultats et les idées novateurs de Pham Dinh T.

Nos contributions propres sont situées à différents niveaux

a) Adaptation et raffinement de ces résultats lors de leurs applications à des problèmes concrets. Etude des variantes adaptées à leurs résolutions numériques, c'est le cas notamment du traitement numérique du problème d'analyse multidimensionnelle des tableaux de dissimilarité (MDS) par les algorithmes de sous gradients appliqués aux problèmes d.c.

b) Modélisations mathématiques adéquates des problèmes d'optimisation non convexes afin d'obtenir des problèmes équivalents de la classification précédente qui sont plus facile à traiter par les méthodes étudiées.

c) Elaboration et Implémentations effectives des codes, simulations numériques dans les problèmes concrets de grande dimension. Ces codes à l'usage industriel ont fait preuve de leurs performances, robustesses et fiabilités à travers un volume important de problèmes traités. Nous pensons à préparer une version pour, éventuellement, la commercialiser.

En dehors du chapitre 0, qui introduit les outils d'analyse convexe et calcul matriciel nécessaires, cette Thèse est composée de cinq chapitres.

Le chapitre I présente une étude complète du problème de minimisation (convexe ou non convexe) d'une forme quadratique indéfinie sous des contraintes linéaires et quadratiques.

Il s'agit de

$$\alpha = \min \{ 1/2. \langle Ax, x \rangle + \langle b, x \rangle : N^t x = a, \|x\| \leq r \} \quad (P_1)$$

A étant une matrice réelle symétrique, N une matrice de type (n,m) de rang m.

Ce problème est vital dans le calcul de la direction de déplacement en optimisation non convexe (voir le chapitre II relatif aux méthodes de région de confiance). L'utilisation de la transformation QR appliquée à la matrice N permet de transformer (P₁) en un problème équivalent dans \mathbf{R}^{n-m} :

$$\beta = \min \{ 1/2. \langle Bv, v \rangle + \langle c, v \rangle : \|v\| \leq r \} \quad (P_2)$$

Parallèlement nous montrons qu'un problème de minimisation quadratique convexe générale

$$\alpha = \min \{ 1/2. \langle x, Ax \rangle + \langle a, x \rangle : 1/2 \langle x, Cx \rangle + \langle b, x \rangle \leq r \}$$

peut être transformé en un problème équivalent de type (P₂). Le problème (P₁) est connu dans la littérature sous le nom de "constrained eigenvalues problem". Il a été étudié sur le plan théorique sous une forme plus simple (sans contraintes linéaire mais avec $\|x\|=r$ au lieu de $\|x\| \leq r$) par Forsythe et Golub (1965) et récemment avec la contrainte $\|x\| \leq r$ [G&a1.88].

Les auteurs ont reconnu la complexité d'un tel problème attribué à la non convexité de $\{ x: \|x\|=r \}$.

Curieusement les travaux de Gay, Moré et Sorensen sur les méthodes numériques pour la résolution de (P_2) , (problème quadratique local dans la méthode de région de confiance pour la minimisation d'une fonction non convexe de classe C^2 dans tout l'espace X) n'en ont pas mentionné des relations susceptibles de résoudre le problème de Golub par leurs méthodes. Ces derniers auteurs ont affirmé que les résultats théoriques de Forsythe et Golub [F-G65] ne sont pas applicables pour la résolution de (P_2) car la contrainte est $\|x\|\leq r$ et non $\|x\|=r$.

Citons dans ce contexte les résultats de Pham Dinh que l'on peut résumer ainsi

i) Tout d'abord, il a pu montrer que les problèmes (P_2) avec contraintes $\|x\|\leq r$ et $\|x\|=r$ sont équivalents. Plus précisément le problème (P_2) avec contraintes égalité $\|x\|=r$ peut être transformé en un problème (P_2) avec contraintes $\|x\|\leq r$ après perturbation diagonale très simple sur la matrice B : on remplace B par $B+\rho I$ avec ρ choisi de façon que $B+\rho I$ ne soit semi-définie positive.

ii) Il a pu établir la stabilité de la dualité lagrangienne pour le problème (P_2) et montrer que l'algorithme introduit plus tôt par Moré, Sorensen [M-S83] (en particulier l'algorithme robuste de Hebden) n'est autre que l'algorithme primal-dual (via la dualité lagrangienne classique appliquée à (P_2)).

Nous avons développé dans cette thèse, en vertu de cela, un nouvel algorithme pour la résolution de (P_2) dans le cas difficile où la méthode de Hebden n'est pas directement utilisable, afin d'économiser le temps de calcul par rapport à l'algorithme de Moré et Sorensen [M-S83].

Nos contributions propres, dans ce Chapitre, consistent en

i) Exploitation de ces résultats notamment sur le plan algorithmique. Nous avons ainsi mis en oeuvre des algorithmes performants pour la résolution du problème (P_1) .

ii) La réalisation effective de la "meilleure" variante du nouvel algorithme "dichotomique" pour la résolution de (P_2) . De très nombreux essais numériques sur une classe de problèmes tests de la littérature [M-S-G81] ainsi que des simulations numériques dans des problèmes concrets ont confirmé la performance et la robustesse de notre algorithme vis à vis de l'algorithme de Moré et Sorensen.

iii) L'implémentation des codes correspondants à l'usage industriel immédiat.

Les méthodes de confiance, très liées aux problèmes quadratiques, sont traitées dans le chapitre II. Ces méthodes ont été introduites, par étapes successives, au début des années 80 avec notamment les travaux de Gay [Ga81], Moré et Sorensen [M-S83] et bien d'autres (voir aussi l'introduction du Chapitre II), pour pallier à l'inconvénient d'avoir une convergence locale des méthodes de type Newton (pour la minimisation d'une fonction non convexe de classe C^2 sur X). La rapidité de ces méthodes repose sur celle des algorithmes de résolution des problèmes quadratiques non convexes locaux (minimisation de l'approximation quadratique de la fonction objectif au k ème itéré sous contrainte $\|d\| \leq r$). Dans le cadre des méthodes de la région de confiance pour la minimisation avec contraintes, différentes approches assez récentes [B-S2 87] utilisent la transformation du problème quadratique local sous contraintes linéarisées en un problème quadratique local sous la seule contrainte $\|x\| \leq r$.

Dans le Chapitre II, nous avons suivi l'approche, qui nous semble la plus intéressante, de Byrd, Schnabel, Schultz (1987). Elle consiste à minimiser successivement une approximation quadratique du lagrangien ordinaire sous, en plus de la contrainte de confiance, les contraintes linéarisées et relaxées (si possible). On mesure la qualité de l'approximation quadratique locale, à l'aide de la fonction de pénalité non différentiable (exacte) suivante

$$\phi(x) = f(x) + \sum_{i=1}^m \mu_i |c_i(x)|$$

où f est la fonction objectif et c_i sont les fonctions contraintes ($i=1, \dots, m$). Des tests numériques ont été réalisés permettant de juger la bonne marche de ces méthodes. Cependant, le passage du cas "sans contraintes" au cas "contraintes non convexes" a des répercussions néfastes sur les qualités de ces méthodes à cause des difficultés inhérentes aux techniques de pénalisation et du volume important de calculs nécessaires à chaque itération. Comme applications importantes à des problèmes réels de grande taille, nous avons traité ces quatre problèmes après modélisations mathématiques adéquates :

(i) Problème de Mécanique de fluides : Simulations numériques de fluides incompressibles dans les conduites planes ou axi-symétriques. En collaboration avec Robert Clermont, Directeur de Recherches et Marie Emmanuelle de la Lande (Equipe de Rhéologie des fluides industriels, Institut de Mécanique de Grenoble).

(ii) Le problème d'analyse multidimensionnelle des tableaux de données de dissimilarité. En collaboration avec G.Drouet D'Aubigny, Professeur du Laboratoire de Statistique et Analyse des données de l'Université de Grenoble II.

(iii) Le problème central, en "Computer Vision ", de détermination de la position et de l'orientation relatives entre une caméra et un objet. Ce problème est connu sous le nom de " The exterior orientation calibration problem". Il s'agit de résoudre le système quadratique

$$q^t A_i q = 0 \quad i = 1, 2, \dots, N$$

$$q^t q = 1, \quad q \in \mathbb{R}^4$$

où A_i sont des matrices symétriques.

Ce travail fait partie d'une collaboration, en cours, avec l'Equipe de Vision par Ordinateur de Monsieur Horau du Laboratoire de l'Informatique Fondamentale et de l'Intelligence Artificielle (LIFIA, Grenoble).

Signalons que ces applications sont traitées avec les différents algorithmes étudiés dans ce travail. Les résultats numériques présentés dans le dernier chapitre confirment la performance et la robustesse de nos codes.

Les Chapitres III et IV concernent les problèmes (1) et (2) de la classification des problèmes d'optimisation non convexe présentés ci-dessus.

Le Chapitre III étudie la question de stabilité de la dualité du problème,

$$\alpha = \text{Sup} \{ f(x) : \gamma(x) \leq 1 \} \quad (P)$$

Dans les deux cas suivants,

(i) $f, \gamma \in \Gamma_0(X)$ positivement homogènes et non négatives et telles que,

γ est une norme et il existe un $b > 0$: $f(x) \leq b \gamma(x)$, i.e, f est finie partout.

(ii) f et γ sont des semi-normes de X telles que $f^{-1}(0) \supset \gamma^{-1}(0)$, i.e., $f(x) \leq b \gamma(x)$.

La première approche consiste en l'application des résultats de Joly [Au76] sur la stabilité de la dualité via les perturbations verticales classiques. Nous obtenons pour cette classe de problèmes non convexes les expressions simples de $h(u)$ et la fonction objectif duale $g(v)$ qui montrent l'inf-dif stabilité de (P). De plus nous pouvons récupérer, comme en optimisation convexe, l'ensemble des solutions x^* de (P) à partir de celui de (P_{v^*}) où $v^* = \alpha$ est l'unique solution du problème dual (D) (i.e., (x^*, v^*) est un point selle du lagrangien $l(x, v)$ (associé à la perturbation). Remarquer au passage que la résolution des problèmes primal et dual revient à calculer le zéro (qui égal à α) de $F(v)$ définie par

$$F(v) = \text{Sup}\{ f(x) - v \gamma(x) : x \in X \} \quad (P_v)$$

qui a une structure assez particulière : $F(v) = 0$ si $v \geq \alpha$ et $+\infty$ sinon; et on a, en plus, $g(v) = v + F(v)$). Le problème (P_v) est de nature d.c. L'étude de $F(v)$ nous amène directement à un algorithme de type primal-dual qui est celui de Dinkelbach (sans vouloir le chercher !!) [Schaible 1981] . La résolution de (P_v) se fait alors avec les méthodes de sous gradients.

Dans la deuxième approche nous remplaçons dans (P) la contrainte $\gamma(x) \leq 1$ par $\gamma^2(x) \leq 1$ et nous étudions directement la dualité lagrangienne ordinaire appliquée à (P). Des résultats analogues, du à Pham Dinh [Ph90,91], ont pu être obtenus mais cette fois l'expression de la fonction duale $g(v)$ nous semble d'une utilisation plus convenable à la résolution de (P). En particulier, il suffit de résoudre deux problèmes (P_v) pour obtenir la solution v^* de (D) et une solution x^* de (P).

Notons au passage que ces résultats ont pu être généralisés récemment à une classe plus large de maximisation convexe [Ph90,91], [Pham Dinh T. et Chine.A, en préparation].

Sur le plan algorithmique, nous indiquons comment utiliser l'expression de la fonction duale pour juger la "globalité" des solutions fournies par les méthodes de sous gradients. Par exemple, en traçant graphiquement la fonction duale (voir chapitre V, partie MDS). On peut aussi l'utiliser en combinant avec une technique récente [Ph91] permettant de repartir d'une solution optimale locale (mais non globale).

Le Chapitre IV suit les grandes lignes des travaux de Pham Dinh [Ph81-91] sur l'optimisation d.c. Il traite les aspects de la dualité d.c et surtout les méthodes de sous gradients. La dualité en optimisation d.c ont été introduite par Toland [To78-79] dans le contexte de calcul des variations en Mécanique. Ses résultats généralisent d'une façon élégante ceux de [Ph75-81] dans le cadre des méthodes de calcul des normes d'opérateurs de matrices. Si la classe de fonctions d.c est assez riche et se prête merveilleusement aux développements théoriques [HU85-90], [Ph85-91], les méthodes de sous gradients en optimisation d.c, elles aussi, sont d'une grande souplesse. Nous présentons une étude très complète sur les régularisations via la perturbation avec la fonction $0.5\mu \|.\|^2$ et nous analysons les retombées heureuses de ces régularisations lors de l'application des algorithmes de sous gradients à la résolution numérique des problèmes MDS de grande taille (allant jusqu'à 2000). D'autres applications montrent aussi l'amélioration de la qualité des méthodes d.c apportée par ces régularisations.

Pour conclure ce Chapitre, nous voudrions exprimer nos émerveillements au moment de la conception des applications et des simulations numériques faites dans un nombre important de problèmes de grande taille. Il nous paraît que les méthodes d.c sont performantes, robustes et fiables au moins lorsque les calculs des suites $\{x^k\}$ et $\{y^k\}$ sont assez économiques. Il nous semble qu'elles sont les meilleures, voire les seules, pour traiter les problèmes non convexes de grande taille rentrant dans la classification précédente.

Enfin, le dernier Chapitre est consacré aux modélisations mathématiques et simulations numériques d'un certain nombre de problèmes concrets d'optimisation non convexe de grande taille. Ces applications concernent tous les algorithmes étudiés dans les chapitres précédents.

En conclusion, cette Thèse présente une étude assez complète d'une classe importante de problèmes d'optimisation non convexe qui font l'objet des recherches acharnées un peu partout dans le monde. Elle suit pour cela les grandes lignes de l'Ecole française dans ce domaine.

Outre les développements appropriés d'ordre théorique et algorithmique, les contributions propres de ce travail se situent au niveau du développement des applications réelles et de l'implémentation effective des codes à l'usage industriel immédiat, des modélisations mathématiques adéquates et des simulations numériques des problèmes concrets de grande taille.

Chose rare et particulièrement appréciée par les spécialistes qui souhaiteraient voir comment se comporter les algorithmes de l'optimisation non convexe lors de la résolution de résolution numérique des problèmes réels de grande dimension.

Reste le problème crucial d'une importance vitale pour les algorithmes de sous gradients : Comment reconnaître si une solution optimale locale obtenue est une solution optimale globale ? Et comment repartir d'une solution optimale non globale vers une solution meilleure et par des corrections successives vers une solution optimale globale ?

Quelques résultats ont pu être obtenus à partir des travaux de [Ph91] concernant le problème de maximisation (le problème (1) ci-dessus). Parallèlement, J.B.Hiriart Urruty [HU91] cherche à donner une réponse à cette question en utilisant la caractérisation

$$\partial_{\varepsilon} h(x) \subset \partial g_{\varepsilon}(x) \quad \forall \varepsilon > 0$$

Il semble que des résultats intéressants [Bomze.M, Danninger.G, Hiriart-Urruty, 1991] ont pu être obtenu pour le problème,

$$\text{Min } \{ \langle Ax, x \rangle : x \in [-1, 1]^n \}$$

Nous pensons que les algorithmes de sous gradients vont jouer un rôle de plus en plus important, dans les années à venir, en ce qui concerne les traitements numériques des problèmes non convexes de grande dimension de cette classification, surtout si de nouveaux résultats relatifs au problèmes posés ci-dessus verront le jour. D'ores et déjà nous nous engageons dans cette voie difficile certes mais toujours passionnante.

CHAPITRE 0

NOTIONS DE BASE ET RAPPELS

Ce chapitre est consacré à la présentation des outils d'analyse convexe et de calcul matriciel nécessaires aux travaux de la Thèse. Nous suivons pour cela les livres de P.J.Laurent [La72], de R.T.Rockafellar [Ro70] et de Auslender [Au76] pour la partie d'analyse convexe et les livres de Golub & al.[G-V83], de Gill.P, Murray.W, Wright.M [G-M-W81] et de Lancaster [Lan69] pour la partie calcul matriciel.

1. ELEMENTS D'ANALYSE CONVEXE

1.1. DEFINITIONS ET NOTATIONS

Dans toute la suite X désigne l'espace vectoriel \mathbf{R}^n muni du produit scalaire usuel

$$\langle x, y \rangle = x^t y = \sum_{i=1}^n x_i y_i \text{ où } x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

On note Y l'espace dual de X relatif à la forme bilinéaire $\langle \cdot, \cdot \rangle$. Cet espace sera identifié à X . $\Gamma(X)$ est l'ensemble des fonctions convexes f définies par

$$f(x) = \sup \{ \langle a_i, x \rangle - \alpha_i : i \in I \}$$

où I est une famille d'indices, $a_i \in Y$ et α_i sont des réels ($\Gamma(X)$ est un cône convexe de sommet 0). On note par $\overline{\mathbf{R}} = \mathbf{R} \cup \{+\infty\} \cup \{-\infty\}$ dont les structures algébriques sont précisées dans [Ro70] et [Au76]. $\Gamma_0(X)$ est l'ensemble des fonctions convexes, semi-continue inférieurement (s.c.i) et propres (i.e, ne prenant jamais la valeur $-\infty$ et non identiquement égale à $+\infty$). Si on note par w_1 et w_2 les fonctionnelles de $\Gamma(X)$ telle que $w_1 = +\infty$ et $w_2 = -\infty$ alors $\Gamma_0(X) = \Gamma(X) \setminus \{w_1, w_2\}$.

f est dit propre si le domaine effectif $\text{dom}(f) = \{x : f(x) < +\infty\}$ n'est pas vide et f est finie sur $\text{dom}(f)$.

Soit $f : X \rightarrow \overline{\mathbf{R}}$, la fonction conjuguée de f , notée f^* , est définie sur Y par :

$$f^*(y) = \sup \{ \langle x, y \rangle - f(x) : x \in X \}$$

Soit $x_0 \in \text{dom}(f)$, on dit que $y \in X$ est un sous-gradient de f en x_0 si l'on a :

$$f(x) \geq f(x_0) + \langle x - x_0, y \rangle \quad \forall x \in X$$

L'ensemble, noté $\partial f(x_0)$, des sous-gradients de f en x_0 sera appelé le sous-différentiel de f en x_0 .

Le sous-différentiel est donc cette multi-application qui à chaque x associe le sous-ensemble $\partial f(x)$ de X .

Soit C un convexe de X , l'intérieur (absolu) de C sera noté par $\text{int}(C)$.

L'intérieur relatif de C , noté $\text{ir}(C)$, est l'ensemble des $x \in C$ tels que $\forall y \in C$ il existe $z \in C : x = \alpha y + (1-\alpha)z$ où $\alpha \in (0,1)$. $\text{ir}(C)$ est donc l'intérieur de C dans la variété linéaire engendré par C , i.e, l'intersection de toutes les variétés linéaires contenant C .

Une partie convexe C est dite polyédrale si

$$C = \bigcap_{i=1}^m \{ x : \langle a_i, x \rangle - \alpha_i \leq 0 \} \text{ où } a_i \in X \text{ et } \alpha_i \text{ sont des réels}$$

Une fonction est dite polyédrale si $f(x) = h(x) + \chi_C(x)$ où C est une partie convexe polyédrale de X et h définie par :

$$h(x) = \sup \{ \langle a_i, x \rangle - \alpha_i, i=1, \dots, k \}.$$

Le symbole χ_C désigne la fonction indicatrice de C , i.e, $\chi_C(x)=0$ si $x \in C$ et $+\infty$ sinon.

On résume dans la proposition suivante les principales propriétés dont on aura besoin pour la suite de la thèse.

1.2. PROPOSITION

- 1) si $f \in \Gamma_0(X)$ alors $f^* \in \Gamma_0(Y)$ et $f = f^{**}$.
- 2) $y_0 \in \partial f(x_0)$ si et seulement si $f(x_0) + f^*(y_0) = \langle x_0, y_0 \rangle$. Par suite, $y_0 \in \partial f(x_0)$ si et seulement si $x_0 \in \partial f^*(y_0)$.
- 3) $\partial f(x_0)$ est une partie convexe fermée, $\partial f(x_0)$ est non vide si $x_0 \in \text{ir}(\text{dom}(f))$. De plus, $\partial f(x_0)$ est une partie compacte convexe non vide si et seulement si f est finie et continue en x_0 (i.e, $x_0 \in \text{int}(\text{dom } f)$).
- 4) $\text{Range}(\partial f) = \cup \{ \partial f(x) : x \in X \} = \text{dom}(\partial f^*)$, $\text{ir}(\text{dom } f) \subset \text{dom}(\partial f) \subset \text{dom}(f)$.
- 5) Soient $f \in \Gamma_0(X)$, A une matrice de type (n,m) (A est une application linéaire de $\mathbb{R}^m \rightarrow X$), $\text{Range}(\partial f) = \text{dom}(\partial f^*)$ et $h(u) = f(Au)$ alors $\partial h(u) \supset A^t \partial f(Au)$, $\forall u \in \mathbb{R}^m$. De plus, si $\text{Range } A \cap \text{ir}(\text{dom } f) \neq \emptyset$ alors on aura : $\partial h(u) = A^t \partial f(Au) \forall u \in \mathbb{R}^m$.
- 6) Soient $f \in \Gamma_0(\mathbb{R})$ et $g \in \Gamma_0(X)$ et $h(x) = f(g(x))$.
Si f est croissante alors h est convexe. De plus, s'il existe $x_0 \in \text{dom}(g)$ tel que $g(x_0) \in \text{ir}(\text{dom } f)$ alors $\partial h(x) = \partial f[g(x)] \partial g(x)$ [HU82].

- 7) Si $\partial f(x) = \{ y \}$ alors f est différentiable en x et $f'(x) = y$.
- 8) Soit $x^* \in X$ ($f(x^*)$ fini), $f(x^*) = \min \{ f(x), x \in X \}$ si et seulement si $0 \in \partial f(x^*)$.
Si $f \in \Gamma_0(X)$ l'ensemble des solutions du problème précédent est égal à $\partial f^*(0)$.
- 9) Soient f_i convexes et propres. S'il existe $x_0 \in X$ en lequel toutes les f_i soient finies et tel que l'une des conditions suivantes soit réalisée :
- i) $f_i \in \Gamma_0(X)$ et toutes les f_i , sauf une au plus, sont continues en x_0
- ii) $x_0 \in \bigcap_{i=1}^p \text{ir}(\text{dom } f_i)$
- alors
- $$\partial \left(\sum_{i=1}^p f_i(x) \right) = \sum_{i=1}^p \partial f_i(x) \quad \forall x .$$
- 10) Si f une fonction propre, convexe et positivement homogène alors
 $f(x) = \langle x, y \rangle \quad \forall y \in \partial f(x)$ et $x \in \text{dom}(f)$. ☛

Ce dernier résultat nous sera utile dans le chapitre III.

1.3. PROPOSITION [Ro72]

- 1) Soit f polyédrale. f est partout finie si et seulement si $C = X$
- 2) Si f est polyédrale alors f^* l'est aussi. De plus, si f est partout finie alors
 $f(x) = \sup \{ \langle a_i, x \rangle - \alpha_i, i=1, \dots, k \}$ et $\text{dom } f^* = \text{co}\{a_i, i=1, \dots, k\}$ et

$$f^*(y) = \min \left\{ \sum_{i=1}^k \lambda_i \alpha_i, y = \sum_{i=1}^k \lambda_i a_i, \lambda_i \geq 0 \text{ et } \sum_{i=1}^k \lambda_i = 1 \right\} .$$

Ici, $\text{co}(C)$ désigne l'enveloppe convexe de C .

- 3) Si f est polyédrale alors $\partial f(x)$ est une partie convexe polyédrale non vide en tout point $x \in \text{dom}(f)$.
- 4) Soit f polyédrale sur X et A une matrice de type (n, m) alors $h(x) = f(Ax)$ est polyédrale et on a $\partial h(x) = A^t \partial f(Ax) \quad \forall x \in \mathbb{R}^m$ si $\text{Range}(A) \cap \text{dom}(f) \neq \emptyset$. ☛

1.4. NOTIONS DE VITESSE DE CONVERGENCE

Soit $\{x^k\}$ une suite de X convergeant vers x^* .

$$\text{Posons } \alpha = \lim_{k \rightarrow \infty} \sup \frac{\|x^{k+1} - x^*\|}{\|x^k - x^*\|}.$$

Si $\alpha < 1$ alors on dit que la convergence est linéaire et α est le taux de convergence.

Si α est trop proche de 1 la méthode est trop lente pour les applications réelles. Et il est préférable d'obtenir une convergence super linéaire qui correspond à la condition suivante :

$$\text{Si } \frac{\|x^{k+1} - x^*\|}{\|x^k - x^*\|} \rightarrow 0 \text{ si } k \rightarrow +\infty.$$

Plus précisément, s'il existe $\gamma > 1$ tel que : $\lim_{k \rightarrow \infty} \sup \frac{\|x^{k+1} - x^*\|}{\|x^k - x^*\|^\gamma} < \infty$ on dit que la convergence est super linéaire d'ordre γ .

En particulier, si $\lim_{k \rightarrow \infty} \sup \frac{\|x^{k+1} - x^*\|}{\|x^k - x^*\|^2} < \infty$ la convergence est quadratique.

On dit que la suite $\{x^k\}$ converge Q-super-linéairement¹ vers x^* si $\|x^{k+1} - x^*\| \leq \alpha_k \|x^k - x^*\|$ avec $\alpha_k \rightarrow 0$ si $k \rightarrow +\infty$.

1.5. CONDITIONS D'OPTIMALITES

Nous présentons ici les conditions d'optimalité pour le problème de minimisation de f sans contraintes où f est de classe C^2 .

CONDITIONS NECESSAIRES

Si x^* est un minimum local de f alors x^* est un point stationnaire (i.e, $\nabla f(x^*) = 0$) et $\nabla^2 f(x^*)$ est semi-définie positive.

CONDITIONS SUFFISANTES

x^* est un minimum local de f si x^* est un point stationnaire et $\nabla^2 f(x^*)$ définie positive.

¹ La terminologie est de Ortéga & al [O-R70]. Ils utilisent le terme one-step Q-superlinearly convergence.

De plus, sous ces conditions x^* est minimum local isolé car il est le seul minimum de f dans un voisinage ouvert $\{x : \|x^* - x\| < \delta\}$ de x^* . En particulier, si f est une forme quadratique de la forme $f(x) = 0.5 x^t A x + x^t g$ où A symétrique alors x^* est un minimum local de f si et seulement si $Ax^* + g = 0$ et A est semi-définie positive. En plus, il est l'unique minimum si et seulement si $Ax^* + g = 0$ et A est définie positive (ou encore x^* est un point stationnaire et f est strictement convexe).

Considérons maintenant le problème général d'optimisation avec contraintes de la forme suivant :

$$\text{Min } \{ f(x) : g_i(x) \leq 0, i \in I = \{1, \dots, m\}; h_l(x) = 0, l \in L = \{1, \dots, p\} \}$$

toutes les fonctions sont supposées continûment différentiables. Sous l'hypothèse standard de qualification des contraintes en x^* , une condition nécessaire pour que x^* soit un optimum local du problème est qu'il existe $\lambda_i \in \mathbb{R}_+, (i=1, \dots, m), \mu_l, l=1, \dots, p$ ($\mu = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_p)$ non contraint en signe) tels que :

$$\lambda_i g_i(x^*) = 0, i=1, \dots, m$$

$$g(x^*) + J^f(x^*) \cdot \lambda + T^h(x^*) \cdot \mu = 0$$

où g est le gradient de f , $J(x^*)$ et $T(x^*)$ sont respectivement le Jacobien de $g=(g_1, \dots, g_m)$ et de h en x^* . Pour assurer l'hypothèse de qualification pour ce problème, on suppose, lorsque le problème n'est ni convexe ni linéaire, que les gradients de $g_i(x)$ et de $h_l(x)$ sont linéairement indépendants pour $\forall i \in I^0 = \{i \in I, g_i(x) = 0\}$.

2. NOTIONS DE STABILITE EN OPTIMISATION NON CONVEXE

Considérons le problème général suivant :

$$\text{Min } \{ f(x) : x \in X \} \quad (\text{P})$$

où f définie sur X à valeurs dans $\bar{\mathbf{R}}$

Nous suivons dans ce paragraphe les livres de P.J.Laurent et de A.Auslender.

2.1. LA DUALITE, LIEE A UNE FAMILLE DE PERTURBATIONS, EN OPTIMISATION NON FORCEMENT CONVEXE.

Soient U et V deux espaces duaux par rapport à la forme bilinéaire usuel ($U = V$ sera identifié à l'espace vectoriel \mathbf{R}^m pour un certain m). Etant donné,

$$\alpha = \text{Inf } \{ f(x) : x \in X \} \quad (\text{P})$$

On perturbe le problème (P) de la façon suivante :

Etant donné, $\varphi(x,u) : X \times U \rightarrow \bar{\mathbf{R}}$ (U espace des perturbation pour le problème (P)) telle que $f(x) = \varphi(x,0) \quad \forall x \in X$, on définit, à l'aide de φ , le problème perturbé, (P_u) ,

$$h(u) = \text{Inf} \{ \varphi(x,u) : x \in X \} \quad (P_u)$$

On sait que $h^{**} \leq h$ (égalité si h^* est dans $\Gamma(U)$). D'où,

$$- \alpha = -h(0) \leq -h^{**}(0) = \text{Inf } \{ h^*(\lambda) : \lambda \in U \}$$

Le problème :

$$\beta = \text{Inf } \{ h^*(\lambda) : \lambda \in U \} \quad (\text{D})$$

qui s'écrit encore sous la forme :

$$\beta = \text{Inf } \{ g(\lambda) : \lambda \in U \} \quad (\text{D})$$

où $g(\lambda) = h^*(\lambda) = \Psi(0, \lambda)$ où Ψ la fonction conjuguée de φ .

Le problème (D) sera appelé le dual de (P) par rapport aux perturbations φ .
Rappelons que $\beta = -h^{**}(0)$.

2.2. LE LAGRANGIEN, LIÉ A FAMILLE DE PERTURBATIONS.

On appelle le lagrangien de (P), lié à φ , la fonction $l(x, \lambda)$ définie sur $X \times U$ à valeurs dans $\overline{\mathbf{R}}$ par

$$l(x, \lambda) = \sup \{ \langle u, \lambda \rangle - \varphi(x, u) \}$$

$l(x, \lambda)$ est convexe en λ (c'est la conjuguée de φ_x ci-dessous). Le lagrangien classique est défini par, $L(x, \lambda) = -l(x, \lambda)$. On peut montrer facilement que,

$$\beta = \inf \{ \sup \{ l(x, \lambda) : x \in X \} : \lambda \in U \}$$

On notera, pour toute la suite, par φ_x l'application $u \rightarrow \varphi(x, u)$.

Les définitions suivantes et les résultats concernant la stabilité sont valables (sous certaines conditions évidemment) dans le cas non forcément convexe.

2.3. DEFINITIONS

- 1) Le problème (P) est dit stable si h est fini et continue en $0 \in U$.
- 2) Le problème (P) est dit inf-stable si h est fini et s.c.i en $0 \in U$.
- 3) Le problème (P) est dit inf-dif stable si $h(0)$ est fini et $\partial h(0) \neq \emptyset$.
- 4) On dit que le couple (x^*, λ^*) est un point selle (col) du lagrangien associé à (P) à l'aide de la perturbation φ , si

$$l(x, \lambda^*) \leq l(x^*, \lambda^*) \leq l(x^*, \lambda) \quad \forall x \in X, \forall \lambda \in U$$

On remarque que si h est convexe alors la stabilité implique l'inf-stabilité et l'inf-dif stabilité. On résume dans la proposition suivante les résultats de stabilité concernant le cas non forcément convexe.

On fera d'abord les deux hypothèses suivantes :

L'application $\varphi_X : u \rightarrow \varphi(x, u) \in \Gamma(U)$ (H1)

h est convexe sur X (H2)

2.4. PROPOSITION [Au76]

Sous les hypothèses (H1) et (H2) on a,

- 1) les deux propriétés suivantes sont équivalentes :
 - i) Le problème (P) est inf-stable.
 - ii) $-\beta = \alpha =$ nombre fini.
- 2) On a l'équivalence entre les deux propriétés suivantes
 - a) (P) est inf-dif stable,
 - b) (P) est inf stable et l'ensemble des solutions de (D) est non vide.

2.5. REMARQUES

- a) On a, dans le cas général, des relations entre la solution du bidual de (P) et la solution duale lorsque le problème (P) est inf-dif stable.
- b) On a également une relation entre le point selle et la solution duale et biduale et les montants du dual et bidual [cf.A. Auslender, 1976].

3. NOTATIONS

On note constamment $\lambda_1 \leq \lambda_2 \dots \leq \lambda_n$ les valeurs propres de A (matrice symétrique) et v_i le vecteur propre associé à λ_i avec $\langle v_i, v_j \rangle = \delta_{ij}$ où δ_{ij} est le symbole de Kronecker.

Tout n -vecteur b peut être exprimé à l'aide des éléments propres par $b = \sum_{i=1}^n (b^t v_i) v_i$.

Le pseudo-inverse² de la matrice A sera noté A^+ [Lancaster 69] Enfin, l'orthogonale à $\mathfrak{N}(A - \lambda_1 I)$ sera noté $\mathfrak{N}(A - \lambda_1 I)^\perp$ ou en abrégé \mathfrak{N}_1 où $\mathfrak{N}(A) = \{x : Ax = 0\}$.

² On définit A^+ comme étant la solution de norme minimale (au sens des moindres carrés) de $Ax = y$.

CHAPITRE I

**ETUDE D'UNE CLASSE DE PROBLEMES
QUADRATIQUES NON CONVEXES
ALGORITHMES NUMERIQUES DE RESOLUTION**

PARTIE 1

**ETUDE ET ALGORITHMES DE RESOLUTION
D'UNE CLASSE DE PROBLEME QUADRATIQUES**

1. INTRODUCTION

Un nombre important d'algorithmes de minimisation sans contraintes emploient des approximations quadratiques Ψ de la fonction objectif $f : X \rightarrow \mathbf{R}$. Parmi ces algorithmes figure une approche récente communément appelée la région de confiance. L'algorithme de la région de confiance consiste à résoudre une suite de problèmes quadratiques sous la présence d'une seule contrainte (dite contrainte de confiance) de la forme $\|d\| \leq \delta$ où δ est un nombre positif appelé rayon de confiance où $\|\cdot\|$ désigne la norme Euclidienne.

Soit le problème,

$$\text{Min} \{ 0.5 x^t H x + x^t g : \|x\| \leq r ; x \in X \} \quad (\text{Q})$$

où $r > 0$, H symétrique d'ordre n et $g \in X$. On note $q(x) = 0.5 x^t H x + x^t g$.

Ce problème quadratique est très important en optimisation non convexe pour les raisons suivantes :

- Plusieurs problèmes quadratiques se ramènent à la résolution d'un problème de type (Q) (cf. paragraphe suivant).
- La solution de ce problème se ramène à localiser un réel positif satisfaisant certaines conditions simples.
- C'est un des rares problèmes non convexes dont on connaît une caractérisation (CNS) complète de ses solutions.

Dans les paragraphes suivants nous allons étudier et résoudre les problèmes quadratiques précédents. Nous donnons ensuite les conditions nécessaires et suffisantes pour le problème quadratique (Q). Nous montrerons qu'une classe de problèmes quadratiques se ramène à des problèmes de type (Q).

2. CLASSIFICATION DES PROBLEMES QUADRATIQUES

Considérons les problèmes suivants

$$\text{Min} \{ 0.5 \langle Ax, x \rangle + \langle c, x \rangle : \|x\| = 1, x \in X \} \quad (2.1.1)$$

et

$$\text{Min}\{ 0.5 \langle Ax, x \rangle + \langle c, x \rangle : \|x\| = 1, B^t x = w \text{ où } x \in \mathbf{R}^n \text{ et } w \in \mathbf{R}^m \} \quad (2.1.2)$$

où A symétrique et B est une matrice $n \times m$ de rang égal à m .

$$\text{Min}\{ 0.5 \langle Ax, x \rangle + \langle c, x \rangle : 0.5 \langle Bx, x \rangle + \langle d, x \rangle \leq 0.5r^2 \} \quad (2.1.3)$$

A et B sont symétriques et semi-définies positives.

2.1 THEOREME³ [Ph89]

Le problème (2.1.1) est équivalent au problème suivant :

$$\text{Min}\{ 0.5 \langle (A + \rho I) x, x \rangle + \langle c, x \rangle : \|x\|^2 \leq 1 \} \quad (P_\rho)$$

avec ρ un réel pour lequel $(A + \rho I)$ est non semi-définie positive.

Autrement dit, le problème (2.1.1) se ramène au problème (Q).

En effet, soit $(A + \rho I)$ non semi-définie positive alors les solutions du problème (P_ρ) appartiennent à $\{x : \|x\| = 1\}$ car si le problème admet une solution dans $\{x : \|x\| < 1\}$ alors la matrice $(A + \rho I)$ est nécessairement semi-définie positive (cf. Théorème 3.1 suivant). Et l'équivalence de ces deux problèmes découle du fait que le terme $\rho \|x\|^2$ est constamment égal à ρ dans $\{x : \|x\|^2 = 1\}$.

2.2. REMARQUES

i) Nous pouvons choisir ρ tel que $\rho + a_{ii} < 0$ pour un certain i . En particulier, s'il existe un i tel que $a_{ii} < 0$ alors on prend $\rho = 0$.

2.3. MINIMISATION QUADRATIQUE SUR L'INTERSECTION DE LA BOULE UNITE AVEC UNE VARIETE.

Soit le problème suivant :

$$\text{Min}\{ 0.5 \langle Ax, x \rangle + \langle c, x \rangle : \|x\| = 1, B^t x = w \} \quad (2.1.2)$$

avec A symétrique d'ordre n , B est une matrice $n \times m$ de rang égal à m et w un vecteur de \mathbf{R}^m . On suppose que (2.1.2) admet au moins une solution (le domaine des contraintes peut être vide). On constatera que (2.1.2) est un problème quadratique non convexe appelé souvent "Constrained Eigenvalues Problem".

³ En fait, Pham Dinh Tao étudie, dans un cadre plus général, la minimisation quadratique hermitienne sur la sphère unité. Ici on raffine les conditions portant sur ρ .

De nombreux auteurs se sont penchés sur ce problème (voir, en particulier, l'article de Gander, Golub & Matt [G2-M89]).

Nous allons transformer le problème initial (2.1.2) en un problème de minimisation d'une forme quadratique sur une boule Euclidienne. Soit Z une base orthonormée de \mathbb{R}^m (i.e, $B^t Z = 0$ et $Z^t Z = I$) et mettons $x = v + Zu$ où $v \in \text{Im}(B)$ vérifiant l'équation $Bv = w$ (un tel v existe puisque les colonnes de B sont linéairement indépendantes). Ceci permet d'écrire le problème (2.1.2) sous une forme équivalente :

$$\text{Min } \{ q_1(u) : \|u\|^2 = (1 - \|v\|^2) ; u \in \mathbb{R}^{n-m} \}$$

$$\text{où } q_1(u) = 1/2 \langle Z^t A Z u, u \rangle + \langle Z^t (c + Av), u \rangle + 0.5 \langle Av, v \rangle.$$

Or, ce dernier problème se ramène facilement, d'après le théorème (2.1), à un problème de la forme (Q). Signalons, enfin, que le terme $(1 - \|v\|^2)$ est positif si le problème (2.1.2) admet une solution [G2-M89].

2.4 MINIMISATION QUADRATIQUE SOUS DES CONTRAINTES QUADRATIQUES

Soit le problème

$$\text{Min } \{ 0.5 \langle Ax, x \rangle + \langle c, x \rangle : 0.5 \langle Bx, x \rangle + \langle d, x \rangle \leq 0.5r^2 \} \quad (2.1.3)$$

où A et B sont des matrices symétriques et semi-définies positives.

Nous établirons dans ce paragraphe la relation entre le problème (Q) et (2.1.3). Le problème (2.1.3) consiste à minimiser une forme quadratique convexe sur des contraintes quadratiques convexes.

Signalons que ce problème est plus général que le problème des moindres carrés sous des contraintes quadratiques.

En effet, le problème $\text{Min} \{ \|Tx - u\|^2 : \|Mx - v\| \leq r \}$ où T, M symétriques d'ordre n , peut s'écrire sous la forme :

$$\text{Min } \{ 0.5 \langle T^t T x, x \rangle + \langle u', x \rangle : \langle M^t M x, x \rangle + \langle d', x \rangle \leq r^2 \}$$

Puisque $T^t T, M^t M$ sont semi-définies positives, il s'agit bien d'un problème de la forme (2.1.3).

Afin de transformer le problème (2.1.3), nous distinguons les deux cas suivants :

Cas 1. B est définie positive, $B = R^t R$ (Cholesky).

Soit $Bw = -d$, i.e., $0.5 \langle Bx, x \rangle + \langle d, x \rangle$ est minimum en w . De plus,
 $\langle w, Bw \rangle = \langle d, B^{-1}d \rangle$. Un calcul simple montre que le problème (2.1.3) est équivalent à

$$\text{Min } \{ q(x) : \langle R(x - w), R(x - w) \rangle \leq 0.5 \rho^2 \} \text{ avec } \rho^2 = r^2 + \langle w, Bw \rangle \quad (*)$$

où $q(x) = 0.5 \langle Ax, x \rangle + \langle c, x \rangle$ et il est évident que le problème (*) est, à un changement près, de la forme (Q).

Cas 2. Si B est seulement semi-définie positive et $d \in \text{Im}(B) = \mathcal{N}(B^t)$.

La matrice B étant seulement semi-définie positive, on peut supposer que le rang(B) = m < n et par suite on peut extraire une (m,n) sous-matrice (notée B_J) de lignes linéairement indépendantes. Il faut noter également que le système $Bx = -d$ admet une solution car $d \in \text{Im}(B)$.

Nous allons d'abord calculer le vecteur w qui minimise la forme quadratique $0.5 \langle Bx, x \rangle + \langle d, x \rangle$ à l'aide de la décomposition QR de la sous-matrice B_J^t de colonnes linéairement indépendants ce qui nous donne

$$B_J^t = QR = (Q_1, Q_2) \begin{pmatrix} \tilde{R} \\ 0 \end{pmatrix} = Q_1 \tilde{R}$$

où \tilde{R} est triangulaire supérieure.

En décomposant $x = Q_1 u + Q_2 v$ avec Q_1 est une base de $\text{Im}(B_J^t)$ et Q_2 (n,n-m) une base de $\mathcal{N}(B_J) = \mathcal{N}(B)$. Les variables u, v sont libres respectivement dans $\mathbf{R}^m, \mathbf{R}^{n-m}$. Donc d'une part, l'équation $Bx = -d$ équivalente à $B_J x = -d_J$ devient, à l'aide de ce changement, $\tilde{R}^t u = -d_J$. Notons u^* la solution de cette équation.

Il en découle que le vecteur $w = Q_1 u^*$ est le minimum cherché. De plus, il est de norme minimale puisque $Q_1 u^* \in \text{Im}(B_J^t)$. Et le problème (2.1.3) se ramène alors à :

$$\text{Min } \{ p(u, v) ; (u, v) \in C \} \quad (P_{uv})$$

où $p(u, v) = 0.5 \langle u, Q_1^t A Q_1 u \rangle + \langle Q_1^t b, u \rangle + 0.5 \langle v, Q_2^t A Q_2 v \rangle + \langle Q_2^t b, v \rangle + \langle A Q_2^t v, Q_1 u \rangle$

et $C = \{ (u,v) \in \mathbf{R}^m \times \mathbf{R}^{n-m} : 0.5 \langle u-u^*, Q_1^t B Q_1 (u-u^*) \rangle \leq \alpha + 0.5 \langle u^*, Q_1^t B Q_1 u^* \rangle \}$.

On remarquera que $Q_1^t B Q_1$ est symétrique définie positive car B est semi-définie positive (la restriction de la forme quadratique convexe $\langle x, Bx \rangle$ sur $\text{Im}(B)$ devient strictement convexe).

Pour la suite, on aura besoin du résultat suivant [Au76] :

2.4.1. LEMME

Soient $k(u,v)$ une fonction convexe en u et v et $h(u) = \inf\{k(u,v), v \in \mathbf{R}^{n-m}\}$.

Alors la fonction h est convexe en u .

En vertu de ce lemme et sachant que $p(u,v)$ est une forme quadratique en u et en v , on minimise d'abord $p(u,v)$ par rapport à la variable v avec u fixe, non contraint, puis on minimise $p(u,v)$ par rapport à u (v remplacé par sa valeur, fonction de u , dans $p(u,v)$).

La minimisation par rapport à v est sans contraintes. D'où, v est minimum de $p(u,v)$ pour u fixe si et seulement si,

$$Q_2^t A Q_2 v + Q_2^t b = -Q_2^t A Q_1 u \quad (***)$$

La résolution de (1) nécessite beaucoup de soin. En fait, si (***) n'admet pas de solution alors le problème $(P_{u,v})$ et (P) n'admettent pas de solution. Dans le cas contraire, le calcul de la solution n'est pas facile sauf si A est définie positive auquel cas $Q_2^t A Q_2$ est définie positive car les colonnes de Q_2 sont linéairement indépendantes. Si A est seulement semi-définie positive, on introduit le pseudo-inverse de A pour obtenir des formules analogues (rappelons que le pseudo-inverse d'une matrice symétrique semi-définie positive est symétrique s.d. positif).

Par souci de ne pas alourdir les notations, on suppose, pour la suite, que la matrice A est définie positive. Avec cette hypothèse, on sait calculer explicitement la solution v^* de l'équation (***). Par conséquent,

$$v^* = -(Q_2^t A Q_2)^{-1} (Q_2^t b + Q_2^t A Q_1 u)$$

En remplaçant v^* dans $p(u,v)$ on obtient,

$$p(u,v^*) = q_0(u) = 0.5 \langle u, W u \rangle + \langle \tilde{b}, u \rangle$$

$$\text{où, } W = Q_2^t A Q_1 + Q_1^t A Q_1 + Q_1^t A Q_2 (Q_2^t A Q_2)^{-1} Q_2^t A Q_1$$

$$\text{et } \tilde{b} = Q_1^t b + Q_2^t b - 0.5 Q_1^t A Q_2 (Q_2^t A Q_2)^{-1} Q_2^t b$$

Finalement, il reste à minimiser la forme $q_0(u)$ sous la contrainte,

$$u \in \{ u' \in \mathbf{R}^m : 0.5 \langle u' - u^*, Q_1^t B Q_1 (u' - u^*) \rangle \leq \alpha + 0.5 \langle u^*, Q_1^t B Q_1 u^* \rangle \}$$

qui se ramène facilement à un problème de type (Q) car $Q_1^t B Q_1$ est définie positive et W est semi-définie positive d'après le lemme précédent.

2.5 REMARQUES

Si le système $Bw = -d$ est incompatible, i.e, d ne peut être exprimé comme combinaison linéaire des colonnes de B , alors la forme quadratique $0.5 \langle Bx, x \rangle + \langle d, x \rangle$ n'est pas bornée et le domaine $\{ x : 0.5 \langle Bx, x \rangle + \langle d, x \rangle \leq 0.5 r^2 \}$ est toujours non vide.

3. ETUDE DU PROBLEME (Q)

Rappelons la forme du problème principal

$$\text{Min } \{ q(x) = 0.5 x^t H x + x^t g : \| x \| \leq r ; x \in X \} \quad (Q)$$

Le problème (Q) consiste à minimiser une forme quadratique sur une sphère. Puisque le domaine admissible $\{ x \in X : \| x \| \leq r \}$ est compact, le problème admet une solution (elle est unique lorsque H est définie positive).

Dans le paragraphe suivant nous donnerons une caractérisation nécessaire et suffisante des solutions de (Q). Le théorème suivant stipule que (Q) est équivalent à un problème de minimisation sans contraintes d'une certaine forme quadratique (au moins) convexe obtenue à partir de $q(x)$ en renforçant, d'une manière précise, la diagonale de H. Signalons que les deux dernières conditions du théorème suivant sont les conditions d'optimalité de Kuhn-Tucker.

3.1. THEOREME [M-S83]

x^* est une solution de (Q) si et seulement s'il existe un réel $\mu \geq 0$ tel que :

(i) $(H + \mu I)$ est semi-définie positive

(ii) $(H + \mu I)x^* = -g$

(iii) $\| x^* \| \leq r$ et $\mu(r - \| x^* \|) = 0$

Un tel μ est unique.

Le multiplicateur μ est appelé, pour toute la suite, le multiplicateur de (Q).

Il est évident que les conditions (ii) et (iii) ne sont autres que les conditions d'optimalité de Kuhn-Tucker. En outre, si la matrice H est semi-définie positive alors (Q) est un problème convexe.

Le problème (Q) n'admet pas de solution dans $\{ x : \| x \| = r \}$ si et seulement si H est définie positive et $\| H^{-1}g \| < r$. En effet, si toutes les solutions x^* de (Q) vérifie $\| x^* \| < r$ alors d'après le théorème précédent H est semi-définie positive et par suite si H est singulière alors on peut trouver un vecteur z tel que $H z = 0$ avec $\| x^* + z \| = r$. Et d'après le même théorème $x^* + z$ est une solution de (Q) ce qui est absurde.

Le théorème 3.1 fournit un schéma algorithmique pour résoudre (Q). On pense déjà à partir d'un scalaire μ positif tel que $(H+\mu I)$ est définie positive puis on résout le système $(H+\mu I)x^* = -g$.

Si un tel choix de μ est convenable (i.e, (iii) est vérifiée) le problème est ainsi résolu. Sinon, il faut choisir un nouveau μ . Mais comment le choisir ?. Nous reviendrons à cette question plus loin.

Désignons par λ_1 la valeur propre minimale de H et par $K = \{\mu \in \mathbf{R}_+ : (H+\mu I) \text{ est non singulière}\}$, on définit sur $]-\lambda_1, +\infty[$ la fonction $\phi(\mu) = \|x(\mu)\|$ où $x(\mu)$ est la solution du système $(H+\mu I)x = -g$.

Partant du fait que la solution du problème (Q) est intimement liée à l'équation non linéaire $\phi(\mu) = r$ pour $\mu > -\lambda_1$, nous allons présenter un algorithme efficace pour résoudre cette équation.

Soit v_i le vecteur propre associé à λ_i ($i = 1, 2, \dots, n$). On obtient à partir de l'équation $(H+\mu I)x = -g$ l'expression spectrale de ϕ suivante :

$$\phi(\mu) = \sqrt{\sum_{i=1}^n \left[\frac{g^t v_i}{\lambda_i + \mu} \right]^2} \quad (1)$$

On notera que si $\mu \rightarrow +\infty$ on a $\phi(\mu) \rightarrow 0_+$, en outre lorsque $g \neq 0$, ϕ est strictement décroissante sur $]-\lambda_1, +\infty[$ et ϕ^2 est convexe. L'équation $\phi(\mu) = r$ conduit à s'intéresser à la limite de $\phi(\mu)$ lorsque μ tend vers $-\lambda_1$. Si $g^t v_1 \neq 0$ alors $\phi(\mu) \rightarrow +\infty$ si $\mu \rightarrow -\lambda_1$. Si par contre g est perpendiculaire à $\mathcal{N}(H - \lambda_1 I)$, $\phi(\mu) \rightarrow \text{constante}$ si $\mu \rightarrow -\lambda_1$ (la constante est donnée dans le lemme suivant).

Le cas où l'équation $\phi(\mu) = r$ n'admet pas de solution dans $]-\lambda_1, +\infty[$ sera appelé le cas critique. Signalons que ce cas est trop difficile sur le plan numérique.

3.2. LEMME

1°. Si g est perpendiculaire à $\mathcal{N}(H - \lambda_1 I)$ alors $\lim_{\lambda \rightarrow \lambda_1} \phi(\lambda) \rightarrow \text{cst}$ avec $\lambda > -\lambda_1$ où

$\text{cst} = \|(H-\lambda_1 I)^+ g\|$ et $(H-\lambda_1 I)^+$ est le pseudo-inverse de $(H-\lambda_1 I)$.

2°. L'équation $(H-\lambda_1 I) x = -g$ admet une solution si et seulement si g est perpendiculaire à $\mathfrak{N}(H-\lambda_1 I)$. L'ensemble de solutions est $x^* + \mathfrak{N}(H-\lambda_1 I)$ où

$$\begin{aligned} v_i^t x^* &= 0 & \text{si } i \in J_1 = \{ k : \lambda_k = -\lambda_1 \} \text{ et} \\ v_i^t x^* &= -g^t \cdot v_i / (\lambda_i + \mu) & \text{sinon.} \end{aligned}$$

Dans ce qui suit nous allons expliciter la solution du problème quadratique dans tous les cas possibles.

3.3 LEMME

Supposons $g \neq 0$.

1°. Si H est définie positive et $\|H^{-1}g\| \leq r$ alors $x = -H^{-1}g$ est l'unique solution de (Q).

2°. Si H est définie positive et $\|H^{-1}g\| > r$ alors il existe une solution unique μ^* positive telle que $\phi(\mu) = r$.

3°. Si $\lambda_1 \leq 0$ alors :

a) Si $\|(H-\lambda_1 I)^+ g\| \leq r$ et $(H-\lambda_1 I)(H-\lambda_1 I)^+ g = g$ alors l'ensemble des solutions du problème (Q) est $\{ x : x = u - (H-\lambda_1 I)^+ g \text{ avec } u \in \mathfrak{N}(H-\lambda_1 I) \text{ et } \|x\| \leq r \}$ et $\mu^* = -\lambda_1$ est l'unique réel satisfaisant le théorème (3.1).

b) Si, par contre, $\|(H-\lambda_1 I)^+ g\| > r$ ou $(H-\lambda_1 I)(H-\lambda_1 I)^+ g \neq g$ alors l'équation $\phi(\mu) = r$ admet une solution μ^* unique avec $\mu^* > -\lambda_1$.

4°. Si $\lambda_n \leq 0$ alors le problème (Q) admet des solutions sur la frontière du domaine admissible $\{x : \|x\| \leq r\}$ à moins que la fonction objectif soit constante. 🍏

Preuve

1° En effet, le réel $\mu=0$ satisfait les conditions du théorème (3.1).

2° Comme la fonction $\phi(\mu)$ est strictement décroissante, on peut partir d'un point initial (soit $\mu=0$, car $\phi(0) > r$ d'après l'hypothèse) et construire ainsi une suite décroissante μ^k qui tend vers μ^* telle que $\phi(\mu^*) = r$.

4° En effet, la forme quadratique est concave et les solutions de (Q) appartiennent à $\{x : \|x\| = r\}$ [R70] .

Considérons maintenant le cas g est nul. Le résultat suivant donne l'ensemble des solutions de (Q).

3.4 LEMME

Supposons g est nul. L'ensemble des solutions de (Q) est :

$\{0\}$ si H est définie positive.

$\{x \in \mathcal{N}(H) : \|x\| \leq r\}$ si $\lambda_1 = 0$.

$\{x \in \mathcal{N}(H - \lambda_1 I) : \|x\| = r\}$ si $\lambda_1 < 0$.

La preuve est facile à partir de l'écriture du CNS établie dans le théorème (3.1).

4. ALGORITHME DE HEBDEN POUR RESOUDRE $\phi(\mu) = r$

Le paragraphe suivant sera consacré à l'algorithme de Hebden pour résoudre l'équation

$$\phi(\mu) - r = 0 \quad (2)$$

sur l'intervalle $]-\lambda_1, +\infty[$.

Reinsch [Re71] et Hebden [He78] ont constaté séparément que la méthode de Newton basée sur une approximation linéaire locale de $\phi(\mu)$ n'est pas la bonne approche car elle ne tient pas en compte la structure rationnelle de $\phi(\mu)$. Donc, au lieu d'une approximation linéaire de $\phi(\mu)$, on emploie une approximation rationnelle locale $\tilde{\phi}$ de la forme

$$\tilde{\phi}(\mu) = \alpha / (\beta + \mu).$$

vérifiant à chaque itération (soit k) les deux conditions :

$$\tilde{\phi}(\mu^k) = \phi(\mu^k) \text{ et } \tilde{\phi}'(\mu^k) = \phi'(\mu^k)$$

où μ^k est l'itéré courant.

D'où, l'algorithme de Hebden est

4.1 ALGORITHME

0) Soit $k=0$ et μ^k un réel choisi tel que $\mu^k \in] \max(0, -\lambda_1), +\infty[$ et $\phi(\mu^k) > r$.

1) Factoriser par Cholesky la matrice $(H+\mu^k I)$. Soit $(H+\mu^k I) = R^t R$.

2) Calculer le vecteur x solution de $R^t R x = -g$.

3) Calculer le vecteur p solution de $R^t p = x$.

$$4) \mu^{k+1} = \mu^k + \left[\frac{\|x\|}{\|p\|} \right]^2 \left(\frac{\|x\| - r}{r} \right)$$

5) Si $|\phi(\mu^k) - r| > \varepsilon$ alors retourner à (1) avec $k=k+1$.

Fin de l'algorithme.

L'algorithme de Hebden est une méthode efficace de convergence quadratique destinée à résoudre l'équation non linéaire (2) dans l'intervalle $] -\lambda_1, +\infty[$. Cet algorithme n'est autre que la méthode de Newton appliquée à l'équation : $\psi(\mu) = 0$ où ψ est une fonction convexe [Re71] définie sur $] -\lambda_1, +\infty[$ par $\psi(\mu) = 1/r - 1/\phi(\mu)$. La convexité de ψ est d'une grande importance dans la construction du nouvel algorithme.

4.2 REMARQUES

1) Si $\mu^0 > -\lambda_1$ et $\phi(\mu^0) > r$ alors, pour tout k , on a $\mu^k > -\lambda_1$.

2) On remarquera que le calcul de la dérivée de $\phi(\mu)$ a été remplacé intelligemment par la résolution du système linéaire de l'étape (3). Plus précisément, on peut démontrer facilement que $\phi'(\mu) \phi(\mu) = -\|p\|^2$ où p est la solution de $R^t p = x$.

3) La seconde partie de ce chapitre est consacré à l'étude de la dualité lagrangienne de (Q). Nous établirons le lien qu'il y a entre l'algorithme de Hebden et la recherche du zéro du gradient de la fonction objectif dual. On montre, en particulier, que l'algorithme de Hebden est la méthode de Newton (encore elle!) appliquée à la recherche du zéro du gradient de la fonction objectif dual.

D'où il me semble qu'on peut expliquer l'efficacité de cet algorithme par l'introduction des dérivées du second ordre dans la résolution de l'équation (2).

4) Dans l'algorithme général de la région de confiance, on fait appel à l'algorithme de Hebden dans les cas suivants :

- i) Si H est définie positive et le pas de Newton $-H^{-1}g$ est trop grand ($\|H^{-1}g\| > r$) alors on applique l'algorithme de Hebden avec $\mu^0 = 0$ comme itéré de départ.
- ii) Si $\lambda_1 \leq 0$ et le multiplicateur de (Q) est différent de $-\lambda_1$ alors on peut localiser (par Dichotomie, par exemple) une valeur μ telle que $\phi(\mu) > r$ puis on applique Hebden avec cette valeur comme point de départ. On trouvera plus de détails dans le Chapitre II. Notons au passage que l'algorithme de Hebden est très puissant et donne des solutions précises. Dans tous les exemples traités le nombre moyen d'itérations nécessaires pour obtenir une bonne approximation de la solution μ^* est généralement faible indépendamment de la taille du problème et est de l'ordre de quatre itérations. En plus, le calcul très coûteux des dérivées de $\phi(\mu)$ a été remplacé tout simplement par la résolution d'un système linéaire simple. Enfin, la factorisation de l'étape (1) est celle de Cholesky où R est une matrice triangulaire supérieure.

4.3. COMPARAISON

Nous allons appliquer la méthode de Newton à la résolution des trois équations non linéaires équivalentes,

$$\psi(\mu) = 1/r - 1/\phi(\mu) = 0 \quad (*)$$

$$\phi(\mu) - r = 0 \quad (**)$$

$$\phi^2(\mu) - r^2 = 0 \quad (***)$$

On a les formules suivantes (pour tout $\mu > -\lambda_1$),

$$\mu^+(\psi) = \mu - \alpha_1 \frac{(\phi(\mu)-r)}{\phi'(\mu)}; \text{ où } \alpha_1 = \frac{\phi(\mu)}{r} \quad (\text{une itération de Hebden})$$

$$\mu^+(\phi^2 - r^2) = \mu - \alpha_2 \frac{(\phi(\mu)-r)}{\phi'(\mu)}; \text{ où } \alpha_2 = \frac{\phi(\mu)+r}{2\phi(\mu)}$$

$$\mu^+(\phi - r) = \mu - \alpha_3 \frac{(\phi(\mu) - r)}{\phi'(\mu)} \quad \text{où } \alpha_3 = 1$$

Ici $\mu^+(T)$ désigne une itération de la méthode de Newton appliquée à $T(\mu)=0$ et α_i sont les pas de déplacements associés. Pour comparer ces différents pas, nous analysons la quantité $\alpha_1 - \alpha_2$ en fonction de $\phi(\mu)$ sachant qu'elle est positive dans ce contexte. On remarquera facilement, r étant fixe et en posons $x = \phi(\mu)$, que $\alpha_1 - \alpha_2$ est de même signe que la fonction $w(x)$ pour $x > 0$ où, $w(x) = 2x^2 - rx - r^2$.

D'où les propriétés suivantes :

4.3.1. PROPRIETES

- 1) Si $\phi(\mu) \geq r$ alors $\alpha_1 \geq \alpha_2 \geq \alpha_3 = 1$ et $\alpha_1 < \alpha_2 < \alpha_3 = 1$ si $0 < \phi(\mu) < r$.
- 2) On a $\forall \mu > -\lambda_1, \forall r > 0, \mu^+(\psi) > \mu^+(\phi(\mu) - r) > \mu^+(\phi(\mu)^2 - r^2)$.

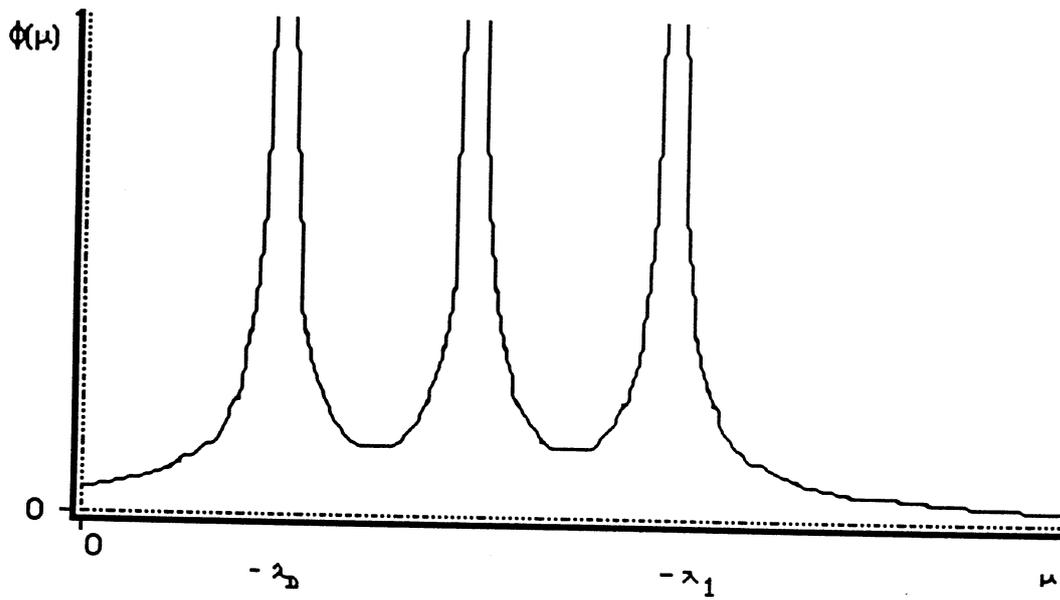
Ces deux propriétés sont faciles à démontrer à partir du signe de la fonction $w(x)$.

Par conséquent, l'itéré de Hebden réalise le meilleur progrès vers la solution de l'équation dans tous les cas.

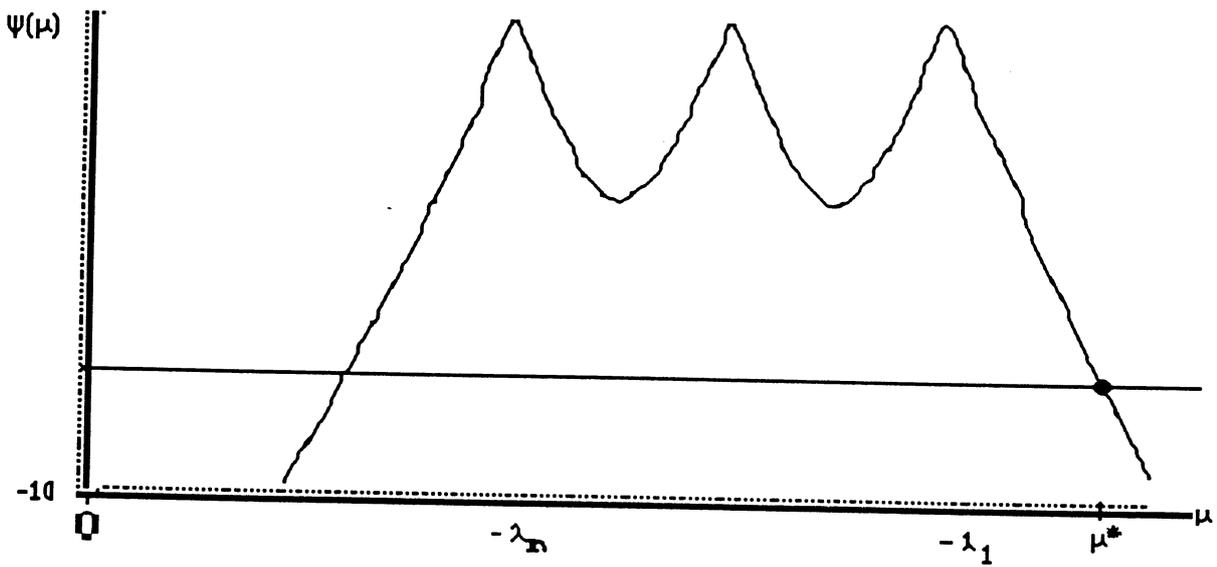
Cette remarque permet d'expliquer également l'efficacité de l'algorithme notamment lorsque $\phi(\mu) > r$. Par contre, lorsque $\phi(\mu) < r$, le pas α_1 est le plus petit et ça permet de rester dans le domaine $\{ \mu : \mu > -\lambda_1 \}$ et proche de la solution.

Nous terminons ce paragraphe par les graphes de $\phi(\mu)$ et $\psi(\mu)$. Ils permettent de voir mieux le fonctionnement de l'algorithme.

$$\phi(\mu) = \|(A + \mu I)^{-1} g\|$$



$$\psi(\mu) = -1/\phi(\mu)$$



5. METHODES NUMERIQUES DE RESOLUTION DE (Q)

5.1 NOUVELLE METHODE

Nous commençons par présenter un nouvel algorithme destiné à la résolution complète du problème (Q). L'algorithme en question distingue deux situations : le cas de H définie positive et le cas contraire. Dans le premier cas, le problème (Q) est complètement résolu sans recourir à la décomposition de l'intervalle de départ. Dans le second cas, l'objectif du nouveau schéma est de localiser le multiplicateur de (Q). Ce qui revient à dire, en pratique, qu'on cherche un μ tel que $(H+\mu I)$ soit définie positive et $(H+\mu I)x^* = -g$ avec $\mu = 0$ si $\|x^*\| < r$. En fait, vue la propriété de décroissance de $\phi(\mu)$, on peut partir d'un scalaire μ appartenant à un intervalle précise (intervalle de certitude) avec $(H+\mu I)$ puis on résout le système $(H+\mu I)x = -g$. Soit x^* la solution de ce système, alors deux situations possibles peuvent se présenter exceptant le cas où $\|x^*\| \leq r$ et $\mu = 0$ ou bien $\|x^*\| = r$ auquel cas x^* est la solution de (Q).

cas 1. $\|x\| > r$ auquel cas on peut prendre μ comme point initial dans l'algorithme de Hebden. Dans ce cas, on obtient, au prix de quelques itérations, la solution exacte de (Q).

cas 2. $\|x\| < r$ auquel cas une seule décision est à prendre : Elle consiste à choisir un nouveau scalaire μ plus petit (ce qui augmente $\|x(\mu)\|$) et éventuellement repartir avec l'algorithme de Hebden. Mais cette décision n'est opportune que si $(H+\mu I)$ est toujours définie positive. Si, à force de réduire μ , la matrice $(H+\mu I)$ devient singulière (mais toujours s.d.p) et $\|x\| < r$ alors on est en mesure d'estimer une approximation de la plus petite valeur propre de A et par conséquent on calcule une solution presque optimale de (Q). Autrement dit, étant donné un intervalle⁴ contenant le multiplicateur de (Q), on choisit son milieu comme l'itéré de départ puis, en fonction de certains calculs intermédiaires, on se trouve dans l'une des trois situations suivantes :

Soit il faut encore réduire l'intervalle de certitude et repartir de nouveau avec son milieu arithmétique.

Soit que l'on trouve un itéré telle que la fonction $\psi(\mu)$ est strictement positive et dans ce cas on peut appliquer l'algorithme de Hebden pour déterminer un μ^* avec $\psi(\mu^*)=0$. Enfin, le dernier cas, dit cas critique, est lorsque l'intervalle de certitude

⁴ On l'appelle intervalle de certitude.

est trop petit et $\psi(\mu)$ est toujours négative, on a une bonne estimation de la plus petite valeur propre de la matrice H et par conséquent, on peut évaluer une bonne approximation du vecteur propre associé qui conduit à établir une bonne approximation de la solution. Avant de décrire les étapes de l'algorithme, nous présenterons l'ensemble des propriétés utilisées pour le développer.

La première propriété stipule que le meilleur choix du point de départ est λ_L définie ci-dessous. La seconde propriété reprise de [M-S83] mais qui n'a pas été, à mon sens, exploitée complètement affirme que pour un λ donné tel que $\psi(\lambda) < 0$ alors λ_+ (un pas de Hebden) est soit dans l'intervalle de certitude et dans ce cas on peut partir de ce point dans l'algorithme de Hebden et puis calculer la solution du problème, soit λ_+ fournit une minorante de $-\lambda_1$. On constatera dans le nouvel algorithme qu'on a voulu exploiter cette dernière propriété (à fond !).

5.1.1 PROPRIETES

Soient $\lambda_L = \max\{0, \max\{-H_{ii} \ i=1, n\}, \|g\| / r - \|H\|_1\}$ où $\|H\|_1 = \max_j \sum_{i=1}^n |H_{ij}|$

et $\psi(\mu) = 1/r - 1/\phi(\mu)$.

- 1) Si H est définie positive et $\psi(0) \leq 0$ alors $\lambda_L = 0$.
- 2) Soient $\lambda > -\lambda_1$ et $\lambda_+ = \lambda - \psi(\lambda)/\psi'(\lambda)$.
 Si $\psi(\lambda) \geq 0$ alors on a toujours $\psi(\lambda_+) \geq 0$.
 Si $\psi(\lambda) < 0$ alors on a soit $\psi(\lambda_+) \geq 0$ soit $\lambda_+ \leq -\lambda_1$.

Preuve

1) Si $\lambda_1 > 0$ alors $\max\{-H_{ii} \ i=1, \dots, n\} < 0$; mais $\psi(0) \leq 0$ implique que :

$$\|g\| = \|H H^{-1} g\| \leq \|H\| \|H^{-1} g\| = \|H\| \|x\| \leq \|H\|_1 r \Rightarrow \|g\| / r - \|H\|_1 \leq 0.$$

Puisque H est symétrique, $\|H\| \leq \|H\|_1$ d'où $\lambda_L = 0$.

2) Si $\lambda_+ > -\lambda_1$ alors $\psi(\lambda_+) \geq \psi(\lambda) + (\lambda_+ - \lambda)\psi'(\lambda) = 0$ car $\psi(\lambda)$ est convexe [Re71].

Il faut rappeler que $\psi(\lambda_+)$ n'est définie que si $\lambda_+ > -\lambda_1$.

5.1.2 REMARQUES

- i) Si $\lambda_L > 0$ alors on aura soit $\lambda_1 \leq 0$ soit $\psi(0) > 0$.
- ii) Si $\max\{-H_{ii} \ i=1, \dots, n\} \geq 0$ alors $\lambda_1 \leq 0$.
- iii) Si $-\lambda_1 < \lambda$ et $\psi(\lambda) \geq 0$ alors $\psi(\lambda_+) < \psi(\lambda)$.

5.1.3 NOUVEL ALGORITHME

But : Résoudre le problème de minimisation (Q). C'est à dire, trouver un vecteur x tel que $\lambda(\|x\| - r) = 0$ et $(H + \lambda I)x = -g$ où λ est un réel non négatif quelconque.

Données : La matrice symétrique H , le vecteur g et le réel $r > 0$.

Notations : $\|H\|_1 = \max_j \sum_i |H_{ij}|$ et $\|x\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}$.

Etape 1) **Initialisation des bornes de l'intervalle de certitude :**

$$\lambda_L = \max\{-H_{ii} \ i=1, \dots, n\}; \quad \lambda_U = \max\{0, \lambda_L, \|g\| / r - \|H\|_1\};$$

$$\lambda_U = \|g\| / r + \|H\|_1.$$

Etape 2) Soit $\lambda = \lambda_L$.

a) **Décomposition incomplète de Cholesky de $(H + \lambda I)$.**

Si $(\lambda \leq -\lambda_1)$ alors $\lambda = 0.5 (\lambda_U + \lambda_L)$ et aller à l'étape 3

Comments : Si $\lambda > -\lambda_1$ on a $(H + \lambda I) = R^t R$.

Si $\lambda > -\lambda_1$ alors résoudre $R^t R x = -g$.

Comments : On désigne par x la solution de cette équation.

Si $\|x\| > r$ alors appliquer Hebden sinon x est solution de (Q).

Etape 3) **Répéter jusqu'à convergence**

Comments : Test de convergence : $(\lambda(\|x\| - r) = 0)$ ou $(\lambda_U - \lambda_L < \varepsilon \ \& \ \|x\| < r)$

Décomposition incomplète de Cholesky de $(H + \lambda I)$.

Si $(\lambda \leq -\lambda_1)$ alors $\lambda = 0.5 (\lambda_U + \lambda_L)$

Si $\lambda > -\lambda_1$ alors résoudre $R^t R x = -g$;

Comments : On désigne par x la solution de l'équation.

Si $\|x\| < r$ alors on prend $\lambda_U = \lambda$ et $\lambda_L = \max \{ \lambda_L, \lambda_+ \}$ ⁵

Comments : λ_+ désigne un pas de la méthode de Hebden. Ce mise à jour diminue

λ_U et augmente (éventuellement) λ_L .

Si $\|x\| > r$ alors appliquer Hebden.

Etape 4) Si $\lambda \leq -\lambda_1$ alors $\lambda_L = \delta / (\|u\|)^2 + \lambda$.

Comments : Ici on augmente λ_L . δ et u seront expliqués ci-dessus.

Etape 5) Si $(\lambda_U - \lambda_L < \varepsilon$ et $\|x\| < r)$ alors passer à (6).

Comments : Si l'intervalle est trop petit et $\lambda(\|x\| - r) \neq 0$ alors la solution est donnée par l'étape (6).

Etape 6) Calculer z^* et τ , $x + \tau z^*$ est la solution de (Q).

Comments : z^ et τ à l'aide de la technique de Linpack.*

Fin de l'algorithme.

L'étape (1) de l'algorithme permet d'initialiser les extrémités de l'intervalle de certitude afin qu'il contienne λ^* le multiplicateur de (Q). Dans l'étape 2, nous avons considéré d'abord le cas particulier de $\lambda = \lambda_L$. En fait, ce choix particulier permet de traiter à part le problème (Q) lorsque H est définie positive et de le résoudre en quelques itérations (quatre au plus) où une itération comprend principalement une résolution d'un système linéaire. En effet, grâce au choix particulier de λ_L comme itéré initial, la solution x du système $(H + \lambda I)x = -g$ satisfait nécessairement la condition $\lambda_L (\|x\| - r) = 0$ ou $\|x\| > r$ car si cette dernière condition n'est pas satisfaite, donc en particulier on a $\lambda_L > 0$ et puisque le multiplicateur λ^* de (Q) vérifie (par construction de λ_L) l'inégalité $\lambda^* > \lambda_L > 0$ et que $\psi(\mu)$ est strictement décroissante alors $\psi(\lambda^*) < \psi(\lambda_L) < 0$ ce qui est absurde car $\psi(\lambda^*) = 0$.

Le critère d'arrêt de l'algorithme précédent est établi comme suit :

- i) Critère principal de convergence correspond aux conditions d'optimalité établies dans le théorème 3.1 et qui sont précisées dans l'en-tête de l'algorithme.
- ii) Critère additionnel que l'on a rajouté dans notre algorithme pour traiter le cas critique car, dans ce cas, satisfaire le critère principal nécessite beaucoup de calculs

⁵ λ_+ est un pas de Hebden c'est à dire $\lambda_+ = \lambda - \psi(\lambda) / \psi'(\lambda)$.

qui ne sont pas raisonnables dans ce contexte. Ce dernier est pris en compte lorsque l'intervalle de certitude est trop petit et permet de fournir une (bonne approximation de la) solution de (Q) :

$$(\lambda_U - \lambda_L < \varepsilon \text{ et } \|x\| < r) \text{ et } (\lambda_U \lambda_L \neq 0)$$

L'une des propriétés remarquables de notre algorithme est qu'il converge en quelques itérations lorsqu'on l'applique à un problème quadratique "strictement" convexe. En effet, supposons H définie positive alors grâce au choix "optimal" du paramètre λ initial deux cas seulement peuvent avoir lieu :

Soit la direction de Newton est à l'intérieur ou à la frontière de la région et par conséquent la solution de (Q) est connue. Soit le cas contraire, alors on applique l'algorithme de Hebden, qui en pratique converge en quatre itérations en moyenne, pour trouver la solution du problème (Q) (voir aussi les remarques 4.2).

5.2 ALGORITHME DE " SAFEGUARDING "

Le schéma de "safeguarding", du à Moré & Sorensen [M-S 83] est destiné à établir une bonne approximation de (Q). Il me semble qu'il ne peut être, sous cette forme, appliqué à la résolution complète de (Q). Comme nous allons voir plus en détail ci-dessous, le schéma de safeguarding est plus coûteux que le notre.

Nous donnons seulement le schéma algorithmique et nous renvoyons le lecteur à l'article des auteurs [M-S 83] pour plus de détails.

5.2.1 ALGORITHME

0) Initialisation des paramètres :

$$\lambda_S = \max\{-H_{ii} \quad i=1,\dots,n\}; \lambda_L := \max\{0, \lambda_S, \|g\|/r - \|H\|_1\};$$

$$\lambda_U = \|g\|/r + \|H\|_1; \lambda = \lambda_U$$

1) Safeguard λ :

$$(1.1) \quad \lambda = \max\{\lambda, \lambda_L\}$$

$$(1.2) \quad \lambda = \max\{\lambda, \lambda_U\}$$

$$(1.3) \quad \text{si } \lambda \leq \lambda_S \text{ alors } \lambda = \max\{0.001 \lambda_U, (\lambda_U \lambda_L)^{1/2}\}$$

2) Si $(H+\lambda I)$ est définie positive alors factoriser $(H+\lambda I)$: $(H+\lambda I) = R^t R$.

Sinon retourner à (5).

3) Résoudre $R^t R x = -g$;

4) Si $\|x\| < r$ alors calculer τ et z^* à l'aide de la technique de Linpack.

5) Mise à jour de $\lambda_S, \lambda_L, \lambda_U$:

(5.1) si $\lambda \in] -\lambda_1, +\infty [$ et $\phi(\lambda) \leq r$ alors $\lambda_U = \min \{ \lambda_U, \lambda \}$
 sinon $\lambda_L = \min \{ \lambda_L, \lambda \}$

(5.2) Mise à jour de λ_S :

si $\lambda \in] -\lambda_1, +\infty [$ alors $\lambda_S = \max \{ \lambda_S, \lambda - \|R z^*\|^2 \}$
 sinon $\lambda_S = \max \{ \lambda_S, \lambda + \delta / \|u\| \}$ ⁶

(5.3) si $\lambda > -\lambda_1$ alors $\lambda_L = \max \{ \lambda_L, \lambda_+ \}$ ⁷
 sinon $\lambda_L = \max \{ \lambda_L, \lambda_S \}$

6) Si $(H+\lambda I)$ est définie positive et $g \neq 0$ alors appliquer Hebden sinon $\lambda = \lambda_S$.

7) Test de convergence : Si "non convergence" retourner à (1).

Fin de l'algorithme.

5.2.2 REMARQUES

1) Durant l'étape (5.2) de l'algorithme la mise à jour de λ_S , lorsque $\lambda \leq -\lambda_1$, nécessite le calcul d'un réel δ et du vecteur u . En effet, il est possible, durant la décomposition de Cholesky, de trouver un réel δ positif tel que la sous-matrice $H + \lambda I + \delta e_\tau \cdot e_\tau^t$ d'ordre $\tau \leq n$ soit singulière et par conséquent on peut déterminer un vecteur \hat{u} de \mathbb{R}^n tel que $(H + \lambda I + \delta e_\tau \cdot e_\tau^t) \hat{u} = 0$ où $\hat{u} = (u, 0)^t$ avec $u \in \mathbb{R}^\tau$ et $e_\tau(i) = 0$ si $i \neq \tau$, $e_\tau(\tau) = 1$ et (voir pour plus de détails l'article de [Gay 81]).

2) On explicitera le test de convergence du schéma précédent dans la section suivante.

3) Contrairement à notre algorithme, la mise à jour de l'intervalle de certitude dans le schéma de safeguarding nécessite, à chaque itération, un volume considérable de

⁶ u un vecteur satisfaisant l'équation : $\begin{pmatrix} u \\ 0 \end{pmatrix}^t (H + \lambda I) \begin{pmatrix} u \\ 0 \end{pmatrix} = -\delta$.

⁷ λ_+ est un pas de Hebden c'est à dire $\lambda_+ = \lambda - \psi(\lambda) / \psi'(\lambda)$.

calculs intermédiaires. Par exemple, la mise à jour de λ_s nécessite d'employer à chaque itération la technique de Linpack et par suite le temps de calcul augmente notamment lorsque la taille du problème initial est trop grande. Signalons que nous n'avons pas utilisé le paramètre λ_s dans le nouvel algorithme car il nous semble inutile.

4) L'algorithme de safeguarding possède l'inconvénient que le temps de calcul (et non le nombre d'itérations) augmente considérablement lorsque g devient trop petit (voir aussi [M-S83]).

6. TECHNIQUE DE LINPACK

Dans le cas critique la solution du problème (Q) est donnée par le lemme (5.2.3), i.e, la solution a la forme $x = -(H - \lambda_1 I)^+ g + \tau u$ où $u \in \mathcal{N}(H - \lambda_1 I)$. Or, établir x à partir de cette formule nécessite un volume important de calculs qui n'est pas raisonnable dans le cadre de l'optimisation. Néanmoins, une telle approche peut être envisagée pour les applications concrètes exigeant la solution exacte. A la place, nous cherchons à établir une estimation du vecteur propre associé à la plus petite valeur propre. Soit $\|x\| < r$ avec $(H + \lambda I)x = R^t R x = -g$; on désire calculer un vecteur z^* tel que :

$$\|Rz^*\| = \min \{ \|Rz\| : \|z\| = 1 \}$$

Dans le cadre de l'algorithme de la région de confiance, il n'est pas raisonnable de résoudre directement ce dernier problème de minimisation pour calculer le vecteur z^* . D'où on applique une technique, communément appelée, technique de Linpack. Cette technique est dû à Cline & al [C-M-S-W79] et constitue une bonne approche⁸ peu coûteuse ($O(n^2)$ opérations arithmétiques). Elle consiste à trouver le vecteur w en résolvant le système $R^t w = e$ avec $e = (\pm 1, \pm 1, \dots, \pm 1)^t$. Le signe des composantes du vecteur e est choisi de façon que les composantes de w soient assez grandes. Une fois w est calculé, on résout $Rv = w$.

Donc $z^* = v / \|v\|$. En plus,

$$\|Rz^*\| = \left[\frac{\|R^{-1}w\|}{\|w\|} \right]^{-1}$$

⁸ Voir page 371 de [C-M-S79] un exemple illustrant les précautions à prendre avec cette technique.

Il existe plusieurs stratégies qui permettent de choisir le vecteur e pour que w soit assez large [M-S83],[C-M-S-W79]. Etant donné un vecteur $z^* : \|z^*\| = 1$ et un vecteur $x : \|x\| < r$ alors il y a deux manières de calculer un réel τ tel que

$$\|x^*\| = \|x + \tau z^*\| = r.$$

Le choix important de τ de valeur absolue minimale qui minimise $q(p + \tau z^*)$ est établi par la formule suivante :

$$\tau = \frac{r^2 - \|x\|^2}{x^t z^* + \operatorname{sgn}(x^t z^*) \sqrt{(x^t z^*)^2 + r^2 - \|x\|^2}} \quad (6)$$

Le lemme suivant montre que la technique de Linpack fournit une solution presque optimal du problème quadratique de type (Q), c'est à dire, le vecteur calculé par Linpack ci-dessus $x + \tau z^*$ avec $\|x + \tau z^*\| = r$ vérifie l'inégalité suivante :

$$|q(x + \tau z^*) - q^*| \leq \sigma \max\{\sigma', |q^*|\} \quad (7)$$

où q^* est la valeur optimal exacte de (Q) et $\sigma', \sigma \in (0,1)$.

6.1 LEMME [M-S83]

Soit $\sigma \in (0,1)$ donné et supposons que $H + \lambda I = R^t R$; $(H + \lambda I)x = -g$ et $\lambda \geq 0$.

Si $z^* \in \mathbb{R}^n$ satisfait les deux conditions,

i) $\|x + z^*\| = r$

ii) $\|Rz^*\| \leq \sigma (\|Rx\|^2 + \lambda r^2)$

alors $q(x + z^*) \leq 0.5 (\sigma - 1) (\|Rx\|^2 + \lambda r^2) \leq (\sigma - 1) q^*$.

6.2 REMARQUES

1) L'algorithme de Safeguarding définit le critère d'arrêt comme suit :

(i) S'il existe $\lambda \geq 0$ tel que $(H + \lambda I)$ définie positive et on peut appliquer Hebden.

Dans ce cas le critère d'arrêt est :

x^* est solution de (Q) s'il existe $\sigma_1 \in (0,1)$

$$\|r - \|x^*\|\| \leq \sigma_1 r \text{ ou } (\|x^*\| \leq r \text{ et } \lambda = 0) \quad (9)$$

(ii) Le cas critique est pris en compte en calculant, pour un x vérifiant $\|x\| < r$, le vecteur z^* par technique de Linpack et on dit que $x^* = x + \tau z^*$ est une solution approchée de (Q) s'il existe $\sigma_1, \sigma_2 \in (0,1)$ tels que

$$\|R(\tau z^*)\|^2 \leq \sigma_1(2 - \sigma_1) \max \{ \sigma_2, \|Rx\|^2 + \lambda r^2 \} \quad (10)$$

2)

i) Si on prend $\sigma_2=0$ alors (10) entraîne la condition (ii) du lemme (6.1). Et par suite, le vecteur $x + \tau z^*$ est une bonne approximation.

ii) La valeur $\sigma_1=0.1$ donne généralement satisfaction et permet d'obtenir de bonnes approximations, cependant, si on veut améliorer la qualité de la solution en diminuant la quantité σ_1 on constate que le temps de calcul (et non le nombre d'itérations) augmente considérablement.

iii) Signalons encore que sur certains problèmes, le schéma de "safeguarding" ne s'arrête ni sur le premier critère ni sur le critère (10) et pour cette raison on a rajouté un autre critère supplémentaire, qui s'applique dans le cas critique, de la forme :

Si $|\lambda_U - \lambda_L| < \varepsilon$ (ε assez petit) alors arrêter l'algorithme avec $x + \tau z^*$ une approximation de la solution.

PARTIE 2

**STABILITE EN OPTIMISATION QUADRATIQUE NON
CONVEXE. ALGORITHMES PRIMAL-DUAL**

1. PRELIMINAIRES

Soit le problème quadratique convexe ou non convexe :

$$\alpha = \text{Min} \{ 0.5 \langle Ax, x \rangle + \langle b, x \rangle : \|x\| \leq r \} \quad (P)$$

où A est une matrice symétrique d'ordre n , r est un réel positif donné.
Soient l'ensemble C défini par,

$$C = \{x \in X : \|x\| \leq r\}$$

et

$$q(x) = 0.5 \langle Ax, x \rangle + \langle b, x \rangle.$$

Le symbole $\| \cdot \|$ désignera la norme Euclidienne.

Le problème (P) admet toujours une solution car le domaine $\{ \|x\| \leq r \}$ est un fermé borné et la forme quadratique est continue.

Le problème dual de (P), via le Lagrangien ordinaire, est :

$$\text{Sup} \{ g(\lambda) : \lambda \geq 0 \} \quad (D)$$

$$\text{où} \quad g(\lambda) = \text{Inf} \{ L(x, \lambda); x \in X \} \quad (P_\lambda)$$

$$\text{et } L(x, \lambda) = \begin{cases} q(x) + \frac{\lambda(\|x\|^2 - r^2)}{2} & \text{si } \lambda \geq 0 \\ -\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$

Dans ce qui suit nous présentons les notions de base et les propriétés caractérisant les solutions de (P) et (D). Le lemme suivant, que l'on a vu dans la partie 1, fournit une caractérisation importante de la solution du problème primal et de la solution duale.

1.1. LEMME

x^* est une solution de (P) si et seulement s'il existe un réel $\mu \geq 0$ tel que :

- (i) $(A + \mu I)$ est une matrice semi-définie positive
- (ii) $(A + \mu I)x^* = -b$
- (iii) $\|x^*\| \leq r$ et $\mu(r - \|x^*\|) = 0$

μ est appelé le multiplicateur du problème (P).

1.2. REMARQUE IMPORTANTE

La présentation de la contrainte euclidienne sous la forme $\|x\|^2 \leq r$ est indispensable car on ne peut obtenir la stabilité de la dualité lagrangienne pour ce problème avec la représentation $\|x\| \leq r$. En effet, soit $x \in \mathcal{N}(A - \lambda_1 I)$ et $\lambda_1 < 0$ alors $\forall \lambda \geq 0$ on a :

$$L(x, \lambda) = q(x) + 0.5\lambda(\|x\|^2 - r) = 0.5\lambda_1\|x\|^2 + \langle b, x \rangle + 0.5\lambda(\|x\|^2 - r).$$

D'où il suffit de faire tendre $\|x\| \rightarrow +\infty$ pour voir que $L(x, \lambda) \rightarrow -\infty$ et par suite le saut de dualité est égal à l'infini. Donc, le problème intermédiaire (P_λ) avec $\lambda_1 < 0$ n'admet pas de solution finie. Par contre, la présentation $\|x\|^2 \leq r$ assure que $L(x, \lambda)$ est coercive et par suite la stabilité. On peut donner une démonstration directe. En fait, il suffit de montrer qu'il existe un x^* tel que $q(x^*) \leq g(\lambda^*)$. Soit x^* vérifiant le lemme (1.1) alors

$$q(x^*) = \begin{cases} -\frac{1}{2} \langle x^*, Ax^* \rangle & \text{si } \|x^*\| < r \\ -\frac{1}{2} \langle x^*, Ax^* \rangle - \mu r^2 & \text{si } \|x^*\| = r \end{cases}$$

où μ est un réel positif tel que $(A + \mu I)$ est (au moins) semi-définie positive. En la comparant avec l'expression de $g(\lambda)$ qui sera établie au paragraphe 2 nous pouvons montrer facilement que le saut de dualité est nul.

On définit la fonction $\phi(\mu): \{ \mu \in \mathbf{R}_+ : (A + \mu I) \text{ est non singulière} \} \rightarrow \mathbf{R}_+$ par

$$\phi(\mu) = \|x(\mu)\| \text{ où } x(\mu) \text{ est la solution du système } (A + \mu I)x(\mu) = -b.$$

D'après le lemme 1.1, la solution de (P) est intimement liée à l'équation non linéaire $\phi(\mu) = r$ pour $\mu \in]-\lambda_1, +\infty[$; plus précisément lorsque la solution du problème (P)

est sur la frontière du domaine admissible et $(A+\mu I)$ est non singulière.

Considérons d'abord le cas $\mu > -\lambda_1$. Alors l'équation $(A+\mu I)x = -b$ peut être présentée à l'aide des éléments propres de A sous la forme :

$$(-\lambda_i + \mu) x^t v_i = -b^t \cdot v_i \quad i = 1, 2, \dots, n$$

Puisque $\mu > -\lambda_i \quad \forall i=1, \dots, n$ alors on a $x^t v_i = -\frac{b^t v_i}{\mu - \lambda_i}$

d'où

$$\phi^2(\mu) = \|x(\mu)\|^2 = \sum_{i=1}^n \left[\frac{b^t v_i}{\mu + \lambda_i} \right]^2$$

2. CARACTERISATION DU PROBLEME DUAL

Nous commençons par l'étude du problème (P_λ) qui s'écrit sous la forme :

$$g(\lambda) = \text{Inf} \{ 0.5 \langle (A+\lambda I)x, x \rangle + \langle b, x \rangle \} - 1/2 \lambda r^2$$

On note $h(\lambda) = \text{Inf} \{ 0.5 \langle (A+\lambda I)x, x \rangle + \langle b, x \rangle \}$.

Analysons séparément les trois cas suivants :

i) Si $\lambda + \lambda_1 < 0$. Alors $h(\lambda) = -\infty$

(car si $\bar{x} \in \mathcal{N}(A - (\lambda + \lambda_1)I)$ alors $\langle (A + \lambda I)\bar{x}, \bar{x} \rangle + \langle b, \bar{x} \rangle = (\lambda + \lambda_1) \langle \bar{x}, \bar{x} \rangle + \langle b, \bar{x} \rangle$ et il suffit alors de faire tendre $\|\bar{x}\|$ vers l'infini).

ii) Si $\lambda + \lambda_1 > 0$ alors $A + \lambda I$ est définie positive et \bar{x} est solution du problème (P_λ) si et seulement si $(A + \lambda I)\bar{x} = -b$.

iii) Si $\lambda = -\lambda_1$ alors :

a) Soit $b \in \mathcal{N}(A - \lambda_1 I)^\perp$ et donc $-\infty < h(\lambda) < +\infty$.

b) Soit $b \notin \mathcal{N}(A - \lambda_1 I)^\perp$ donc $h(\lambda) = -\infty$.

Posons $E_0 = \{ \lambda : \lambda + \lambda_1 > 0 \text{ ou } (\lambda = -\lambda_1 \text{ et } b \in \mathcal{N}(A - \lambda_1 I)^\perp) \}$ On a donc :

$$g(\lambda) = \begin{cases} 0.5 \langle (A + \lambda I) \bar{x}, \bar{x} \rangle + \langle b, \bar{x} \rangle & \text{si } \lambda \in E_0 \\ -\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$

Or \bar{x} vérifie $(A + \lambda I)\bar{x} = -b$ d'où $\forall \bar{x} \in E_0$ on a $g(\lambda) = 0.5 \langle b, \bar{x} \rangle - 0.5\lambda r^2$.

D'où, en exprimant b à l'aide des éléments propres on aura :

$\forall \lambda > \max \{0, -\lambda_1\}$ l'équation $(A + \lambda I)\bar{x} = -b$ s'écrit encore

$$\bar{x}^t v_i = -\frac{b^t v_i}{\lambda + \lambda_i} \text{ si } \lambda + \lambda_1 > 0 \text{ et } \lambda \geq 0$$

et par suite

$$g(\lambda) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \frac{(b^t v_i)^2}{(\lambda + \lambda_i)} - \frac{\lambda r^2}{2}$$

Revenons maintenant à la situation de $\lambda^* = -\lambda_1 > 0$.

On a dans ce cas,

$$b \in \mathcal{K}_1 \Leftrightarrow \forall k \in J_1 \text{ on a } b^t v_k = 0.$$

D'où l'équation, $(A + \lambda I)\bar{x} = -b$ s'écrit encore

$$\bar{x}^t v_i = -\frac{b^t v_i}{\lambda + \lambda_i} \quad \forall i \notin J_1$$

et par suite

$$g(\lambda) = -\frac{1}{2} \sum_{i \notin J_1} \frac{(b^t v_i)^2}{(-\lambda_1 + \lambda_i)} - \frac{\lambda_1 r^2}{2}$$

A présent, connaissant l'expression de la fonction objectif duale nous pouvons résoudre le problème (D) qui peut se mettre sous la forme :

$$\text{Sup} \{ g(\lambda) : \lambda \geq 0; \lambda + \lambda_1 \geq 0 \} \quad (D')$$

$$\text{Sup} \{ g(\lambda) : \lambda \in K \} \quad (D')$$

où $K = \{ \lambda : \lambda \geq 0, \lambda + \lambda_1 \geq 0 \}$

Citons d'abord l'essentiel des caractéristiques de la fonction objectif duale. Pour cela notons, pour la suite, $\tilde{g} = -g$.

3. PROPRIETES DE LA FONCTION OBJECTIF DUALE

3.1. PROPOSITION

Si $\lambda_1 > 0$ le domaine effectif de $\tilde{g} = -g$ est $\text{dom}(\tilde{g}) = [0, +\infty[$.

Si $\lambda_1 \leq 0$ et $b \notin \mathcal{N}(A - \lambda_1 I)^\perp$ alors $\text{dom}(\tilde{g}) = [-\lambda_1, +\infty[$ sinon on a $\text{dom}(\tilde{g}) =]-\lambda_1, +\infty[$.

Si $\lambda > \max\{0, -\lambda_1\}$ alors $\lambda \in \text{dom}(\tilde{g})$

et

$$\tilde{g}(\lambda) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \frac{[b^t v_i]^2}{\lambda_i + \lambda} + \frac{\lambda r^2}{2}$$

En particulier, si $\lambda_1 > 0$ alors l'égalité ci-dessus a lieu $\forall \lambda \geq 0$.

Si $\lambda_1 \leq 0$ et $b \in \mathcal{N}(A - \lambda_1 I)^\perp$ alors $\tilde{g}(\lambda) = \frac{1}{2} \sum_{i \in J_1} \frac{[b^t v_i]^2}{\lambda_i + \lambda} + \frac{\lambda r^2}{2}$

Si $\lambda > \max\{0, -\lambda_1\}$ alors \tilde{g} est différentiable en tout λ

et

$$\tilde{g}'(\lambda) = \frac{1}{2} (r^2 - \|\bar{x}\|^2) \quad \text{où} \quad \|\bar{x}\|^2 = \sum_{i=1}^n \frac{[b^t v_i]^2}{[\lambda_i + \lambda]^2}$$

Si $\lambda_1 > 0$ alors \tilde{g} est sous-différentiable en 0 et $\partial \tilde{g}(0) =]-\infty, c_0]$ où

$$c_0 = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \frac{(b^t v_i)^2}{\lambda_i} + \frac{r^2}{2}$$

Si $\lambda_1 \leq 0$ alors \tilde{g} est sous-différentiable en $-\lambda_1$

et

$$\partial \tilde{g}(-\lambda_1) =]-\infty, c_1]$$

où

$$c_1 = -\frac{1}{2} \sum_{i \in J_1} \frac{(b^t v_i)^2}{(\lambda_i - \lambda_1)^2} + \frac{r^2}{2}$$

La démonstration découle de l'expression spectrale de $g(\lambda)$ et du fait que (voir l'énoncé et les conventions de Rockaffellar page 228 de [Ro72]) :

$$\partial \tilde{g}(\lambda) = \{ y \in \mathbf{R}, f_-(\lambda) \leq y \leq f_+(\lambda) \}$$

Par conséquent, nous allons distinguer deux selon le signe de λ_1 , c'est à dire, selon que le problème est différentiable ou non, pour dégager les conditions d'optimalité du problème (D').

1) Cas de $\lambda_1 > 0$

Dans ce cas le problème (D') est exactement (D) en ce sens que l'ensemble K se réduit à $\{\lambda : \lambda \geq 0\}$. En plus, $-\lambda_1$ ne peut être le multiplicateur du problème (P).

D'où, une condition nécessaire et suffisante pour que λ^* soit solution de (D) est

$$(g'(\lambda^*) = 0 \text{ ou } (g'(0) \leq 0 \text{ si } \lambda^* = 0))$$

ou encore, λ^* est solution de (D) si et seulement si

$$\begin{cases} g'(\lambda^*) = 0 & \text{si } \lambda^* > 0 \\ g'(\lambda^*) \leq 0 & \text{si } \lambda^* = 0 \end{cases}$$

D'autre part, un calcul simple donne

$$g'(\lambda) = \sum_{i=1}^n \left(\frac{b^t v_i}{\lambda + \lambda_i} \right)^2 - \frac{r^2}{2}$$

qui est équivalent à,

$$r^2 \geq \|\bar{x}\|^2 = \sum_{i=1}^n \frac{[b^t v_i]^2}{[\lambda_i + \lambda]^2}$$

2) Cas de $\lambda_1 \leq 0$.

Dans ce cas le problème (D') est équivalent au problème $\text{Sup } \{ g(\lambda) : \lambda \geq -\lambda_1 \}$.

Cette situation est délicate car il faut savoir que le cas de $\lambda^* = -\lambda_1$ pose énormément de difficultés. D'une manière analogue on obtient la caractérisation suivante :

λ^* solution de (D) si et seulement si

$$\sum_{i \in J_1} \left[\frac{b^t v_i}{\lambda_i - \lambda_1} \right]^2 \leq r^2 \quad \text{si } \lambda^* = -\lambda_1$$

et

$$\sum_{i=1}^n \left[\frac{b^t v_i}{\lambda_i + \lambda^*} \right]^2 = r^2 \quad \text{si } \lambda^* > -\lambda_1$$

En résumé, on a pu obtenir, dans les deux cas, une caractérisation identique à celle établie dans lemme (1.1). En d'autres termes, le multiplicateur du problème (P) n'est autre que la solution du problème dual (D).

3.2. EXEMPLE

Soit le problème $\text{Min } \{-x_1, \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2) \leq \frac{1}{2}\}$ (1)

Il s'agit de minimiser $-x_1$ sur la boule unité de \mathbf{R}^2 . Le minimum exact est $(1, 0)^t$ et en application de ce qui précède on obtient facilement

$$g(\lambda) = \begin{cases} -\frac{1}{2\lambda} - \frac{1}{2}\lambda & \text{Si } \lambda > 0 \\ -\infty & \text{Si } \lambda \leq 0 \end{cases}$$

Il est clair que g est concave sur l'ensemble $\{\lambda : \lambda \geq 0\}$. Et le problème dual de (1) s'écrit :

$$\text{Sup } \{g(\lambda) : \lambda > 0\} \quad (2)$$

D'autre part, λ^* est solution de (2) ssi $\lambda^* = +1$. Et par suite, x^* est solution du problème (1) si et seulement si $x^* = (1/\lambda^*, 0)^t = (1, 0)^t$.

On retrouve dans cet exemple (ici $b=(-1,0)^t$, $\lambda_1=\lambda_2=0$) la formule de $g(\lambda)$ établie dans la proposition (3.2) et les résultats des propositions suivantes.

4. RESOLUTION DU PROBLEME DUAL ET COMPARAISON

Nous allons mettre en évidence le lien entre l'algorithme efficace de Hebdén et l'algorithme primal-dual.

D'après ce qui précède, l'équation $g'(\lambda^*)=0$ est équivalente, pour $\lambda > -\lambda_1$, à résoudre l'équation non linéaire :

$$\|z\| = r$$

$$\text{où } \|z\|^2 = \sum_{i=1}^n \left[\frac{b^t v_i}{\lambda_i + \lambda} \right]^2$$

Or, cette dernière équation est équivalente au système $(A+\lambda I)z = -b$ avec $\|z\| = r$. Par conséquent, la méthode de Hebdén est une méthode primale-duale en ce sens qu'elle détermine d'une part la solution duale et ensuite la solution primale puisque la dualité ordinaire lagrangienne est stable pour cette classe de problèmes.

4.1. REMARQUE IMPORTANTE

Signalons que la stabilité est obtenue en exprimant les contraintes du problème (P) sous la forme $\{x : \|x\|^2 \leq 1\}$ car si on les prend sous la forme $\{x : \|x\| \leq 1\}$ on montre que le saut est non nul et le passage par dualité n'est plus stable (voir aussi la remarque 1.2).

CHAPITRE II

**CONTRIBUTION A L'ETUDE DES METHODES
DE LA REGION DE CONFIANCE POUR
L'OPTIMISATION AVEC ET SANS CONTRAINTES**

PARTIE I

**METHODE DE LA REGION DE CONFIANCE POUR
L'OPTIMISATION NON CONVEXE SANS CONTRAINTES**

1. INTRODUCTION GENERALE

Soit le problème de minimisation sans contraintes suivant

$$\text{Min } \{ f(x) : x \in \mathbf{R}^n \} \quad (\text{P})$$

où f est une fonction de \mathbf{R}^n à valeurs dans \mathbf{R} , bornée inférieurement et deux fois continûment différentiable.

En général, le problème (P) est traité par des variantes de la méthode de Newton qui consiste à trouver le zéro du gradient de f . Or, on sait que la méthode de Newton ne peut être appliquée que si (P) est un problème convexe, en plus, sa convergence est locale. Une autre stratégie pour résoudre (P) (Méthodes de recherche linéaire) consiste à définir un nouvel itéré en calculant une direction de descente pour la fonction objectif, i.e, un vecteur p tel que $\langle \nabla f(x), p \rangle < 0$ ⁹. Ensuite, on détermine un pas de déplacement α satisfaisant $f(x+\alpha p) < f(x)$. L'inconvénient de cette stratégie est qu'elle se contente de trouver un point stationnaire de (P) [Fr87].

Nous présentons dans ce Chapitre une stratégie récente, communément appelée, la Région de Confiance (RC, en abrégé). C'est une stratégie qui s'applique aux problèmes convexes et non convexes. Par ailleurs, elle est robuste et possède de bonnes propriétés de convergence globale.

L'idée de base consiste à approcher la fonction objectif par un modèle quadratique local $\Psi(\cdot) : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$ sur un voisinage restreint de l'itéré courant x (on prend généralement la boule centrée en x). Si le modèle $\Psi(\cdot)$ est une bonne approximation de f alors on est sûr que le minimum de ce modèle sur ce voisinage restreint fournit une direction de descente de f . Si par contre, le modèle est une mauvaise approximation de f cela signifie qu'il faut restreindre davantage (réduire le diamètre de la boule) le voisinage initial de manière à obtenir une bonne approximation de f ¹⁰. En d'autres termes, le minimum du modèle local n'est accepté comme direction de descente que si le modèle lui-même reflète suffisamment le comportement de la fonction objectif. La décision concernant la qualité du modèle est établie à partir de la norme du minimum et des variations de f et du modèle.

⁹ cette condition équivaut à dire que la fonction objectif doit décroître dans la direction p dans un voisinage de l'itéré courant x .

¹⁰ Il est évident que, si le gradient est exact, on peut trouver un voisinage sur lequel f peut être bien approché par le terme linéaire défini par le gradient.

Nous y reviendrons plus loin sur le critère permettant de mesurer la qualité du modèle local choisi.

Soit x^k l'itéré courant, l'algorithme RC détermine un nouvel itéré par $x^{k+1} = x^k + d_k$ où d_k est la solution du problème sous contraintes suivant :

$$\text{Min } \{ \Psi(d) = 0.5 d^t H_k d + d^t g_k \} \quad (Q_k)$$

$$\| d \| \leq \delta ; d \in \mathbf{R}^n$$

où δ réel > 0 . On démontre que, pour un scalaire positif λ tel que $H_k + \lambda I$ est semi-définie positive, la solution de l'équation $(H_k + \lambda I) d = -g_k$ est solution de (Q_k) pourvu que la solution vérifie $\| d \| = \delta$ si λ est non nul, ou $\| d \| \leq \delta$ si λ est nul. Par ailleurs, si δ est suffisamment grand la solution est simplement la direction de Newton. Si, par contre, $\delta \rightarrow 0$ alors $\| d \| \rightarrow 0$ et d devient ainsi parallèle à la plus forte pente (Steepest-descent direction [Mi83]). Nous allons voir que tout cela est équivalent à dire que si $\lambda \rightarrow +\infty$ alors $\| d \| \rightarrow 0$ (donc, d est parallèle à la plus forte pente) et si $\lambda \rightarrow 0$, la direction d est celle de Newton.

Les premières suggestions de définir une région de confiance pour la recherche des directions remontent à Levenberg[1944] et Marquardt[1963]. Ils ont appliquée cette idée sur les problèmes de moindres carrés non linéaires. En 1966, une première application de cette technique au problème non-linéaire général a été adapté par Goldfeld & al [Goldfeld, Trotter 1960] en utilisant, lorsque $\| d \| > \delta$, la décomposition spectrale de l'équation $\phi(\lambda) = \|(H_k + \lambda I)^{-1} d\| = \delta$ pour calculer une bonne approximation de l'équation $(H_k + \lambda I) d = -g_k$. Hebden [He73] suggère de remplacer intelligemment la décomposition spectrale par le calcul de $\phi(\lambda)$ et de ses dérivées premières en employant la factorisation de Cholesky de la matrice $(H_k + \lambda I)$. Depuis, de nombreux auteurs¹¹ se sont penchés sur cette technique en proposant différents schémas de mise à jour de δ (rayon de confiance) ou de λ (multiplicateur de (Q_k)) pour accélérer la convergence de la méthode. On distingue plus particulièrement les travaux de Gay [Ga81], Sorensen [So82] et de Moré & al [M-S83]. Ils constatent qu'en pratique, le contrôle des rayons de confiance est plus facile et plus satisfaisant que le contrôle de λ [voir Mo83]. La procédure de mise à jour des rayons de confiance peut être simple

¹¹ Voir le nombre important de références (principales et complémentaires) dans cette Thèse sur ce sujet.

voire très complexe sans qu'elle affecte la convergence globale. Néanmoins, en pratique, le choix initial et la stratégie de mise à jour du rayon de confiance sont très importants car lorsque le rayon de confiance devient faible l'algorithme progresse lentement si aucune précaution n'est prise. Plusieurs procédures de mise à jour consiste à trouver (par interpolation polynomiale) un minimum approché τ de $f(x^k + \tau d_k)$ et prendre $\tau \|d_k\|$ comme un nouveau rayon de confiance [Mo83],[D-S83],[F180]. En général, l'algorithme RC converge, sous certaines conditions, vers un minimum local isolé lorsque le Hessien de f est exact et un point stationnaire si les formules d'approximation du Hessien sont employées.

Une fois le rayon de confiance δ est choisi, on détermine le minimum du modèle sur la région de confiance (la boule de diamètre δ). Ensuite, on mesure la qualité de l'approximation courante à l'aide du rapport de l'actuelle réduction de la fonction objectif et la réduction relative au modèle quadratique utilisé. Si la valeur $f(x^k + d_k)$ est plus petite que la valeur $f(x^k)$ (comparé à la variation du modèle local) alors le diamètre de la région est agrandi et un nouvel itéré sera défini, sinon la qualité de l'approximation est mauvaise, le diamètre est réduit, la direction est rejetée et l'itéré est inchangé. Nous appliquons les résultats et les algorithmes établies au chapitre précédent pour résoudre le problème (Q_k) . Nous attirons l'attention sur le fait que, dans le cadre RC, une approximation de la solution du problème (Q_k) s'avère suffisante. La présence des dérivées secondes devraient renforcer les chances de trouver des solutions vérifiant les conditions d'optimalité de second ordre.

2. ALGORITHME GENERAL DE LA R.C

Voici le schéma général de l'algorithme RC pour résoudre (P) sans préciser pour l'instant, la méthode employée pour traiter le problème local (Q_k) .

2.1. ALGORITHME

Etape 0 : Soient $0 < \mu < \eta < 1$, $0 < \gamma_1 \leq \gamma_2 < 1 \leq \gamma_3$, $\delta_0 > 0$ et $x_0 \in \mathbf{R}^n$ arbitraire.

Etape 1 : $k = 0, 1, 2, \dots$ jusqu'à convergence.

Etape 2 : Calculer $g_k = \nabla f(x_k)$; $H_k = \nabla^2 f(x_k)$.

Étape 3 : Calculer la solution d_k de

$$\text{Min } \{ q_k(d) : \|d\| \leq \delta_k \} \quad (Q_k)$$

et $q_k(d) = 0.5 d^t H_k d + d^t g_k$

Étape 4 : Soit $r_k = \frac{f(x_k) - f(x_k + d_k)}{q_k(0) - q_k(d_k)}$

Si $r_k \leq \mu$ alors $\delta_{k+1} \in [\gamma_1 \delta_k, \gamma_2 \delta_k]$ et retourner à l'étape 3.

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

Si $r_k \leq \eta$ alors $\delta_{k+1} \in [\gamma_2 \delta_k, \delta_k]$; sinon $\delta_{k+1} \in [\delta_k, \gamma_3 \delta_k]$

$k=k+1$ et retourner à l'étape 1.

Fin de l'algorithme.

Il est clair que l'étape la plus importante, mise à part les évaluations de la fonction objectif et ses dérivées, à observer dans l'algorithme 2.1 est l'étape 3. Pour résoudre le problème (Q_k) de l'étape 3, nous étudierons d'abord les aspects théoriques du problème dans le paragraphe suivant. Nous attirons l'attention sur le fait qu'on cherche à trouver une approximation de la solution d_k de (Q_k) tout en assurant que la suite $\{x_k\}$ générée par l'algorithme 2.1 converge vers un minimum local.

2.3 REMARQUE

Le mise à jour du rayon de confiance à l'aide de la formule $\delta_{k+1} \in [\delta_k, \gamma_3 \delta_k]$ semble inopportun lorsque la norme de d_k est faible par rapport à δ_k . Toint [To88] propose, pour des raisons pratiques, la formule :

$$\delta_{k+1} \in [\text{Min}\{\|d_k\|/\xi, \delta_k\}, \gamma_2 \delta_k]$$

où ξ est un scalaire positif donné.

3. CALCUL D'UNE APPROXIMATION DU HESSIEN

Le calcul des dérivées secondes ou le Hessien dans les algorithmes de R.C se fait à l'aide des approximations BFGS. On pourra trouver les formules d'approximation BFGS dans les livres de Gill & al [G-M-W81], Minoux [Mi83]. On distingue les formules de rang 1 appelées DFP¹² de celles de rang 2 appelées BFGS qui sont plus intéressantes car lorsqu'on les applique à une fonction f quadratique strictement convexe permettent de fournir une suite de matrices convergeant vers le Hessien exact f [Mi83] [G-M-W81]. De plus, les approximations BFGS ne sont pas trop coûteuses (le coût est de l'ordre $2n^2+O(n)$ opérations de multiplications et le même nombre d'additions; voir le livre de Dennis & al [D-S83] pour une description détaillée).

Posons $\gamma_k = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)$ et $\tau_k = x_{k+1} - x_k$.

i) Approximation de premier rang DFP.

$$H_{k+1} = H_k + \alpha_k u_k {}^t u_k \text{ où } u_k = H_k \tau_k - \gamma_k \text{ et } \alpha_k = -\frac{1}{\tau_k {}^t u_k}$$

ii) Approximation de deuxième rang BFGS.

$$H_{k+1} = H_k + \alpha_k u_k {}^t u_k + \alpha_k v_k {}^t v_k \text{ où } u_k = \gamma_k, v_k = H_k \tau_k, \alpha_k = \frac{1}{\tau_k {}^t u_k} \text{ et}$$

$$\beta_k = -\frac{1}{\tau_k {}^t H_k \tau_k}.$$

4. MISE A JOUR DU RAYON DE CONFIANCE

En pratique, le choix de la stratégie de mise à jour du rayon de confiance est important. Cette stratégie, qui n'est guère arbitraire, doit assurer que la suite des rayons de confiance reste suffisamment positif. Pour certains problèmes il faut penser à déterminer la meilleure stratégie pour accélérer la convergence.

La mise à jour du rayon de confiance δ_k est généralement établie suivant l'étape 4 de l'algorithme précédent. Les paramètres constants sont choisis, dans nos implémentations, comme suit :

¹² DFP les initiales de Davidon, Fletcher et Powell, BFGS de Broyden, Fletcher, Goldfarb et Shanno.

$\mu = 0.2, \eta = 0.55, \gamma_1 = 0.5, \gamma_2 = 1$ et $\gamma_3 = 2$.

5. THEORIE DE CONVERGENCE

Pour garantir la convergence de l'algorithme nous devons imposer au moins la condition qu'il existe une constante $\beta \in [0,1]$ telle que :

$$-q(d_k) \geq \beta \max \{ -q_k(d) : d = \alpha \nabla f(x_k), \|d\| \leq \delta_k \}; \text{ et } \|d_k\| \leq \delta_k$$

Sous cette condition, Powell [Po75] a montré que si $\mu = 0$ alors il existe une sous-suite de $\{x_k\}$ convergeant vers un x^* tel que $\nabla f(x^*)=0$. Cependant, Thomas [Th75] montre que si $\mu > 0$ alors toute la suite $\{\nabla f(x_k)\}$ converge vers 0. Sorensen [So82] montre que $\nabla^2 f(x^*)$ est également semi-définie positive sous la condition qu'il existe un $\sigma \in (0,1)$:

$$q(d_k) = \min \{ q_k(s) : \|s\| \leq \Delta_k \} \text{ avec } \|d_k\| \leq \Delta_k \in [(1-\sigma)\delta_k, (1+\sigma)\delta_k] \quad (5.1)$$

alors la suite $\{x_k\}$ converge vers x^* tel que $\nabla f(x^*)=0$ et que $\nabla^2 f(x^*)$ est semi-définie positive. La condition de Sorensen (5.1) peut être généralisé de sorte que la suite $\{x_k\}$ converge vers x^* stationnaire et $\nabla^2 f(x^*)$ est semi-définie positive.

Dans cette section, nous étudions les conditions à imposer sur la solution du problème quadratique local pour assurer que la suite $\{x^k\}$ générée par l'algorithme converge vers un point stationnaire et en plus le Hessien en ce point est semi-définie positive. Nous faisons auparavant les hypothèses suivantes sur la direction de déplacement de l'algorithme RC où d_k , g_k et H_k sont respectivement la direction, le gradient et une approximation du Hessien de f en x^k

$$(H1) \exists \tau > 0 : \forall k \text{ on a } q(0) - q(d_k) \geq \tau \|g_k\| \min\{\delta_k, \frac{\|g_k\|}{\|H_k\|}\}$$

$$(H2) \exists \varepsilon > 0 : \forall k \text{ on a } q(0) - q(d_k) \geq -\varepsilon \lambda_1(H_k) \delta_k^2 \text{ où}$$

$\lambda_1(H)$ est la plus petite valeur propre de H .

$$(H3) \text{ Si } H_k \text{ est déf. positive et } \delta_k \geq \|H_k^{-1} g_k\| \text{ alors } d_k = -H_k^{-1} g_k$$

Ces hypothèses signifient que la direction doit être choisie d'une manière précise, i.e., il faut prendre la direction de Newton chaque fois qu'elle est dans la région de confiance. Autrement dit, elles permettent de garantir que la direction décroît suffisamment le modèle quadratique (H1) même lorsque cette direction est de courbure négative (H2). Enfin, la dernière hypothèse assure que la direction de Newton est prise lorsqu'elle est dans domaine réalisable. En pratique, la dernière condition est assurée dans le nouvel algorithme proposé pour la résolution du programme quadratique (cf. chapitre I).

Le lemme suivant illustre que la condition de Sorensen (5.1) entraîne la condition suivante :

Il existe β_1, β_2 positifs tels que :

$$-q(d_k) \geq \beta_1 |q^*| \text{ avec } \|d_k\| \leq \beta_2 \delta_k \quad (5.2)$$

où q^* est la valeur optimale exacte de (Q).

5.1 LEMME

Soit $\sigma \in (0,1)$ donné et supposons que $H+\lambda I = R^t R$; $(H+\lambda I) p = -g$ et $\lambda \geq 0$.

Si $\|p\| \geq (1-\sigma)\delta_k$ alors $q(p) \leq -0.5(\sigma-1)^2(\|Rp\|^2 + \lambda\delta_k^2) \geq (\sigma-1)^2|q^*|$.

Terminons cette partie par la présentation de l'essentiel des théorèmes de convergence de l'algorithme RC.

5.2 THEOREME [M-S83]

Soit f deux fois continûment différentiable sur l'ensemble $\Omega = \{x : f(x) \leq f(x^0)\}$ et considérons la suite $\{x^k\}$ de l'algorithme RC. Supposons que la direction d_k satisfait, pour tout k , la condition (5.2) ci-dessus alors si Ω est compact, l'algorithme possède l'une des deux propriétés suivantes :

Soit $\lim x^k = x^*$ où $x^* \in \Omega$ est un point stationnaire avec le Hessien de f en x^* est semi-définie positive.

Soit l'algorithme s'arrête en un point stationnaire appartenant à Ω , qui n'est pas une valeur d'adhérence de $\{x^k\}$ avec le Hessien de f en x^* est semi-définie positive.

5.3. THEOREME [M-S83]

Soit f deux fois continûment différentiable sur le compact $\Omega = \{x : f(x) \leq f(x^0)\}$ et considérons la suite $\{x^k\}$ générée par l'algorithme RC. Supposons que la direction d_k du problème quadratique local satisfait, pour tout k , la condition (5.2). Si x^* est une valeur d'adhérence de la suite $\{x^k\}$ et le Hessien de f en x^* est non singulière alors l'algorithme RC fournit un optimum isolé, i.e., $\{x^k\}$ converge vers un x^* tel que $\nabla^2 f(x^*)$ est définie positive. Sous une hypothèse additionnelle¹³ simple on peut obtenir une vitesse de convergence super linéaire. Si le Hessien est de Lipschitz la convergence est quadratique.

5.4. REMARQUE

La condition que l'ensemble $\Omega = \{x : f(x) \leq f(x^0)\}$ soit compact peut être remplacée par le fait que la suite $\{x^k\}$ soit bornée.

¹³ Il s'agit de l'hypothèse suivante : Si (H3) est vérifiée et il existe $\beta > 0$: si $0 < \|d_k\| \leq \beta r$ alors le hessien de f en x^* est définie positive [M-S83].

PARTIE 2

**METHODE DE LA REGION DE CONFIANCE
POUR LA MINIMISATION AVEC CONTRAINTES**

1. INTRODUCTION

La plupart des méthodes de résolution d'un problème d'optimisation en présence de contraintes non linéaires consistent à résoudre le système des équations de Kuhn-Tucker. Ce sont des méthodes primales-duales en ce sens qu'elles opèrent simultanément dans l'espace des variables primales et dans l'espace des variables duales (les multiplicateurs de Lagrange). D'une manière générale, sous des hypothèses de régularité de la fonction objectif et les fonctions contraintes, on obtient une convergence asymptotique super-linéaire ou même quadratique. La méthode généralement employée pour résoudre le système non linéaire de Kuhn-Tucker est la méthode de Newton. Or, on sait les difficultés liées au choix du point de départ pour assurer la convergence. D'autre part, la méthode de la région de confiance en optimisation sans contraintes s'avère très robuste et efficace¹⁴. Cet algorithme présente l'avantage que l'on peut choisir arbitrairement le point initial mais aussi il permet d'obtenir une solution satisfaisant les conditions d'optimalité de second ordre (i.e., éventuellement un minimum isolé). La région de confiance utilise les directions qui sont une combinaison de la direction de Newton (quasi-Newton) et de la direction de la plus forte descente [Va85]. C'est tout cela qui nous a motivé à adapter l'algorithme de la région de confiance à l'optimisation avec contraintes.

2. PRESENTATION DU PROBLEME

Le problème général d'optimisation avec contraintes peut s'écrire, sans perte de généralité, sous la forme :

$$\text{Min } \{ f(x) : c_i(x) = 0, i=1,\dots,m; x \in \mathbf{R}^n \} \quad (P)$$

où f et c_i sont des fonctions deux fois continûment dérivables. Supposons que $n \geq m$, que la fonction est inférieurement bornée et que les gradients des fonctions contraintes sont linéairement indépendants. Nous cherchons un minimum local, i.e, un vecteur x^* réalisable tel qu'il existe un $\delta > 0$, $\forall x$ vérifiant $\|x^* - x\| \leq \delta$ on a $f(x^*) \leq f(x)$.

¹⁴ Voir Partie I de ce chapitre.

Le principe général de la méthode la RC pour résoudre (P) peut être expliqué ainsi :

Chaque itération comprend, après que les contraintes c_i soient linéarisées, un pas de restauration des contraintes et un pas de minimisation quadratique lequel est transformé en un problème quadratique sous la seule contrainte de confiance.

A chaque itération de l'algorithme une matrice d'ordre $n-m$ (approximation du Hessien réduit du Lagrangien) est mise à jour (éventuellement à l'aide des approximations de Nocédal & al [N-O85]). Enfin, l'algorithme proposé possède une convergence super-linéaire [S2-B87].

3. NOTATIONS

On utilise les notations suivantes :

On désigne par $c(x) = (c_1(x), \dots, c_m(x))$ la fonction des contraintes $c(\cdot) : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^m$ et par $g(x)$ le gradient de f en x . On note par $A(x)$ (n, m) le Jacobien des contraintes en x , i.e, $A(x) = [a_1(x), \dots, a_m(x)]$ où $a_i(x)$ est le gradient de $c_i(x)$. La ($n, n-m$) matrice $Z(x)$ est formée de colonnes z_i telles que $\{z_1, \dots, z_{n-m}\}$ forme une base orthonormée de l'espace $\mathcal{N}(A^t)$, c'est à dire, $A^t Z = 0$ et $Z^t Z = I_{(n-m)}$. On désigne par $\lambda_1(H)$ la plus petite valeur propre de H .

4. SYSTEME D'OPTIMALITE (PREMIER ORDRE)

Soient f et c de classe C^2 et $A(x^*)$ de plein rang alors il existe un unique multiplicateur de Lagrange $\lambda^* \in \mathbf{R}^m$ tel que (x^*, λ^*) vérifie :

$$c(x^*) = 0 \quad (4.1.a)$$

$$\nabla f(x^*) + A^t(x^*) \cdot \lambda^* = 0 \quad (4.1.b)$$

Le système non linéaire (4.1) comporte $(n+m)$ équations et $(n+m)$ inconnues (x^*, λ^*) . Remarquons que la condition (4.1.b) est équivalente à $Z^t \nabla f(x^*) = 0$ où Z est une base (orthonormée) de $\mathcal{N}([A(x^*)]^t)$ [G-M-W81].

Pour obtenir les conditions de second ordre, il faut rajouter la condition :

$H(x^*)$ semi-définie positive sur $\mathcal{N}([A(x^*)]^t)$.

L'approche employée par plusieurs auteurs est de résoudre le système à l'aide de la méthode de Newton. Cette dernière nécessite la mise à jour d'une matrice de l'ordre $(n+m)$ approchant le Jacobien du système. L'avantage d'une telle approche est qu'elle assure que les deux suites $\{x^k\}$ et $\{\lambda^k\}$ convergent d'une manière super-linéaire. Or, si on se contente de la seule convergence super-linéaire de la suite $\{x^k\}$ on peut employer un algorithme ne mettant à jour qu'une matrice d'ordre $(n-m)$ et ceci en réduisant le système (4.1) [Gi86]. Cette remarque présente un grand intérêt lorsque $n-m$ est petit.

Notre approche ici consiste à employer la méthode de la région de confiance qui comporte à chaque itération les deux phases suivantes :

La première est d'établir une approximation quadratique de la fonction objectif et de linéariser les contraintes autour du point courant x^k . La seconde est de minimiser la forme quadratique déduite sur la variété affine engendré par les contraintes ainsi linéarisées. Ce dernier problème sera transformé en un problème quadratique sous la seule présence d'une contrainte de la forme $\|x\| \leq \delta$. La transformation elle même comporte deux pas :

Un pas de restauration des contraintes, c'est à dire, trouver un point réalisable v appartenant à $\text{Im}(A)$, puis faire le changement de variable $x = v + w$ avec w parcourt le noyau de A^t . Le second pas consiste à exprimer le vecteur w à l'aide des éléments de la base orthonormée du noyau de A^t ce qui permet de transformer enfin le problème à minimiser une forme quadratique sur une sphère.

5. PRESENTATION DE L'ALGORITHME

Le schéma itératif de l'algorithme consiste à définir $x^{k+1} = x^k + d$ où d est le minimum d'un problème de la forme (l'indice k sera omis s'il n'y a pas de d'ambiguïté)

$$\text{Min } \{ p_k(d) : \|d\| \leq \delta \text{ et } A^t d + c(x^k) = 0 \} \quad (5.1.a)$$

où,

$$p_k(d) = \langle g_k, d \rangle + 0.5 \langle d, H_k d \rangle$$

Pour assurer que le domaine admissible $\{ d : \|d\| \leq \delta \text{ et } A^t d + c(x^k) = 0 \}$ ne soit pas vide on "relaxe" les contraintes linéarisées par un facteur $\alpha \in (0,1)$ choisi de manière que l'intersection des ensembles $\{ d : A^t d + c(x^k) = 0 \}$ et $\{ d : \|d\| \leq \delta \}$ contient au moins un élément.

Donc, le problème à minimiser est :

$$\text{Min } \{ p_k(d) : \|d\| \leq \delta \text{ et } A^t d + \alpha c(x^k) = 0 \} \quad (5.1.b)$$

Et pour le résoudre, on effectue le changement de variable suivant :

$$d = \alpha v + Z u$$

où $v \in \text{Im}(A)$ tel que $A^t v = -c(x^k)$, $Zu \in (\text{Im}(A))^\perp = \mathcal{N}(A^t)$ où $u \in \mathbb{R}^{n-m}$ et Z une base orthonormée de $\mathcal{N}(A^t)$ et

Signalons que ce dernier système admet une solution unique car A est de rang plein.

La forme quadratique $q_k(u) = p_k(\alpha v + Z u)$ est de la forme :

$$q_k(u) = 0.5 \langle Z^t H Z u, u \rangle + \langle u, \tilde{g} \rangle + \text{cst}; \text{ où } \tilde{g} = g + 0.5 \alpha H v.$$

Pour déterminer la direction de descente on doit résoudre le problème suivant :

$$\text{Min } \{ q_k(u) : \|u\| \leq \delta' \} \quad (5.2)$$

$$\text{où } \delta' = (\delta^2 - \alpha^2 \|v\|^2)^{1/2}$$

Rappelons que ce dernier problème possède la même forme que celui du problème quadratique local dans les algorithmes RC sans contraintes.

D'autre part, pour garantir une amélioration satisfaisante à chaque itération on impose la condition que la composante de d dans $\text{Im}(A)$ qu'est αv , ne soit trop petite en norme par rapport au rayon de confiance δ ; i.e., $\alpha \|v\| \geq \theta \delta$. pour un $\theta \in (0,1)$.

L'ensemble de ces conditions explique la formule employée pour calculer α plus loin. A présent, il reste à examiner si la direction d permet de définir un nouvel itéré davantage proche du minimum. Pour cela, on introduit une fonction de pénalité¹⁵ qui permet de mesurer l'amélioration réalisée dans la direction choisie, i.e., si la direction

¹⁵ Appelée fonction de pénalité exacte (cf [G.M.W81]). Voir ses propriétés [C-L-P2-82].

prise permet de décroître la fonction objectif tout en assurant que le déplacement dans la direction ne fasse pas sortir le nouvel itéré du domaine réalisable. La fonction de pénalité tente d'assurer une sorte de compromis entre le besoin de faire décroître la fonction objectif et la nécessité de garder les itérés dans le domaine réalisable. Or, cette tâche est très délicate, car il est parfois impossible de trouver une direction pour laquelle l'itéré courant ne sorte pas du domaine réalisable.

Un autre phénomène (dit effet Maratos), bien que rare¹⁶, nécessite le plus grand soin. Ce phénomène peut être expliqué par le fait que la fonction de pénalité introduite ne peut reconnaître, dans certaines situations, si la direction présente réalise ou non un progrès. En fait, on constate sur l'exemple suivant que l'effet Maratos arrive lorsque l'on veut se déplacer d'un point "suffisamment" réalisable à un point toujours réalisable mais en lequel les contraintes sont légèrement plus grandes. Donc le fait d'imposer que la fonction de pénalité décroisse dans la direction présente revient à imposer que les poids de pénalité ne doivent pas dépasser une certaine borne. Or, la fonction de pénalité ne peut mesurer le progrès désiré que si à chaque itération on puisse augmenter les poids pour assurer la convergence super linéaire de la suite $\{x^k\}$ vers un point vérifiant les conditions de Kuhn-Tucker.

5.1. EXEMPLE

Considérons l'exemple suivant pour illustrer le phénomène Maratos :

$$\text{Min } \{ f(x) : c(x) = 0 \} \text{ où } f(x) = -x_1 \text{ et } c(x) = x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0; x \in \mathbb{R}^2.$$

Le minimum de ce problème est évidemment $(1,0)^t$. Prenons comme point de départ

$$x^k = (\cos \xi_k, \sin \xi_k)^t \text{ où } k=1 \text{ et } \xi_k \text{ est quelconque.}$$

Evidemment x^k est réalisable pour tout ξ . Le problème quadratique aura la forme suivante :

$$\text{Min } \{ q(d) : A^t d + c(x^k) = 0 \text{ et } \|d\| \leq \delta \} \quad (Q)$$

¹⁶ Il est rare selon les affirmations de Vardi [Va85].

Or, $c(x^k)=0$ d'où la direction $d = (\sin^2(\xi), -\sin(\xi) \cos(\xi))$ est la seule solution exacte de (Q) si et seulement si $\sin(\xi) \leq \delta$. Choisissons ξ tel que $\sin(\xi) \leq \delta$ alors

$$\phi(x^{k+d}) - \phi(x^k) = \sin^2(\xi)(\mu - 1)$$

D'où $\forall \mu > 1$ on a évidemment $\phi(x^{k+d}) - \phi(x^k) > 0$ bien que

$$f(x^{k+d}) - f(x^k) < 0 \quad \forall \mu.$$

En d'autres termes, la fonction de pénalité n'arrive pas à détecter, manque de poids convenables, la direction de descente. En fait, on constate que dans certains cas délicats les comportements de la fonction de pénalité et de la fonction objectif ne sont pas cohérents. On donnera ci-après un remède à ces difficultés.

5.1.ALGORITHME R.C AVEC CONTRAINTES

Le schéma général de l'algorithme est constitué des étapes suivantes :

(0) Initialisation : $k=0$; $\eta \in (0,1)$ arbitraire.

Répéter jusqu'à convergence

(1) $x = x^k$; $f = f(x)$; $g = \nabla f(x)$; $A = \nabla c(x)$; $\delta \in (0,1)$; $H \cong \nabla^2 f(x)$.

Soit Z une base orthonormée de $\mathcal{N}(A^t)$.

(2) Test d'arrêt : Si $\|c(x)\| \leq \epsilon$ et $\|Z^t g\| \leq \epsilon$ alors stop.

(3) Calculer $v = -A(A^t A)^{-1} c(x)$.

(4) Choisir $\alpha \in (0,1)$ tel que $\{d : \alpha c(x) + A^t d = 0\} \cap \{d : \|d\| \leq \delta\} \neq \emptyset$ ¹⁷.

(5) Calculer $\delta' = (\delta^2 - \alpha^2 \|v\|^2)^{1/2}$.

(6) Calculer u^* la solution de $\text{Min} \{q(u) : \|u\| \leq \delta'; u \in \mathbb{R}^{n-m}\}$ où

$$q(u) = \langle Wu, u \rangle + \langle u, \tilde{g} \rangle \text{ avec } W = Z^t H Z \text{ et } \tilde{g} = g + 0.5 \alpha H.$$

¹⁷ i.e, $d \geq d(0, V)$ où $V = \{d : A^t d + a.c(x)\}$. Voir plus loin l'algorithme détaillé.

(7) Ajuster les poids de pénalités μ^i (i.e augmenter ces poids si nécessaire).

(8) Calculer :

$$\rho = \frac{\phi(x) - \phi(x+d)}{\psi(0) - \psi(d)} \quad \text{où } d = Zu^* + \alpha v \text{ et } \phi(x) = f(x) + \sum_{i=1}^m \mu^i |c_i(x)|.$$

(9) Si $\rho \geq \eta$ alors $x^{k+1} = x + d$; $k = k+1$; augmenter δ .

Sinon réduire δ et retourner à l'étape 4.

Fin de l'algorithme.

L'algorithme nécessite quelques explications :

L'étape 7 d'ajustement des poids de pénalité se fait de la manière suivante :

pour un ω donné tel que $\omega > 1$, on teste à chaque fois qu'un nouvel itéré est pris si μ^i , les poids courants, sont inférieures à un seuil défini par le scalaire (certains indices seront omis).

$$\bar{\mu}_k + \omega; \quad \text{où } \bar{\mu}_k = -(A^t A)^{-1} A^t (g_k + \alpha H_k v).$$

L'étape (8) établit le rapport de la réduction relative à la fonction de pénalité et la réduction actuelle relative au modèle quadratique. L'algorithme ci-dessus ne tient pas compte de l'effet Maratos. Pour le faire, on applique l'idée de Mayne et Polak [M.P 82],[Fletcher 82,84] qui consiste à rajouter une direction de correction de sorte que le nouvel itéré soit "enfoncé" plus dans le domaine réalisable, i.e, $c(x^k+d+\omega)$ est plus petit que $c(x^k)$, ceci est réalisé si on prend w tel que $A^t w = -c(x^k+d)$.

Il faut signaler que l'utilisation de la méthode QR¹⁸ simplifie énormément plusieurs étapes et surtout permet d'obtenir, à chaque itération, la base orthonormée de $\mathcal{R}(A^t)$. Il me semble que l'intérêt de la méthode réside dans tout le "background" et l'ensemble des algorithmes numériques qu'elle emploie pour l'implémenter sur ordinateur. La mise en œuvre de la méthode nécessite la connaissance de la technique de pénalisation et les difficultés liées.

¹⁸ Orthogonalisation par Householder. Voir p 39 du livre de Gill & al [G-M-W 81].

6. THEORIE DE CONVERGENCE

Nous donnerons, aux paragraphes suivants, quelques résultats théoriques pour justifier, entre autres, le choix de la fonction de pénalité ϕ et les poids associés. On présentera également que si le Hessien (ou une approximation) du Lagrangien est borné(e) alors la suite des gradients du Lagrangien ainsi que $\{c(x^k)\}$ convergent vers zéro lorsque k est assez grand.

D'autre part, si le Hessien est exact alors la méthode converge localement d'une manière super-linéaire et l'effet Maratos ne se manifeste pas. Auparavant, nous faisons les hypothèses suivantes analogues au cas de l'optimisation sans contraintes :

$$(H1) \exists \tau > 0 : \forall k \text{ on a } q(0) - q(u_k) \geq \tau \|Z^r \tilde{g}\| \min\{\delta', \frac{\|Z^r \tilde{g}\|}{\|Z^H Z}\}$$

$$(H2) \exists \tau' > 0 : \forall k \text{ on a } q(0) - q(u_k) \geq -\tau' \nu_1(Z^H Z)(\delta')^2 \}$$

$$(H3) \text{ Si } Z^H Z \text{ est déf.pos et } \delta' \geq \|(Z^H Z)^{-1}Z^r \tilde{g}\| \text{ alors } \\ u_k = - (Z^H Z)^{-1}Z^r \tilde{g}$$

Ces hypothèses permettent d'assurer que la direction choisie décroît suffisamment le modèle quadratique (H1) même lorsque celle-ci est de courbure négative (H2). Enfin, la dernière hypothèse assure que la direction de Newton est toujours prise lorsqu'elle est à l'intérieur de la région. Cette dernière hypothèse est pratiquement assurée pour l'algorithme proposé pour la résolution de (Q_k) .

6.1 LEMME [S2-B87]

Soit u^* la solution du problème (6.2). Si $\text{rang}(A) = m$ et si les μ^i sont strictement supérieurs au seuil défini ci-dessus alors on a, à chaque itération, $\psi(0) - \psi(d) \geq q(0) - q(u^*) + \omega \alpha \|c\|_1$ où ψ est une approximation quadratique de ϕ .

Preuve

$$\psi(0) - \psi(d) = -0.5 \langle Hd, d \rangle - \langle g, d \rangle + \sum_{i=1}^m \mu^i \{ |c_i| - |c_i + \langle d, \nabla c_i \rangle| \}$$

où $d = Zu + \alpha v$. Puisque $\langle \tilde{g}, v \rangle = - \langle \bar{\mu}, c \rangle$ et $\langle \nabla c_i, d \rangle = -\alpha c_i$

alors il suffit d'écrire $\psi(0) - \psi(d)$ en fonction de u , μ^i et c^i pour en déduire le résultat

Le théorème suivant établit sous certaines hypothèses standards avec le Hessien de la fonction objectif et la suite $\{\phi(x^k)\}$ sont bornés alors les conditions nécessaires d'optimalité de second ordre sont satisfaites.

6.2 LEMME [S2-B87]

Supposons que les hypothèses (H1) à (H3) soient vérifiées. Alors il existe $\gamma_2 > 0$; $\forall x \in S$ ouvert de \mathbf{R}^n , $\forall H \in \mathbf{R}^{n \times n}$: $\|H\| \leq \beta$ et $\forall d \in \mathbf{R}^n$ avec $[x, x+d] \subset S$ on a

$$|\phi(x) - \phi(x+d) - (\psi(0) - \psi(d))| \leq \gamma_2 \|d\|^2$$

où ψ est une approximation quadratique de ϕ .

7. TECHNIQUES D'IMPLEMENTATION

7.1 CALCUL DE LA BASE DU $\mathfrak{N}(A^t)$

On veut formuler la base orthonormée du $\mathfrak{N}(A^t)$ avec $A = A(x)$ est la $n \times m$ matrice Jacobien de la fonction contrainte en x de rang égal m . On peut décomposer A à l'aide des transformations de Householder [voir G-M-W83] de la forme

$A(x) = Q(x) \cdot (R, 0)^t(x)$ où R est une matrice (m, m) triangulaire supérieure et Q est une matrice (n, n) orthogonale. $Q = (Q_1, Q_2)$ avec Q_1 est (n, m) et Q_2 $(n, n-m)$ matrice qui constitue la base de $\mathfrak{N}(A^t)$. Signalons néanmoins certaines difficultés liées à la régularité de la base $Z(x)$. En effet, Coleman & Sorensen [C-S84] ont montré que l'implémentation standard de QR ne permet pas d'obtenir une base orthonormée qui varie continûment avec x (voir l'exemple dans [C-S84] page 236).

Pour obtenir une base régulière, Coleman et Sorensen[C-S84] proposent une autre variante¹⁹ pour assurer que $Z(x)$ varie continûment avec x . Enfin, signalons qu'en pratique nous n'avons pas constaté les répercussions de choisir une base non régulière dans nos implémentations numériques.

7.2 CALCUL DU MULTIPLICATEUR DE LAGRANGE

L'algorithme de la région de confiance pour résoudre un problème d'optimisation sous des contraintes est déjà trop lourd par l'introduction de poids de pénalité qu'ils faut savoir les manipuler. D'autre part, le calcul du multiplicateur de Lagrange est nécessaire pour en tenir compte vraiment des contraintes. La formule donnant ce multiplicateur est simple mais très coûteuse en pratique puisqu'elle nécessite le calcul de l'inverse et la multiplication de matrices. Au lieu de cette formule, on établit une approximation en minimisant la quantité $\|g + A\lambda\|$ qui nous conduit, en utilisant QR, au système linéaire $R\lambda = -Q_1g$, où $A = (Q_1, Q_2) \cdot (R, 0)^t$

Dans nos implémentations numériques, on calcule le multiplicateur de Lagrange en résolvant ce dernier système. Pour être complet, nous supposons que la suite générée ainsi converge vers le multiplicateur de Lagrange.

CONCLUSION

La généralisation de la méthode de la région de confiance de l'optimisation sans contraintes à l'optimisation non convexe avec contraintes de la manière que nous avons proposée ici se confronte aux problèmes de la stabilité numériques des algorithmes intermédiaires employés pour transformer le problème initial (par exemple, QR). Et si on ajoute à cela les difficultés inhérentes aux techniques de pénalisations (phénomène Maratos entre autres) lors de l'utilisation (même implicite) des fonctions de pénalité non différentiables, l'algorithme devient alors très lourd à mettre en œuvre dans la pratique et surtout difficile à le contrôler efficacement. Néanmoins, l'algorithme présente un intérêt théorique vu le volume des techniques algorithmique employé pour son élaboration. Vu l'importance de la méthode de la région de confiance en optimisation sans contraintes et ses qualités de robustesse et de stabilité²⁰ nous proposons, en perspective, qu'il soit généralisé pour

¹⁹ Voir en particulier la variante b du section 3 page 237 de [C-S84]

²⁰ En dehors du cas critique.

l'optimisation non différentiable en suivant l'idée de Fletcher [Fl82] ce qui permet, peut être, d'obtenir une méthode robuste pour l'optimisation générale. Il reste à signaler que des travaux très récents de Toint & al. [To90-91] portant sur l'optimisation non linéaire avec contraintes de type $a_i \leq x_i \leq b_i$ nous semble très intéressante et facile à mettre en œuvre. Une telle démarche peut être envisagée avec une adaptation et modélisation adéquate d'un problème général de l'optimisation avec contraintes.

CHAPITRE III

LA STABILITE DE LA DUALITE EN OPTIMISATION NON CONVEXE

PARTIE 1

**STABILITE DE LA DUALITE LAGRANGIENNE DANS LES
PROBLEMES DE MAXIMISATION**

INTRODUCTION

On étudie dans ce chapitre la stabilité de la dualité lagrangienne dans les problèmes de maximisation convexe de type :

$$\alpha_0 = \text{Sup} \{ f(x) : \gamma(x) \leq 1 \}$$

où $f, \gamma \in \Gamma_0(X)$, sont positivement homogènes.

L'utilité d'une telle étude réside dans les faits suivants :

- a) Elle permet d'obtenir des informations précieuses supplémentaires sur les caractérisations des solutions primales et duales.
- b) Elle permet d'introduire des problèmes d.c. (P_λ) :

$$\text{Inf} \{ -f(x) - 0.5\lambda (\gamma^2(x)-1) : x \in X \} \quad (P_\lambda)$$

dont la résolution permet d'obtenir les solutions de (P).

Il est clair que la forme d.c. de (P_λ) est préférable à celle de (P) obtenue en introduisant la fonction indicatrice de l'ensemble $\{x : \gamma^2(x) \leq 1\}$.

Ce chapitre est composé de deux parties :

Dans la première on présente les résultats de la stabilité de la dualité lagrangienne dans le problème (P) dans les deux cas suivants :

- (i) f non négative, positivement homogène et non nulle et γ est une norme de X .
- (ii) f et γ sont deux semi-normes telles que $\mathfrak{N}(\gamma) \subset \mathfrak{N}(f)$.

On obtient ainsi l'expression explicite très simple de la fonction objectif duale $g(\lambda)$ qui est d'une grande utilité pour les algorithmes de sous gradients. Notons que ces résultats ont pu être obtenus grâce à la représentation analytique des contraintes de (P) sous la forme $\{x : \gamma^2(x) \leq 1\}$

La deuxième partie emploie les techniques plus modernes de la perturbation en dualité pour traiter la dualité dans (P). Nous avons utilisé les résultats de Joly[Au76] pour démontrer l'inf-dif stabilité et la stabilité de cette dualité pour une classe plus large que celle traitée dans la première partie.

Dans le cas (i) ci-dessus, i.e., f est non négative, positivement homogène et γ est une norme, nous constatons, en dehors de la stabilité (qui dans ce cas implique l'inf-dif stabilité) de la dualité lagrangienne, que l'algorithme primal dual pour la résolution de (P) est exactement la méthode de Dinkelbach [Schaible81].

1. POSITION DU PROBLEME

Soit le problème de maximisation convexe ($X=\mathbb{R}^n$).

$$\alpha_0 = \sup \{ f(x) : \phi(x) \leq 1 \} \quad (P)$$

où $f \in \Gamma_0(X)$ ²¹ est une fonction non négative, positivement homogène, finie partout et non nulle et ϕ est une norme quelconque sur X . Il est clair que l'ensemble des solutions de (P) est non vide et est contenu dans $\{x : \phi(x)=1\}$.

Dans toute cette partie on dit que le problème est stable dans la dualité lagrangienne classique si les montants du primal et du dual sont égaux et que l'on peut récupérer les solutions du problème primal à l'aide d'une solution duale.

Nous allons montrer donc que le problème (P) est stable et nous généralisons ensuite ces résultats pour f et ϕ des semi-normes telles que $\mathfrak{N}(\phi) \subset \mathfrak{N}(f)$ ²².

2. PRELIMINAIRES

Nous employons constamment les notations suivantes :

Le symbole $\| \cdot \|$ désignera la norme Euclidienne, \mathcal{S} (resp. \mathcal{S}_λ) désignera l'ensemble des solutions de (P) (resp. de (P_λ)).

Rappelons tout d'abord le résultat suivant concernant le calcul du sous différentiel, du à Valadier [La72], dont nous aurons besoin dans la suite.

²¹ $\Gamma_0(X)$ désigne l'ensemble des fonctions propres, s.c.i et convexes sur X .

²² En effet, s'il existe un x tel que $\phi(x)=0$ et $f(x) > 0$ alors α_0 est égale à $+\infty$.

2.1. THEOREME

Soit (f_α) une suite de fonctions convexes sur X où $\alpha \in A$ avec A compact quelconque. Posons $f = \sup \{ f_\alpha, \alpha \in A \}$. Supposons qu'il existe un ouvert U de X tel que l'application $(\alpha, x) \in A \times U \rightarrow f_\alpha(x)$ soit finie et continue sur $A \times U$. Alors en tout point x_0 de U ,

i) la fonction f est continue,

$$\text{ii) } \partial f(x_0) = \overline{\text{co}} \left\{ \bigcup_{\alpha \in F(x_0)} f_\alpha(x_0) \right\}$$

où $F(x_0) = \{ \alpha \in A : f_\alpha(x_0) = f(x_0) \}$ et $\overline{\text{co}}(E)$ désigne l'enveloppe convexe fermée de E . \blacktriangle

Revenons maintenant au problème (P) que l'on préfère présenter sous la forme

$$\alpha = \inf \{ -f(x) : \phi(x) \leq 1 \} \quad (\text{P})$$

On va d'abord analyser le problème dual de (P) qui a la forme

$$\beta = \text{Sup} \{ g(\lambda) : \lambda \geq 0 \} \quad (\text{D})$$

où

$$g(\lambda) = \text{Inf} \{ L(x, \lambda); x \in X \} \quad (\text{P}_\lambda)$$

et

$$L(x, \lambda) = \begin{cases} -f(x) + \frac{\lambda}{2} (\phi^2(x) - 1) & \text{si } \lambda \geq 0 \\ -\infty & \text{sinon} \end{cases}$$

On est ainsi amené à ne considérer, pour la suite, que le cas $\lambda \geq 0$.

L'ensemble des solutions de (D) sera noté \mathcal{D} .

3. ETUDE DU PROBLEME (P_λ)

Ce paragraphe sera consacré à l'étude et la caractérisation des solutions du problème (P_λ) que l'on peut présenter encore sous la forme

$$g(\lambda) = h(\lambda) - 0.5 \lambda \quad (\text{P}_\lambda)$$

où,

$$h(\lambda) = \inf \{ -f(x) + 0.5\lambda \phi^2(x) \} \quad (P'_\lambda)$$

L'hypothèse " f est positivement homogène et finie partout " revient à dire que :

$$\exists b \geq 0 \text{ tel que } f(x) \leq b \phi(x) \quad (H)$$

Posons $\tilde{g}(\lambda) = -g(\lambda)$ pour tout le reste. La propriété suivante présente les caractéristiques de la fonction objectif duale.

3.1. PROPRIÉTÉ

- i) Le domaine effectif de g, $\text{dom}(g)$, est égal à $]0, +\infty[$.
- ii) $\tilde{g} \in \Gamma_0(X)$, est finie et continue sur son domaine effectif. 

En effet, sous l'hypothèse (H), $-f(x) + 0.5\lambda(\phi^2(x) - 1)$ est coercive $\forall \lambda > 0$. D'autre part, $\tilde{g}(0) = +\infty$ car f est positivement homogène, non négative et non nulle.

3.2. CARACTÉRISATION DE LA SOLUTION DE (P_λ)

Une des conséquences immédiates de (H) est que l'on a pour tout $\lambda > 0$,

$$L(x, \lambda) \geq -0.5 \lambda + \phi(x) (0.5 \lambda \phi(x) - b).$$

Par suite, $L(x, \lambda) \rightarrow +\infty$ si $\phi(x) \rightarrow +\infty$.

La continuité de $L(x, \lambda)$ assure l'existence du minimum. Par conséquent, \mathcal{P}_λ est non vide.

Le problème (P_λ) est un problème d.c (différence de deux fonctions convexes ²³).
D'où, x est solution de (P_λ) si (cf. Chapitre IV)

$$\partial f(x) \subset \partial(0.5 \lambda \phi^2(x)) = \lambda \phi(x) \partial \phi(x); \text{ i.e., } \forall y \in \partial f(x), \exists z \in \partial \phi(x), y = \lambda \phi(x) z$$

Comme f et ϕ sont positivement homogènes on peut en déduire que

$$f(x) = x^t \cdot y = \lambda \phi(x) x^t \cdot z = \lambda \phi^2(x) \quad (3.2)$$

En effet, on sait que si f est convexe et positivement homogène alors on a,

$$x^t \cdot y = f(x) \quad \forall y \in \partial f(x).$$

²³ Voir le chapitre 4 de cette thèse concernant l'optimisation D.C.

Le résultat suivant, conséquence immédiate de l'égalité (3.2), est très utile pour établir la stabilité de (P).

3.3. PROPOSITION

Soit $\lambda > 0$. Alors

- i) $\mathcal{P}_\lambda \subset \{ x : \phi^2(x) = -1 - 2g(\lambda)/\lambda, f(x) = -\lambda - 2g(\lambda) \}$
- ii) Si $\phi(x) > 1$ et $x \in \mathcal{P}_\lambda$ alors $-\lambda > g(\lambda) > -f(x)$.
- iii) Si $\phi(x) < 1$ et $x \in \mathcal{P}_\lambda$ alors $-\lambda < g(\lambda) < -f(x)$.
- iv) Si $\phi(x) = 1$ et $x \in \mathcal{P}_\lambda$ alors $-\lambda = g(\lambda) = -f(x)$. \clubsuit

On remarquera que si la propriété (iv) a lieu alors $\lambda \in \mathcal{D}$ et $x \in \mathcal{P}$.

Le corollaire suivant stipule que l'ensemble des solutions du problème (P_λ) pour un $\lambda > 0$ fixé vérifie l'une des trois propriétés suivantes (mutuellement exclues).

3.4. COROLLAIRE

Pour tout $\lambda > 0$ fixé, on a l'une des propriétés suivantes (mutuellement exclues):

- 1) $\mathcal{P}_\lambda \subset \{ x : \phi(x) < 1 \}$
- 2) $\mathcal{P}_\lambda \subset \{ x : \phi(x) > 1 \}$
- 3) $\mathcal{P}_\lambda \subset \{ x : \phi(x) = 1 \}$. \clubsuit

Ce corollaire est sans importance si \mathcal{P}_λ contient un seul élément.

4. STABILITE D'UN PROBLEME NON CONVEXE

Le théorème ci-après donne les conditions entraînant que l'on a en fait l'égalité $\alpha = \beta$ et que l'on puisse exprimer l'ensemble des solutions primales sous la forme

$$\{ x^* : x^* \text{ est solution de } (P_{\lambda^*}) \text{ telle que } \lambda^*(\phi(x) - 1) = 0 \}.$$

Rappelons que l'on a toujours $\alpha \geq \beta$.

4.1. THEOREME

Supposons que ces deux hypothèses soient vérifiées :

$$i) \partial \tilde{g}(\lambda) = \overline{\text{co}} \left\{ \bigcup_{x \in \mathcal{P}_\lambda} \{ -0.5(\phi^2(x) - 1) \} \right\}$$

ii) (D) admet une solution λ^* .

Alors nous avons les propriétés suivantes :

- a) $\mathcal{P}_{\lambda^*} \subset \{ x : \phi(x) = 1 \}$
- b) $\nabla g(\lambda^*) = 0$.
- c) $\alpha = \beta = -\lambda^* = g(\lambda^*) = -f(x^*)$. ♣

($\overline{\text{co}}(E)$ désigne l'enveloppe convexe fermée).

La démonstration de ce théorème est immédiate.

4.2. REMARQUES

(1) L'hypothèse i) du théorème de stabilité est équivalente à supposer que

$$\partial \tilde{g}(\lambda) \subset \overline{\text{co}} \left\{ \bigcup_{x \in \mathcal{P}_\lambda} \{ -0.5(\phi^2(x) - 1) \} \right\}$$

puisque l'autre inclusion est toujours vraie.

(2) La propriété (a) du théorème affirme que l'ensemble des solutions de (P) est égal à \mathcal{P}_{λ^*} .

Nous allons montrer que les deux hypothèses (i) et (ii) du théorème (4.1) sont vérifiées pour les problèmes de type (P). Pour cela, on fait appel au théorème de Valadier pour obtenir une expression simple du sous-différentiel d'une enveloppe supérieure d'une famille de fonctionnelles convexes.

4.3. LEMME

Pour tout $c > 0$, pour tout $\lambda \geq c$ et pour tout x tel que $\phi(x) \geq 2b/c$ on a $L(x, \lambda) \geq -\lambda/2$.

Par conséquent,

$$g(\lambda) = \inf_{\phi(x) \leq \frac{2b}{c}} \left\{ \frac{\lambda}{2}(\phi^2(x) - 1) - f(x) \right\} \quad (*)$$

En effet, on a d'après la proposition 3.3 et la non négativité de f :

$$g(\lambda) \leq -\lambda/2 \quad \forall \lambda > 0$$

Par suite,

$$\begin{aligned} g(\lambda) &= \text{Inf}\{-f(x) + 0.5 \lambda (\phi^2(x) - 1) : x \in X\} \\ &= \text{Inf}\{-f(x) + 0.5 \lambda (\phi^2(x) - 1) : 0.5\lambda \phi^2(x) - f(x) \leq 0, x \in X\} \end{aligned}$$

Par hypothèse $f(x) \leq b\phi(x) \quad \forall x \in X$. Ce qui implique que

$$\{x : 0.5\lambda \phi^2(x) - f(x) \leq 0\} \subset \{x : 0.5\lambda \phi^2(x) - b\phi(x) \leq 0\}$$

Soit maintenant $c > 0$, alors pour tout $\forall \lambda \geq c$, on a

$$\{x : 0.5\lambda \phi^2(x) - b\phi(x) \leq 0\} \subset \{x : \phi(x) \leq 2b/c\}. \text{ D'où le lemme 4.3. } \blacktriangleleft$$

Ce lemme permet de valider l'emploi du théorème de Valadier pour le calcul du sous différentiel de g sur son domaine effectif.

On est en mesure maintenant d'énoncer le théorème fondamental suivant concernant la stabilité de la dualité lagrangienne dans le problème (P).

4.4. THEOREME

- 1) \mathcal{D} et \mathcal{D}_λ sont non vides et \mathcal{D} est non vide.
- 2) $g(\lambda) = -0.5 \lambda + K/\lambda$ avec K une constante négative dépendant de ϕ et f .

3) L'ensemble des solutions du problème (D) est réduit à un point, i.e.,

$$\mathcal{D} = \{(-2K)^{1/2}\} = \{\lambda^*\}.$$

$$4) \wp = \wp_{\lambda^*}$$

La démonstration de ce théorème, qui est d'ailleurs immédiate puisqu'elle repose sur le théorème 4.1, est donnée, en partie, dans le paragraphe suivant en même temps que la description de l'algorithme primal-dual pour la résolution de (P).

5. ALGORITHME DE RESOLUTION DE (P)

Soit x une solution de (P_λ) alors

$$\partial f(x) \subset \partial(0.5 \lambda \phi^2(x)) = \lambda \phi(x) \partial \phi(x)$$

ce qui entraîne d'après (3.2) que

$$f(x) = \lambda \phi^2(x) \text{ donc } \wp_\lambda \subset \{ x : g(\lambda) = -0.5 \lambda (\phi^2(x) + 1) \}.$$

L'application des théorèmes (4.1,4.4) et du lemme (4.3) donne

$$i) \partial \tilde{g}(\lambda) = \overline{\text{co}} \left\{ \bigcup_{x \in \wp_\lambda} \{ 0.5(\phi^2(x) - 1) \} \right\}$$

Or, pour tout x dans \wp_λ , $0.5 (\phi^2(x) - 1) = -1 - g(\lambda)/\lambda$.

et par conséquent $(\phi^2(x) - 1)$ est indépendante de x sur \wp_λ . D'où,

$$\nabla g(\lambda) = g'(\lambda) = 0.5(\phi^2(x) - 1) = -1 - \frac{g(\lambda)}{\lambda}$$

En résolvant l'équation différentielle,

$$g'(\lambda) = -1 - g(\lambda)/\lambda$$

on obtient $g(\lambda) = -0.5 \lambda + K/\lambda$ avec K une constante négative. Ce qui est remarquable à souligner c'est que nous avons obtenu, non seulement l'ensemble des solutions de (D) mais

aussi la formule explicite de $g(\lambda)$. Nous utiliserons cette formule pour élaborer l'algorithme ci-après destiné à la résolution des problèmes primal et dual. Nous constatons donc que le " coût " de la résolution des problèmes primal et dual est celui de la résolution de deux problèmes d.c de la forme (P_λ) . Dans nos implémentations (cf. Chapitre V), on a employé deux méthodes pour résoudre (P_λ) :

La région de confiance lorsque les dérivées sont disponibles ou bien la méthode de sous-gradients puisque le problème (P_λ) est un d.c.

Si λ^* est une solution du problème dual alors $g'(\lambda^*) = 0$.

Il est facile d'en déduire les formules suivantes :

$$K = -0.5 (\lambda^*)^2 \quad (5.1)$$

d'où le problème dual admet une et une seule solution (ce qui est pensable car g est strictement concave sur son domaine effectif).

Et en plus,

$$g(\lambda^*) = -\lambda^* \text{ et } \phi^2(x) = 1 \text{ et } f(x) = \lambda^* \forall x \in \mathcal{S}_{\lambda^*}.$$

De nouveau on constate que si λ^* est une solution du problème dual alors $x \in \mathcal{S}_{\lambda^*}$ est solution du problème primal.

Nous développons maintenant le nouvel algorithme pour la résolution de (P) et (D).

5.1. ALGORITHME

L'idée consiste à résoudre le problème intermédiaire (P_λ) pour un λ donné ce qui permet de calculer la constante K :

$$K = -\lambda(g(\lambda) + 0.5 \lambda) \quad (5.2)$$

Or, $K = -0.5 (\lambda^*)^2$, on résout une deuxième fois le problème (P_{λ^*}) pour obtenir une solution de (P) et la solution de (D).

D'où le schéma algorithmique :

ALGORITHME

Soient $(f \in \Gamma_0(X))$ posit. homogène et non négative, $\phi(x)$ une norme) ou $(f, \phi$ semi-normes).

Etape 0. Choisir λ positif mais arbitraire.

Etape 1. Résoudre $\text{Min} \{ 0.5 \lambda (\phi^2(x) - 1) - f(x) : x \in X \}$

Etape 2. Calculer K à partir de (4.2) et λ^* à partir de (4.1).

Etape 3. Calculer x^* solution de $\text{Min}\{0.5 \lambda^* (\phi^2(x) - 1) - f(x) : x \in X \}$.

Résultats : x^* solution de (P) et λ^* solution de (D).

Fin de l'algorithme.

6. CAS DE SEMI-NORMES

Considérons le problème (P) mais avec f et ϕ deux semi-normes sur $X = \mathbb{R}^n$ telles que $\mathfrak{N}(\phi) \subset \mathfrak{N}(f)$. Nous allons montrer que les résultats précédents restent valables pour cette classe de problèmes.

Soient $\mathbf{A} = \mathfrak{N}(\phi)$ et $\mathbf{B} = \mathbf{A}^\perp$ alors on peut décomposer l'espace X sous la forme

$X = \mathbf{A} \oplus \mathbf{B}$ et on peut donc énoncer les propriétés suivantes :

$$\phi(x + a) = \phi(x) \quad \forall a \in \mathbf{A} \quad \text{et} \quad f(x + a) = f(x) \quad \forall a \in \mathbf{A}$$

et par conséquent, on peut écrire le problème (P) sous les formes :

$$\sup \{ f(x) / \phi(x) : x \in \mathbf{A} \} \quad (\text{P}')$$

$$\sup \{ f(x) / \phi(x) : x \in \mathbf{B} \text{ et } x \neq 0 \} \quad (\text{P}'')$$

Soient \mathfrak{P}' (resp. \mathfrak{P}'') l'ensemble des solutions de (P') (resp. (P'')).

Ce dernier problème est équivalent à

$$\sup \{ f(x) : x \in \mathbf{B}, \phi(x) \leq 1 \} \quad (\text{Q})$$

Puisque f et ϕ sont des normes sur \mathbf{B} , le problème (Q) admet toujours une solution.

Notons par \mathcal{Q} l'ensemble des solutions de (Q). Par ailleurs, $\forall u \in \mathcal{P}'$ on a

$$\frac{f(x+u)}{\phi(x+u)} = \frac{f(x)}{\phi(x)}$$

et donc $\mathcal{P}' = \mathcal{Q} + \mathbf{A}$.

D'autre part,

$$g(\lambda) = \inf_{x \in X} \{-f(x) + 0.5\lambda \phi^2(x)\} - 0.5\lambda \quad (\text{P}_\lambda)$$

D'après ce qui précède, le problème (P_λ) se ramène à :

$$g(\lambda) = \inf_{x \in \mathbb{B}} \{-f(x) + 0.5\lambda \phi^2(x)\} - 0.5\lambda \quad (\text{P}_\lambda)$$

Comme $g(\lambda) \leq -0.5\lambda$, on peut encore se restreindre à l'ensemble

$$E = \{x \in \mathbb{B} : -f(x) + 0.5\lambda \phi^2(x) \leq 0\}$$

c'est à dire, le dernier problème est équivalent à :

$$g(\lambda) = \inf_{x \in E} \{-f(x) + 0.5\lambda \phi^2(x)\} - 0.5\lambda \quad (\text{P}_\lambda)$$

A l'aide de l'hypothèse (H) on peut l'écrire encore sous la forme :

$$g(\lambda) = \inf_{x \in E_1} \{-f(x) + 0.5\lambda \phi^2(x)\} - 0.5\lambda \quad (\text{P}_\lambda)$$

où $E_1 = \{x \in \mathbb{B} : \lambda \phi^2(x) \leq 2b \phi(x)\} = \{x \in \mathbb{B} : \lambda \phi(x) \leq 2b/\lambda, \lambda > 0\}$

Puisque $\phi(x)$ est une norme sur \mathbb{B} , E_1 est borné.

D'où, on peut appliquer tous les résultats de stabilité précédents.

7. APPLICATIONS

7.1. PROBLEME MDS (Analyse multidimensionnelle de données de dissimilarité)

Voir la partie 2 du chapitre V.

7.2. RECHERCHE DES VALEURS SINGULIERES

Soit le problème :

$$\text{Max } \{ \|Ax\| : \|x\| \leq 1 \} \quad (*)$$

où A est une matrice quelconque et $\| \cdot \|$ est la norme Euclidienne. Voir des exemples dans le chapitre IV car on utilise dans ces deux applications l'algorithme sous-gradient (régularisé éventuellement) pour résoudre les problèmes des étapes 1 et 3 de l'algorithme 1 ci-dessus. On trouvera dans le chapitre suivant d'autres applications qui font appel à cet algorithme.

PARTIE 2

**STABILITE VIA PERTURBATIONS DE LA DUALITE
LAGRANGIENNE D'UNE CLASSE DE PROBLEMES
NON CONVEXES**

1. INTRODUCTION

On utilise dans cette partie les techniques modernes de perturbations en dualité pour traiter la dualité de certains problèmes non convexes. La démonstration de la stabilité d'une classe de problèmes, qui est plus large que celle traitée dans la première partie, repose sur les travaux de Joly [Au76] dans le cas non convexe.

2. PRELIMINAIRES

Nous suivons dans ce paragraphe le livre de A.Auslender [Au76]. Le lecteur trouvera l'ensemble des définitions et des notions utiles dans le chapitre 0 de cette thèse.

Considérons le problème général suivant

$$\alpha = \text{Inf} \{ f(x) : x \in X \} \quad (\text{P})$$

où f est une fonction définie sur X à valeurs dans $\overline{\mathbf{R}}$

2.1. LA DUALITE, LIEE A UNE FAMILLE DE PERTURBATIONS. (EN OPTIMISATION NON FORCEMENT CONVEXE)

Soient U et V deux espaces duaux par rapport à la forme bilinéaire usuelle ($U = V$ sera identifié à l'espace vectoriel \mathbf{R}^m pour un certain m). U sera appelé l'espace des perturbations pour le problème (P)

On perturbe le problème (P) de la façon suivante,

Etant donné, $\varphi(x,u) : X \times U \rightarrow \overline{\mathbf{R}}$ telle que

$$f(x) = \varphi(x,0) \quad \forall x \in X$$

on définit, à l'aide de φ , le problème perturbé (P_u),

$$h(u) = \text{Inf} \{ \varphi(x,u) : x \in X \} \quad (P_u)$$

Du fait que $h^{**} \leq h$ alors on a,

$$-\alpha \leq -h^{**}(0) = \text{Inf} \{ h^*(v) : v \in V \} = \beta$$

Le problème dual de (P), par rapport à la perturbation φ , est défini par :

$$\beta = \text{Inf} \{ g(v) : v \in V \} \quad (\text{D})$$

où $g = h^* \in \Gamma(U)$.

Soit Ψ la fonction conjuguée de ϕ alors on a la relation :

$$\beta = \text{Inf} \{ g(v) : v \in V \} \quad (\text{D})$$

et $g(v) = h^*(v) = \Psi(0, v)$

2.2. LE LAGRANGIEN LIÉ À UNE FAMILLE DE PERTURBATIONS.

On appelle lagrangien de (P), lié à ϕ , la fonction $l(x, v)$ définie sur $X \times V$ à valeurs dans $\overline{\mathbb{R}}$ par

$$l(x, v) = \sup \{ (u, v) - \phi(x, u) : u \in U \}$$

$l(x, v)$ est convexe en v (car c'est la conjuguée de l'application $\phi_x : u \rightarrow \phi(x, u)$).

Dès lors, on a $g(v) = \sup \{ l(x, v) : x \in X \}$

Et le problème dual s'écrit :

$$\beta = \text{Inf} \{ \text{Sup} \{ l(x, v) : x \in X \} : v \in V \}$$

2.3. DEFINITIONS

- 1) Le problème (P) est dit stable si le h est fini et continue en $0 \in U$.
- 2) Le problème (P) est dit inf-stable si h est fini et s.c.i en $0 \in U$.
- 3) Le problème (P) est dit inf-dif stable si $h(0)$ est fini et $\partial h(0) \neq \emptyset$.
- 4) On dit que le couple (x^*, v^*) est un point selle (col) du lagrangien $l(.,.)$ associé à (P) à l'aide de la perturbation ϕ , si

$$l(x, v^*) \leq l(x^*, v^*) \leq l(x^*, v) \quad \forall x \in X, \forall v \in V$$

On remarquera que si h est convexe, la stabilité implique l'inf-stabilité et l'inf-dif stabilité.

La proposition suivante résume les résultats de stabilité concernant le cas non forcément convexe. Ces résultats sont valables sous les deux hypothèses (H1) et (H2) suivantes :

$$\text{L'application } \varphi_X : u \rightarrow \varphi(x,u) \in \Gamma(U) \quad (\text{H1})$$

$$h \text{ est convexe sur } X \quad (\text{H2})$$

2.4. PROPOSITION [Au76]

Sous les hypothèses (H1) et (H2) on a,

1) les deux propriétés suivantes sont équivalentes :

- i) Le problème (P) est inf-stable.
- ii) $-\beta = \alpha =$ nombre fini.

2) On a l'équivalence entre les deux propriétés suivantes

- a) (P) est inf-dif stable.
- b) (P) est inf-stable et l'ensemble des solutions de (D) est non vide.

2.5. REMARQUE

On a dans le cas convexe une caractérisation simple de la stabilité de (P) [La72,Au76].

3. STABILITE D'UN PROBLEME NON CONVEXE

Nous allons montrer, à l'aide des perturbations verticales, que le problème non convexe suivant est stable.

$$\bar{\alpha} = \text{Sup} \{ f(x) : \gamma(x) \leq 1 \} \quad (\text{P})$$

où f, γ finies partout et positivement homogènes d'ordre resp. q et p ($q, p \geq 1$) et γ non négative.

On se ramène au cas précédent si on note $C = \{ x : \gamma(x) \leq 1 \}$,

$$\alpha = \text{Inf} \{ -f(x) + \lambda_C(x) : x \in X \} \quad (\text{P})$$

$$\alpha = \text{Inf} \{ -f(x) : \gamma(x) \leq 1 \} \quad (\text{P})$$

On définit les perturbations verticales par

$$\varphi(x,u) = \begin{cases} -f(x) & \text{si } \gamma(x) \leq 1-u \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases}$$

D'où,

$$h(u) = \begin{cases} \text{Inf}\{-f(x)\} & \text{si } u \leq 1 \text{ et } u \leq 1-\gamma(x) \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases} \quad (2)$$

et

$$l(x,v) = \sup \{ (u,v) - \varphi(x,u) : u \in U \}$$

$$l(x,v) = \begin{cases} f(x) + v(1-\gamma(x)) & \text{si } v \leq 0 \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases}$$

Puisque $h(u) = +\infty$ pour tout $u > 1$, on va se restreindre au cas de $u \leq 1$. En effectuant le changement approprié on montre que (f et γ étant positivement homogènes d'ordre p et q respectivement)

$$\begin{aligned} h(u) &= \inf \{ -f(x) : \gamma(x) \leq 1-u \} = \inf \{ -f[(1-u)^{1/p} y] : \gamma(y) \leq 1 \} \\ &= \alpha(1-u)^{q/p} \quad \forall u \leq 1 \quad (3) \end{aligned}$$

3.1. PROPRIETES

- i) h est deux fois différentiable sur $\{u \in \mathbf{R} : u < 1\}$.
- ii) h est convexe si et seulement si $q-p \leq 0$.

La démonstration est facile.

Avant d'établir la proposition de stabilité, on souligne que pour cette famille de perturbations on a la caractérisation : $\varphi_x \in \Gamma_0(U)$ si et seulement si $f(x)$ est fini.

3.2. PROPOSITION DE STABILITE

Si $\mathfrak{N}(\gamma) = \{0\}$ alors le problème (P) est stable.

En effet, $\alpha = h(0)$ est fini (cf. remarques 3.3). Notons que $\alpha \leq 0$ (puisque $f(0)$ est nul car f est finie partout par hypothèse).

Et d'après la propriété (3.1), on vérifie facilement les deux hypothèses (H1) et (H2).

On remarquera que la condition $q-p \leq 0$ peut être toujours réalisée quitte à reformuler la fonction contrainte $\gamma(x)$ puisqu'elle est supposée non négative.

3.3. REMARQUES

1) Si $f \in \Gamma(X)$ est positivement homogène d'ordre $p > 1$ alors elle est non négative [voir Ro70, page 135]

2) Si $f \in \Gamma_0(X)$, positivement homogène et bornée sur un voisinage de l'origine alors elle est partout finie et donc continue.

3) Si f est positivement homogène, non négative, finie partout et

$\mathfrak{N}(f) = \{0\}$ alors l'ensemble $\{x : f(x) \leq e\}$ est fermé et borné pour tout $e \geq 0$.

4. STABILITE ET ALGORITHMES PRIMAL-DUAL

Supposons pour tout le reste du chapitre que

γ est une norme ²⁴

et $f \in \Gamma_0(X)$ est positivement homogène (d'ordre 1) et finie partout.

Une conséquence de ces hypothèses est que α est fini et négative.

Nous allons montrer dans cette section que l'on peut récupérer, comme dans le cas convexe, une solution du problème (P) à partir d'une solution v^* du problème dual vérifiant $v^*(\gamma(x) - 1) = 0$.

Soit la perturbation verticale $\varphi(x,u)$ définie par :

$$h(u) = \begin{cases} \text{Inf}\{-f(x)\} & \text{si } u \leq 1 - \gamma(x) \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases}$$

De manière analogue, on obtient,

²⁴ La généralisation de ce cas a été établie dans Pham Dinh & Chine [P-C 91].

$$h(u) = (1-u)\alpha \text{ si } u \leq 1 \text{ et } h(u) = +\infty \text{ sinon.}$$

Et $h \in \Gamma_0(X)$ si et seulement si α est fini.

Comme $g(v) = h^*(v)$ alors on a,

$$g(v) = v \text{ si } v + \alpha \geq 0 \text{ et } g(v) = +\infty \text{ sinon.}$$

Pour la suite, on se restreint au cas de $v \geq 0$. Pour pouvoir récupérer une solution de (P) on introduit le problème intermédiaire (P_v) défini comme suit :

$$g(v) = \text{Sup} \{ l(x,v) : x \in X \} \quad (P_v)$$

Il est clair que $g(v) = v + F(v)$ où $F(v)$ est,

$$F(v) = \text{sup} \{ f(x) - v \gamma(x) \} \quad (P_v)$$

Un calcul simple donne,

$$F(v) = 0 \text{ si } v + \alpha \geq 0 \text{ et } F(v) = 0 \text{ sinon.}$$

Par conséquent on peut citer les propriétés :

1) $F(v) = +\infty$ si et seulement s'il existe un $\tilde{x} \in X$ tel que $f(\tilde{x}) - v \gamma(\tilde{x}) > 0$.

En effet, si un tel \tilde{x} existe alors, par homothétie, on voit que $F(v) = +\infty$. La réciproque est immédiate. Ce dernier résultat peut être raffiné ainsi :

2) $\forall v \geq 0$, $F(v) = +\infty$ si et seulement si $v + \alpha < 0$.

En effet, si $v + \alpha$ est positif alors $-v \leq \alpha \leq -f(x/\gamma(x)) \forall x \neq 0$ ce qui entraîne que $f(x) - v \gamma(x) \leq 0$ et la conclusion découle donc de la propriété précédente.

On constate que l'on a obtenu, sans aller le chercher, l'algorithme de Dinkelback [Sc81] pour la minimisation fractionnelle.

De l'expression de $g(v)$ on tire que l'ensemble de solutions de (D), $\mathfrak{D} = \{ -\alpha \}$ et que $\beta = g(-\alpha) = -\alpha$.

De plus, $\forall v \geq -\alpha$, on a l'ensemble des solutions de (P),

$$\mathfrak{P} = \{ x \in \mathfrak{P}_{v^*} : \gamma(x) = 1 \}.$$

Enfin, $x^* \in \mathfrak{P}_{v^*}$ entraîne que $x^* \in \mathfrak{P}$ et que $\forall \lambda > 0$, λx^* est solution de (P).

CHAPITRE IV

**OPTIMISATION D.C
(DIFFERENCE DE DEUX FONCTIONS CONVEXES)
ALGORITHMES DE SOUS GRADIENTS**

Ce chapitre est principalement consacré à l'étude des algorithmes de sous gradients en optimisation d.c et aux techniques de régularisation afin de définir les suites construites par ces algorithmes et d'accélérer leur convergence. Nous n'entrons pas dans les détails de la dualité en optimisation d.c et de l'étude des fonctions d.c, renvoyant les lecteurs aux travaux de Toland [To79], Ellaia [El84], Hiriart-Urruty [HU85,90], Pham Dinh[Ph87-91], Plazanet [91]. Par souci de ne pas alourdir ce chapitre, les démonstrations des résultats qui y sont présentés seront omises. On pourra trouver la plupart de ces résultats dans [P-E 88].

1. DUALITE EN OPTIMISATION D.C. CARACTERISATION DES SOLUTIONS LOCALES ET GLOBALES

Soient $g, h \in \Gamma_0(X)$ et considérons le problème suivant :

$$\alpha = \text{Inf} \{ g(x) - h(x) : x \in X \} \quad (P)$$

on désigne par \mathcal{P} l'ensemble des solutions de (P).

Puisque g et h peuvent prendre la valeur $+\infty$ en même temps, il faut lever l'indétermination $(+\infty)-(+\infty)$. Pour cela, on peut adopter la règle $(+\infty)-(+\infty)=+\infty$.

En fait, lorsque α est fini, seules les valeurs de $g-h$ dans $\text{dom } g \cap \text{dom } h$ nous intéressent dans la recherche des solutions optimales locales et globales (cf. définitions 1.2). Même remarque pour le problème dual (D) défini ci-dessous.

La dualité d.c. peut être tout simplement définie à l'aide des fonctions conjuguées par (ce résultat est du à Toland 1979)

$$\alpha = \text{Inf} \{ h^*(y) - g^*(y) : y \in Y \} \quad (D)$$

En effet,

$$\begin{aligned} \alpha &= \inf \{ g(x) - \sup \{ \langle x, y \rangle - h^*(y) : y \in Y \} : x \in X \} \\ &= \inf \{ g(x) + \inf \{ h^*(y) - \langle x, y \rangle : y \in Y \} : x \in X \} \\ &= \inf_x \inf_y \{ h^*(y) + g(x) - \langle x, y \rangle \} \\ &= \inf_y \{ h^*(y) + \inf_x \{ g(x) - \langle x, y \rangle \} \}. \end{aligned}$$

Le problème (D) est le dual de (P) et on désigne l'ensemble de ses solutions par \mathcal{Q} .

1.1. THEOREME [P-E88, HU90]

Soient $g, h \in \Gamma_0(X)$ alors on a les propriétés suivantes :

- (i) $\partial h(x) \subset \partial g(x) \quad \forall x \in \mathcal{P}$.
- (ii) $\partial g^*(y) \subset \partial h^*(y) \quad \forall y \in \mathcal{Q}$.
- (iii) $x \in \mathcal{P}$ si et seulement si $\partial_\varepsilon h(x) \subset \partial_\varepsilon g(x) \quad \forall \varepsilon > 0$
- (iv) $\bigcup_{y \in \mathcal{Q}} \partial g^*(y) \subset \mathcal{P}$ et l'égalité a lieu si h est sous-différentiable sur \mathcal{P} .
- (v) $\bigcup_{x \in \mathcal{P}} \partial h(x) \subset \mathcal{Q}$ et l'égalité a lieu si g^* est sous-différentiable sur \mathcal{Q} . ☞

La propriété (iii), du à J.B.Hiriart-Urruty [HU90], est une traduction géométrique de l'égalité des montants des problèmes primal et dual. Elle marque bien le passage de l'optimisation convexe à l'optimisation non convexe ainsi que toute la complexité de cette dernière.

1.2. DEFINITIONS

Un point x_0 de X est un minimum local de $g-h$ si $g(x_0)$ et $h(x_0)$ sont finis et si $g(x)-h(x) \geq g(x_0)-h(x_0)$ pour tout x dans un voisinage U de x_0 . Par conséquent, $(\text{dom } g) \cap U \subset \text{dom } h$.

On démontre que [Hiriart-Urruty 89] :

Si x est un minimum local de $g-h$ alors $\partial h(x) \subset \partial g(x)$.

Nous pensons que cette condition nécessaire n'est pas loin d'être suffisante et qu'elle l'est pour un certain nombre de problèmes d.c. non différentiables [Ph81,84], en particulier pour h polyédral [HU89].

Cependant sur le plan algorithmique, il est important de connaître précisément des conditions nécessaires et suffisantes ou seulement des conditions suffisantes d'optimalité locale pour $g-h$ (cf. théorème 2.4).

Les algorithmes de sous gradients présentés dans le paragraphe 2 permettent d'obtenir des points x^* qui sont des limites des suites $\{x^k\}$ telles que $\{g(x^k)-h(x^k)\}$ soit décroissante et qui vérifient les inclusions sous-différentielles $\partial h(x^*) \subset \partial g(x^*)$.

Il est fort probable que de tels points x^* soient des minimums locaux de $g-h$.

On dit que x est un point critique de $g-h$ si $\partial g(x) \cap \partial h(x) \neq \emptyset$.

C'est une forme affaiblie de l'inclusion sous-différentielle.

Soit \mathcal{P}_1 (respectivement \mathcal{Q}_1) l'ensemble des éléments vérifiant les conditions nécessaires d'optimalité locale pour (P) (resp. pour (D)), i.e,

$$\mathcal{P}_1 = \{x \in X : \partial h(x) \subset \partial g(x)\}$$

(respectivement $\mathcal{Q}_1 = \{y \in Y : \partial g^*(y) \subset \partial h^*(y)\}$).

Pour chaque x^* dans X , on définit le problème,

$$\inf \{h^*(y) - g^*(y) : y \in \partial h(x^*)\} \quad S(x^*)$$

Et l'ensemble des solutions de $S(x^*)$ sera noté par $\mathcal{L}(x^*)$.

De façon symétrique on considère le problème,

$$\inf \{g(x) - h(x) : x \in \partial g^*(y^*)\} \quad T(y^*)$$

Et l'ensemble des solutions de $T(y^*)$ sera noté par $\mathcal{T}(x^*)$.

1.3 THEOREME [P-E88]

$x^* \in \mathcal{P}_1$ si et seulement s'il existe $y^* \in \mathcal{L}(x^*)$ tel que $x^* \in \partial g^*(y^*)$.
 $y^* \in \mathcal{Q}_1$ si et seulement s'il existe $x^* \in \mathcal{T}(x^*)$ tel que $y^* \in \partial h(x^*)$.

1.4. COROLLAIRE [P-E88]

Si $x^* \in \mathcal{P}_1$ (resp. $y^* \in \mathcal{Q}_1$) alors on a :

- (i) $\mathcal{L}(x^*) = \partial h(x^*)$ (resp. $\mathcal{T}(x^*) = \partial g^*(y^*)$)
- (ii) $h^*(y) - g^*(y) = g(x^*) - h(x^*)$, $\forall y \in \partial h(x^*)$
 (resp. $g(x) - h(x) = h^*(y^*) - g^*(y^*)$, $\forall x \in \partial g^*(y^*)$). \clubsuit

1.5. REMARQUES

- (i) $x^* \in \mathcal{P}_1$ si et seulement si $\langle x^*, y \rangle - g^*(y) = g(x^*)$, $\forall y \in \partial h(x^*)$.
- (ii) $y^* \in \mathcal{Q}_1$ si et seulement si $\langle x, y^* \rangle - h(x) = h^*(y^*)$, $\forall x \in \partial g^*(y^*)$.

(iii) Nous allons voir que les problèmes $(S(x^*))$ et $(T(y^*))$ jouent un rôle important dans l'élaboration et la description des méthodes de sous gradients pour la résolution de (P) .

2. ALGORITHMES DE SOUS-GRADIENT

2.1. Forme complète

Cette construction est évidemment inspirée par les théorèmes 1.1 et 1.3. En général, de telles suites ne sont pas nécessairement définies, le problème de leur existence sera abordé dans le paragraphe 3.

On construit dans l'algorithme de sous gradients deux suites $\{x^k\}$ et $\{y^k\}$ de la manière suivante ($x^0 \in X$ étant le point de départ) :

$$\begin{array}{ll} x^0 & \rightarrow y^0 \in \mathcal{A}(x^0) \\ x^1 \in \mathcal{J}(y^0) & \rightarrow y^1 \in \mathcal{A}(x^1) \\ \vdots & \vdots \\ x^{k+1} \in \mathcal{J}(y^k) & \rightarrow y^{k+1} \in \mathcal{A}(x^{k+1}). \end{array}$$

2.2. THEOREME [P-E88]

Supposons que les suites $\{x^k\}$ et $\{y^k\}$ sont bien définies.

Alors on a les propriétés suivantes :

$$(i) \quad g(x^{k+1}) - h(x^{k+1}) \leq g(x^{k+1}) - h(x^{k+1}) \leq g(x^k) - h(x^k).$$

En plus, $g(x^{k+1}) - h(x^{k+1}) = g(x^k) - h(x^k)$ si et seulement si $x^k \in \partial g^*(y^k)$ et $y^k \in \partial h(x^k)$, dans ce cas on a, $x^k \in \mathcal{P}_1$ et $y^k \in \mathcal{Q}_1$.

(ii) Si α est fini alors on a :

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \{g(x^k) - h(x^k)\} = \lim_{k \rightarrow +\infty} \{h^*(y^k) - g^*(y^k)\} = \tilde{\alpha} \geq \alpha.$$

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \{g(x^k) + g^*(y^k) - \langle x^k, y^k \rangle\} = 0.$$

(iii) Si α est fini et les suites $\{x^k\}$ et $\{y^k\}$ sont bornées, alors $\forall x^* \in \Omega(x^k)$ (respectivement $\forall y^* \in \Omega(y^k)$) il existe un $y^* \in \Omega(y^k)$ (respect. $x^* \in \Omega(x^k)$) :

$$x^* \in \mathcal{P}_1 \text{ et } g(x^*) - h(x^*) = \tilde{\alpha} \geq \alpha.$$

$$y^* \in \mathcal{Q}_1 \text{ et } h^*(y^*) - g^*(y^*) = \tilde{\alpha} \geq \alpha.$$

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \{g(x^k) + g^*(y^k)\} = g(x^*) + g^*(y^*) = \langle x^*, y^* \rangle.$$

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \{h(x^k) + h^*(y^k)\} = h(x^*) + h^*(y^*) = \langle x^*, y^* \rangle.$$

où $\Omega(z^k)$ est l'ensemble des valeurs d'adhérence de $\{z^k\}$. 🍏

On verra dans le paragraphe 3 certaines conditions sous lesquelles les suites $\{x^k\}$ et $\{y^k\}$ sont bornées.

La forme simplifiée suivante des algorithmes de sous gradients est couramment utilisée en pratique.

2.3. Forme simple

$$\begin{array}{lll} x^0 \text{ (choisi arbitraire)} & \rightarrow & y^0 \in \partial h(x^0) \\ x^1 \in \partial g^*(y^0) & \rightarrow & y^1 \in \partial h(x^1) \\ \dots & & \\ \dots & & \\ x^{k+1} \in \partial g^*(y^k), \text{ i.e. } y^k \in \partial g(x^{k+1}) & \rightarrow & y^{k+1} \in \partial h(x^{k+1}). \end{array} \quad \text{🍏}$$

Dans ce cas toutes les propriétés du théorème 2.2 sont valables sauf celle-ci :
On n'est plus assuré d'obtenir $\partial h(x^*) \subset \partial g(x^*)$ et $\partial g^*(y^*) \subset \partial h^*(y^*)$ mais seulement $\partial g(x^*) \cap \partial h(x^*)$ et $\partial g^*(y^*) \cap \partial h^*(y^*)$ non vides.

On dit qu'une fonction f convexe sur X est essentiellement différentiable si elle satisfait les trois conditions suivantes pour $U = \text{int}(\text{dom } f)$:

- (i) U est non vide.
- (ii) f est différentiable sur U .

(iii) $\|\nabla f(x^k)\| \rightarrow +\infty$ lorsque $k \rightarrow +\infty$ pour toute $\{x^k\}$ contenue dans U et convergente vers un point x de la frontière de U .

Terminons ce paragraphe par le résultat utile suivant dû à Toland [To79].

2.4 THEOREME [To79]

1) Supposons que g et h sont essentiellement différentiables.

Soit x^* de X tel que $\partial g(x^*) \cap \partial h(x^*) \neq \emptyset$ (i.e., x^* un point critique de $g-h$).

Si $\langle \nabla g(x), x-x^* \rangle \geq \langle \nabla h(x), x-x^* \rangle \forall x$ dans un voisinage U de x^* alors $g(x)-h(x) \geq g(x^*)-h(x^*) \forall x \in U$ et x^* est un minimum local de $g-h$.

2) Soit $x^* \in X$ un point critique de $g-h$. Supposons que x^* est un minimum local de $g-h$. Si g^* est essentiellement différentiable alors tout point $y^* \in \partial g(x^*) \cap \partial h(x^*)$ (qui en fait égal à $\partial h(x^*)$) est un minimum local de h^*-g^* .

3. EXISTENCE ET PROPRIETES DES SUITES $\{x^k\}$ et $\{y^k\}$ CONDITIONS POUR BORNER CES SUITES.

3.1. EXISTENCE DES SUITES $\{x^k\}$ et $\{y^k\}$.

1) Par construction si $x^0 \in \text{dom } \partial h$ alors $y^0 \in \partial h(x^0)$ est bien défini.

Pour $k \geq 1$, y^k est défini si et seulement si x^k est défini et contenu dans $\text{dom } \partial h$.

Par suite, x^k et y^k sont bien définis si et seulement si $\partial g^*(y^{k-1}) \cap \text{dom}(\partial h)$ est non vide (ce qui entraîne que $y^{k-1} \in \text{dom}(\partial g^*)$).

2) Si $\text{dom } \partial h = X$ (i.e., h est finie partout dans X) alors les suites $\{x^k\}$ et $\{y^k\}$ sont définies si et seulement si $\{y^k\} \subset \text{dom}(\partial g^*)$.

Si $\text{dom } \partial h = X$ et $\text{dom } g^* = Y$ (i.e., f et g^* sont partout finies dans X et Y respectivement) alors les suites $\{x^k\}$ et $\{y^k\}$ sont bien définies.

3) Si les suites $\{x^k\}$ et $\{y^k\}$ sont bien définies alors on a

$$\{x^k\} \subset \text{dom}(\partial g) \cap \text{dom}(\partial h)$$

$$\{y^k\} \subset \text{dom}(\partial g^*) \cap \text{dom}(\partial h^*)$$

4) Si h est finie partout dans X alors les techniques de régularisations présentées dans la suite permettent de "bien définir" les suites $\{x^k\}$ et $\{y^k\}$.

5) Si les suites $\{x^k\}$ et $\{y^k\}$ sont bien définies et si la fonction $g-h$ est coercive (i.e., $g(x)-h(x) \rightarrow +\infty$ si $\|x\| \rightarrow +\infty$) alors la suite $\{x^k\}$ est bornée.

Dans ces conditions, si en plus, $\{y^k\} \subset \text{int}(\text{dom } h)$ alors la suite $\{y^k\}$ est aussi bornée [Ro70].

Nous terminons ce paragraphe par un théorème qui contient les résultats récents les plus complets [Ph90,91] sur les suites $\{x^k\}$ et $\{y^k\}$.

Ce théorème, valable pour les deux formes des algorithmes de sous gradients, renforce considérablement le théorème 2.2. On y voit le rôle important, dans l'accélération de la convergence de ces suites, de la forte convexité des fonctions g et h et de leurs conjuguées. D'où les raisons mêmes de l'étude des techniques de régularisation en optimisation d.c. présentée dans le paragraphe 5.

Pour alléger la présentation des résultats, le coefficient de coercivité (ou de forte convexité) $\rho(f,C)$ (ou $\rho(f)$ lorsque $C = \text{dom}(\partial f)$) est défini pour toute fonction $f \in \Gamma_0(X)$. Bien évidemment $\rho(f,C)$ est nul si f n'est pas fortement convexe sur C . On notera pour la suite par $dx^k = x^{k+1} - x^k$.

3.2. THEOREME

Supposons que les suites $\{x^k\}$ et $\{y^k\}$ soient bien définies. Alors on a les propriétés suivantes :

$$\begin{aligned} 1) (g-h)(x^{k+1}) &\leq (h^*-g^*)(y^k) - 0.5\rho(h) \|dx^k\|^2 \\ &\leq (g-h)(x^k) - 0.5[\rho(h)+\rho(g)] \|dx^k\|^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 2) (h^*-g^*)(y^{k+1}) &\leq (g-h)(x^{k+1}) - 0.5\rho(g^*) \|dy^k\|^2 \leq \\ &\leq (h^*-g^*)(y^k) - 0.5(\rho(h^*)+\rho(g^*)) \|dy^k\|^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 3) (g-h)(x^{k+1}) &\leq (h^*-g^*)(y^k) - 0.5\rho(h) \|dx^k\|^2 \leq \\ &\leq (g-h)(x^k) - 0.5[\rho(g^*)\|dy^{k-1}\| + \rho(h)] \|dx^k\|^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 4) (g-h)(x^{k+1}) &\leq (h^*-g^*)(y^k) - 0.5\rho(h^*) \|dy^k\|^2 \\ &\leq (g-h)(x^k) - 0.5\rho(g^*) \|dy^{k-1}\|^2 \end{aligned}$$

$$5) (h^*-g^*)(y^{k+1}) \leq (h^* - g^*)(y^k) - 0.5[\rho(g^*)\|dy^k\| + \rho(h)] \|dx^k\|^2 .$$

3.3. COROLLAIRE (CONVERGENCE)

1) On a

$$g(x^{k+1}) - h(x^{k+1}) = h^*(y^k) - g^*(y^k) \Leftrightarrow y^k \in \partial h(x^{k+1})$$

De plus, si $\rho(h) > 0$ alors (1) $\Leftrightarrow y^k \in \partial h(x^{k+1})$ et $x^k = x^{k+1}$.

Dans ce cas, on a $y^k \in \partial g(x^k) \cap \partial h(x^k)$

$$2) h^*(x^k) - g^*(x^k) = g(y^k) - h(y^k) \Leftrightarrow x^k \in \partial g^*(y^k)$$

Dans ce cas, on a $y^k \in \partial g(x^k) \cap \partial h(x^k)$ et

$\rho(h) > 0$ implique $x^k = x^{k+1}$, $\rho(g^*) > 0$ implique $y^k = y^{k-1}$.

3) Si α est fini et les suites $\{x^k\}$ et $\{y^k\}$ sont bornées, alors $\forall x^* \in \Omega(x^k)$ (respectivement $\forall y^* \in \Omega(y^k)$) il existe un $y^* \in \Omega(y^k)$ (resp. $x^* \in \Omega(x^k)$) :

$$i) (g-h)(x^k) = (h^*-g^*)(y^k) \rightarrow (g-h)(x^*) = (h^*-g^*)(y^*) = \tilde{\alpha} \geq \alpha \text{ lorsque } k \rightarrow +\infty$$

$$ii) y^* \in \partial g(x^*) \cap \partial h(x^*) \text{ et } x^* \in \partial g^*(y^*) \cap \partial h^*(y^*) \neq \emptyset$$

iii) Si $\rho(h) > 0$ ou $\rho(g) > 0$ alors $\|dx^k\| \rightarrow 0$ lorsque $k \rightarrow +\infty$.

Si $\rho(h^*) > 0$ ou $\rho(g^*) > 0$ alors $\|dy^k\| \rightarrow 0$ lorsque $k \rightarrow +\infty$.

où $\Omega(z^k)$ est l'ensemble des valeurs d'adhérence de $\{z^k\}$. 

4. EVALUATION DU VOLUME DE CALCULS DANS LES METHODES DE SOUS GRADIENTS

Dans de nombreux problèmes concrets on connaît l'expression explicite de ∂h . En tout cas, les modélisations mathématiques en optimisation d.c. ainsi que les techniques de calcul des sous différentiels des fonctions convexes devront être utilisées "à fond" dans le cas où le calcul d'un sous gradient de $\partial h(x)$ n'est pas explicite ou facile. Avant d'utiliser les méthodes d'approximation appropriées en optimisation convexe non différentiable [Demyanov & al85, Lemaréchal 80-90] pour calculer y^k , qui sont en général assez complexes et coûteuses surtout en grande dimension.

Mêmes remarques pour le calcul de x^k qui, dans ce cas, peut être regardé comme une solution du problème

$$\text{Inf}\{-\langle x, y^k \rangle + g(x) : x \in X\}$$

car il ne faut pas oublier que la définition du problème primal (P) par la donnée des expressions explicites de g et h n'implique pas celles de leur conjuguées g^* et h^* .

Ces considérations doivent être prises en compte lors de l'application des techniques de régularisation.

5. TECHNIQUES DE REGULARISATION EN OPTIMISATION D.C.

Ce paragraphe sera consacré à l'étude des techniques de régularisation appliquées au problème (P) en vue de

- (a) "Bien définir" les suites $\{x^k\}$ et $\{y^k\}$.
- (b) Accélérer la convergence de ces suites.

Pour cela nous avons besoin des notions suivantes [Au76].

5.1. DEFINITIONS

1) Soit T une application multivoque sur C , un ensemble de X .

On dit que T est monotone sur C si $\forall x_1, x_2 \in C; \forall y_1 \in Tx_1; \forall y_2 \in Tx_2$ on a

$$\langle x_1 - x_2, y_1 - y_2 \rangle \geq 0.$$

2) Soit T une application multivoque sur C , T est fortement monotone sur C s'il existe $\rho > 0$ tel que :

$$\forall x_1, x_2 \in C, \forall y_1 \in Tx_1, \forall y_2 \in Tx_2 \text{ on a : } \langle x_1 - x_2, y_1 - y_2 \rangle \geq \rho \|x_1 - x_2\|^2$$

La borne supérieure de tels ρ est appelé coefficient de forte monotonie de T sur C et noté $\rho(T, C)$.

Soient, pour toute la suite, C un ensemble non vide, convexe de X et f une fonction de X à valeurs dans $\bar{\mathbf{R}}$

3) On dit que f est fortement convexe sur C s'il existe $\rho > 0$:

$$f(\lambda x + (1-\lambda)x') \leq \lambda f(x) + (1-\lambda)f(x') - 0.5\lambda(1-\lambda)\rho \|x' - x\|^2 \quad \forall x', x \in C, \forall \lambda \in (0, 1).$$

La borne supérieure de tels ρ sera appelé coefficient de forte convexité (ou coefficient de coercivité) de f sur C et noté $\rho(f,C)$.

5.2. THEOREME [Au76]

1) Si f est fortement convexe sur C alors il existe $\rho > 0$:

$$f(x') \geq f(x) + \langle y, x' - x \rangle + \rho \|x' - x\|^2 \quad \forall x, x' \in C, \forall y \in \partial f(x)$$

La réciproque est vraie si f est sous différentiable.

2) Si f est fortement convexe sur C alors $\forall x, x' \in C, \forall y \in \partial f(x), \forall y' \in \partial f(x')$ on a

$$\langle y' - y, x' - x \rangle \geq \rho \|x' - x\|^2, \text{ i.e., } \partial f \text{ est fortement monotone avec } \rho(\partial f, C) = \rho(f, C).$$

La réciproque est vraie si f est différentiable sur C .

3) Si f est deux fois G -dérivable sur C alors une condition nécessaire et suffisante pour que f soit fortement convexe sur C est que

$$\langle H(x)(x' - x), (x' - x) \rangle \geq \rho \|x' - x\|^2 \quad \forall x, x' \in C.$$

$H(x)$ ici est la dérivée seconde de f en x (voir A. Auslender 1976). 🍏

Les techniques de régularisation étudiées dans ce paragraphe sont basées sur l'inf-convolution.

Soient $f, g \in \Gamma_0(X)$, l'inf-convolution de f et g , notée $f \nabla g$ est définie par [Ro70, La72]

$$f \nabla g(x) = \text{Inf} \{ f(x_1) + g(x_2) : x_1 + x_2 = x \}$$

Et on dit que l'inf-convolution est exacte en $x = x_1 + x_2$ si $f \nabla g(x) = f(x_1) + g(x_2)$.

Nous rappelons quelques résultats concernant l'inf-convolution et la dualité des propriétés de différentiabilité et de stricte convexité via la conjugaison fonctionnelle des fonctions convexes [Ro70, La72].

5.3. THEOREME

(a) $f \nabla g(x)$ est convexe et $\text{dom}(f \nabla g(x)) = \text{dom}(f) + \text{dom}(g)$.

(b) $(f \nabla g)^* = f^* + g^*$.

(c) Si $\text{ir}(\text{dom } f) \cap \text{ir}(\text{dom } g) \neq \emptyset$ alors $(f+g)^* = f^* \nabla g^*$ et l'inf-convolution $f^* \nabla g^*$ est exacte sur Y .

$$(d) \partial f(x_1) \cap \partial g(x_2) \subset \partial(f \nabla g)(x_1+x_2)$$

Si $\partial f(x_1) \cap \partial g(x_2) \neq \emptyset$ alors l'inf-convolution $f \nabla g$ est exacte en $x = x_1+x_2$.

Si l'inf-convolution $f \nabla g$ est exacte en $x = x_1+x_2$ alors $\partial f(x_1) \cap \partial g(x_2) = \partial(f \nabla g)(x_1+x_2)$. \clubsuit

5.4. DEFINITIONS [Ro70]

1) Une fonction f définie et à valeurs finies sur une partie convexe C de X est dite strictement convexe sur C si

$$f((1-\lambda)x_1 + \lambda x_2) < (1-\lambda)f(x_1) + \lambda f(x_2), \forall 0 < \lambda < 1, \forall x_1 \neq x_2 \text{ dans } C.$$

2) Une fonction f convexe et propre sur X est dite essentiellement strictement convexe si elle est strictement convexe sur toute partie convexe de $\text{dom}(\partial f)$.

5.5. THEOREME [Ro70]

Soit $f \in \Gamma_0(X)$. Alors les deux propriétés suivantes sont équivalentes :

- (i) Pour tout $x \in \text{dom}(f)$, $\partial f(x)$ contient au plus un élément.
- (ii) f est essentiellement différentiable.

Dans ce cas, $\partial f(x) = \{ \nabla f(x) \}$ si $x \in \text{int}(\text{dom } f)$ et $\partial f(x)$ est vide si $x \notin \text{int}(\text{dom } f)$. \clubsuit

5.6. THEOREME [Ro70]

- 1) Une fonction $f \in \Gamma_0(X)$ est essentiellement différentiable si et seulement si sa conjuguée f^* est essentiellement strictement convexe.
- 2) Soient $f_1, f_2 \in \Gamma_0(X)$ telles que f_1 est essentiellement différentiable et

$\text{ir}(\text{dom } f_1^*) \cap \text{ir}(\text{dom } f_2^*) \neq \emptyset$ alors $f_1 \nabla f_2$ est essentiellement différentiable. \clubsuit

5.7. REGULARISATION DE MOREAU-YOSIDA CHOIX OPTIMAL DES PARAMETRES

Soit $f \in \Gamma_0(X)$, la régularisée Moreau-Yosida de f , notée f_λ , (λ étant un réel positif) est définie par

$$f_\lambda(x) = (f \nabla_{\frac{1}{2\lambda} \|\cdot\|^2})(x) = \text{Inf} \{ f(u) + \frac{1}{2\lambda} \|x-u\|^2 : u \in X \}$$

On a les propriétés suivantes :

$$(i) f_\lambda(x) \leq f_\mu(x) \leq f(x) \quad \forall \lambda \geq \mu > 0 \text{ et } \forall x \in X$$

et $f_\lambda(x) = f(x)$ si et seulement si x est un minimum de f sur X .

Ajoutons à cela, cette propriété importante [Brezis 73] : $f_\lambda \uparrow f$ quand $\lambda \downarrow 0$.

$$(ii) \text{Inf}\{ f_\lambda(x) : x \in X \} = \text{Inf}\{ f(x) : x \in X \}, \quad \lambda > 0$$

Ces deux problèmes ont le même ensemble de solutions.

Il découle du théorème 5.3 que

$$(iii) f_\lambda \text{ est de classe } C^1 \text{ et } \nabla f_\lambda(x) = \lambda^{-1} [I - (I + \lambda \partial f)^{-1}](x)$$

où $(I + \lambda \partial f)^{-1}(x)$ est la solution du problème de minimisation de $f \nabla \frac{1}{2\lambda} \|\cdot\|^2$

$$(iv) \left[f + \frac{\lambda}{2} \|\cdot\|^2 \right]^* = f \nabla \frac{1}{2\lambda} \|\cdot\|^2 = (f^*)_\lambda$$

$$(v) \nabla((\lambda f)^*)_{\mu}(y) = (I + \frac{\lambda}{\mu} \partial f)^{-1}(\mu^{-1} y), \quad \mu > 0$$

La théorie des opérateurs maximaux monotones dans les espaces de Hilbert [Brezis73] permettent d'obtenir les résultats suivants concernant les coefficients de coercivité [Ph90,91].

5.8. PROPOSITION

Soient λ et μ deux réels positifs et $f \in \Gamma_0(X)$.

Alors on a les propriétés suivantes concernant les coefficients de coercivité $\rho(f)$ lorsque $C = \text{dom}(\partial f)$.

$$(i) \rho((\lambda f)^*) = \lambda^{-1} \rho(f)^*$$

$$(ii) \rho(f)\rho(f^*) \leq 1$$

$$(iii) \rho(f_\lambda) \geq \rho(f) / [1 + \lambda\rho(f)]$$

$$(iv) \rho[(\lambda f + 0.5\mu \|\cdot\|^2)^*] \geq \rho(f^*) / [\lambda + \mu\rho(f^*)]. \quad \clubsuit$$

Nous allons maintenant présenter les trois techniques de régularisation en optimisation d.c. basées sur l'inf-convolution. Pour une étude générale se référer à [Hiriart-Urruty 89],[Ph90,91].

5.9. REGULARISATION DU PROBLEME DUAL (D)

Soient,

$$\alpha = \text{Min}\{g - h\} \quad (\text{P})$$

$$\alpha = \text{Min}\{h^* - g^*\} \quad (\text{D})$$

Soient γ et μ deux réels strictement positifs quelconques alors le problème (P) peut s'écrire sous la forme équivalente :

$$\gamma\alpha = \text{Min}\{[\gamma g + \mu\theta] - [\gamma h + \mu\theta]\} \quad (\text{P}_{\gamma\mu})$$

(avec toutes les précautions d'usage pour lever les ambiguïtés $\infty - \infty$)

Sous certaines conditions précisées dans le théorème 5.3, le problème dual de $(\text{P}_{\gamma\mu})$ prend la forme :

$$\gamma\alpha = \text{Min}\{(\gamma h)^*_{\nabla}(\mu\theta)^* - [(\gamma g)^*_{\nabla}(\mu\theta)^*]\} \quad (\text{D}_{\gamma\mu})$$

Les résultats précédents montrent l'existence des fonctions θ (par exemple 0.5||.||²) telles que cette régularisation permette de :

(i) "Bien définir" les suites $\{x^k\}$ et $\{y^k\}$ construites par les méthodes de sous gradients appliquées à $(\text{P}_{\gamma\mu})$ si h est finie partout sur X et si $(\gamma h)^*_{\nabla}(\mu\theta)^*$ est différentiable sur Y .

(ii) Croître les coefficients de coercivité des fonctions du problème primal :

$$\rho(\lambda g + \mu\theta) = \lambda\rho(g) + \mu\rho(\theta) \text{ et } \rho(\lambda h + \mu\theta) = \lambda\rho(h) + \mu\rho(\theta)$$

(iii) Rendre différentiables les fonctions du problème dual $(\text{D}_{\gamma\mu})$ tout en conservant leur forte convexité.

Notons que sauf des cas particuliers comme $\theta = 0.5||.||^2$ (cf. Proposition 5.8), on ne sait pas mesurer les coefficients de coercivité des fonctions $(\gamma h)^*_{\nabla}(\mu\theta)^*$ et $(\gamma g)^*_{\nabla}(\mu\theta)^*$ du problème dual transformé $(\text{D}_{\gamma\mu})$ en fonction de ceux des fonctions h^* et g^* de (D). C'est un problème ouvert important.

Pour toutes ces raisons nous nous contentons en pratique de la régularisation de Moreau-Yosida, i.e., avec le choix de la fonction (ou le noyau) $\theta = 0.5\|\cdot\|^2$.

5.10. REGULARISATION DU PROBLEME PRIMAL (P)

Associons au problème primal (P) le problème suivant :

$$\gamma\alpha = \text{Min}\{[\gamma g_{\nabla} \mu \theta] - [\gamma h_{\nabla} \mu \theta]\} \quad (P'_{\gamma\mu})$$

dont le dual s'écrit,

$$\gamma\alpha = \text{Min}\{(\gamma g)^* - (\gamma h)^*\} \quad (D'_{\gamma\mu})$$

Ce dernier problème n'est autre que le problème dual du problème suivant :

$$\gamma\alpha = \text{Min}\{\gamma g - \gamma h\} \quad (P_{\gamma})$$

qui est évidemment équivalent au problème primal (P).

Le choix de cette régularisation lors de l'application des méthodes de sous gradients à la résolution de (P) devra tenir compte des arguments développés dans les paragraphes précédents. Ces considérations s'appliquent aussi à la troisième et dernière régularisation.

5.11. REGULARISATION PRIMALE-DUALE

On régularise les deux problèmes primal et dual à la fois. Pour cela, considérons le problème suivant

$$\gamma\alpha = \text{Min}\{[\gamma g + \mu \varphi] - [\gamma h + \mu \varphi]\} \quad (P_{\gamma\mu})(\varphi)$$

qui est équivalent au problème (P).

Appliquons la régularisation primale à $(P_{\gamma\mu})(\varphi)$ nous obtenons,

$$\gamma\alpha = \text{Min}\{(\gamma h + \mu \varphi)_{\nabla} \theta - [(\gamma g + \mu \varphi)_{\nabla} \theta]\} \quad (P'_{\gamma\mu})(\varphi)$$

dont le dual s'écrit

$$\gamma\alpha = \text{Min}\{[(\gamma h + \mu \varphi)^* + \theta^*] - [(\gamma g + \mu \varphi)^* + \theta^*]\} \quad (D'_{\gamma\mu})(\varphi)$$

i.e., (sous certaines conditions bien évidemment !)

$$\gamma\alpha = \text{Min} \{ [(\gamma h)^*_{\nabla}(\mu \varphi)^*] - [(\gamma g)^*_{\nabla}(\mu \varphi)^*] \} \quad (D'_{\gamma\mu})(\varphi)$$

6. REGULARISATION DUALE DE MOREAU-YOSIDA

Dans ce cas on prend $\theta = 0.5\|\cdot\|^2$ et pour résoudre le problème (P) :

$$\alpha = \text{Min}\{g - h\} \quad (P)$$

on applique les méthodes de sous gradients au problème primal transformé

$$\gamma\alpha = \text{Min}\{[\gamma g + \mu\theta] - [\gamma h + \mu\theta]\} \quad (P_{\gamma\mu})(\theta)$$

dont le dual

$$\gamma\alpha = \text{Min} \{ [(\gamma h)^*_{\nabla}(\mu \theta)^*] - [(\gamma g)^*_{\nabla}(\mu \theta)^*] \} \quad (D'_{\gamma\mu})(\theta)$$

Puisque les fonctions du problème (D) sont différentiables sur Y (cf. théorèmes 5.3, 5.6), les deux suites $\{x^k\}$ et $\{y^k\}$ sont bien définies si h est partout finie sur X. D'autre part on a

$$\nabla((\lambda g)^*_{\mu})(y) = (I + (\lambda/\mu) \partial g)^{-1}(\mu^{-1}y)$$

Autrement dit, les volumes de calcul des méthodes de sous gradients appliquées à (P)

et à $(P_{\gamma\mu})(\theta)$ sont à peu près les mêmes.

Dès lors la régularisation duale de Moreau-Yosida, en augmentant les coefficients de coercivité des fonctions du problème primal et en conservant une part de forte convexité des fonctions du problème dual (cf. Proposition 5.8) peut accélérer la convergence des méthodes de sous gradients. Ce qui nous amène au problème de choix optimal des paramètres de régularisation γ et μ .

7. RELATION ENTRE LES ALGORITHMES DE SOUS GRADIENTS ET LES ALGORITHMES PROXIMAUX.

Considérons le problème d'optimisation convexe ($f \in \Gamma_0(X)$)

$$\alpha = \text{Inf}\{f(x) : x \in X\} \quad (P)$$

qui est équivalent au problème d.c. suivant :

$$\gamma\alpha = \text{Inf}\{\gamma f(x) + 0.5\mu \|\cdot\|^2 - 0.5\mu \|\cdot\|^2 : x \in X\} \quad (P_{\gamma,\mu})$$

les deux suites de la méthode sous gradients appliquée à $(P_{\gamma,\mu})$ sont définies par :

$$y^k = \mu x^k \text{ et } x^{k+1} = \left(I + \frac{\gamma}{\mu} \partial f \right)^{-1} \begin{pmatrix} \mu^{-1} y^k \\ y^k \end{pmatrix}$$

Autrement dit, $x^{k+1} = \left(I + \frac{\gamma}{\mu} \partial f \right)^{-1} \begin{pmatrix} x^k \\ x^k \end{pmatrix}$

On voit ainsi que la méthode proximale [Güler 91, Ro76] pour résoudre (P) n'est autre qu'un cas particulier des méthodes de sous gradients appliquées au problème $(P_{\gamma,\mu})$.

Le problème $(P_{\gamma,\mu})$ est un "faux" problème non convexe, mais l'idée d'utiliser la décomposition d.c. ci-dessus et d'appliquer les méthodes de sous gradients à ce problème d.c. n'est pas mauvaise.

Ce résultat fait allusion à la diversité et à la souplesse des algorithmes de sous gradients. Il nous fait réfléchir sur la décomposition d.c. "optimale".

8. ALGORITHMES DE SOUS GRADIENTS EN OPTIMISATION D.C. POUR LA RESOLUTION DES PROBLEMES QUADRATIQUES.

Considérons le problème quadratique étudié dans le chapitre I

$$\alpha = \min \{ 0.5 \langle Ax, x \rangle + \langle b, x \rangle : \|x\| \leq r \} \quad (P)$$

A étant une matrice symétrique quelconque.

Dans le chapitre I, nous avons présenté deux algorithmes pour la résolution de (P) :

L'algorithme de Moré & Sorensen et notre nouvel algorithme. Ces deux algorithmes utilisent comme sous programme la méthode de Hebden. Cette méthode est très performante pour la résolution de (P) dans le cas où A est semi-définie positive (4 ou 5 itérations pour obtenir une solution de (P) et cela indépendamment de la dimension). D'où l'idée d'utiliser la méthode de Hebden dans les algorithmes de sous gradients (en optimisation d.c.) pour la résolution du problème (P).

Cette idée, due à [Ph91], est très simple. Soit ρ un nombre réel tel que $A + \rho I$ est (semi-) définie positive (un tel ρ est facile à trouver, cf. Chapitre I).

Soit $C = \{ x : \|x\| \leq r \}$. Il est clair que (P) est équivalent au problème d.c. suivant :

$$\alpha = \inf \{ 0.5 \langle (A + \rho I)x, x \rangle + \langle b, x \rangle + \chi_C(x) - 0.5\rho \|x\|^2 \} \quad (P')$$

Posons $g(x) = 0.5\langle(A+\rho I)x, x\rangle + \langle b, x\rangle + \chi_C(x)$ et $h(x) = 0.5\rho\|x\|^2$.

Laissons nous décrire maintenant l'algorithme de sous gradient appliqué à ce problème

$$y^k = \rho x^k \text{ et } x^k \in \partial g^*(y^k)$$

Autrement dit, x^{k+1} est la solution du problème quadratique (fortement) convexe suivant

$$\text{Inf } \{ 0.5\langle(A+\rho I)x, x\rangle + \langle b-y^k, x\rangle : \|x\| \leq r \} \quad (P_k)$$

On peut alors appliquer la puissante méthode de Hebden pour résoudre (P_k) .

Remarquons que α est fini et que $\{x^k\}$ est dans C , donc bornée. Par conséquent tous les résultats du paragraphe 3 s'appliquent ici.

Soit maintenant x^* une solution fournie par l'algorithme de sous gradient, on a

$$\nabla h(x^*) = \rho x^* \in \partial g(x^*).$$

Deux cas sont à distinguer

(i) cas $\|x^*\| = r$.

Alors la condition $\rho x^* \in \partial g(x^*)$ s'écrit alors il existe $\lambda \geq 0$ tel que $(A+\lambda I)x^* = -b$

Or, d'après le chapitre I, x^* est une solution de (P) si et seulement si $(A+\lambda I)$ est semi-définie positive. Si A est semi-définie positive la solution fournie par l'algorithme sous-gradient appliqué à (P') est bien une solution optimale du problème initial (P).

(ii) cas $\|x^*\| < r$. Alors on a $Ax^* = -b$. Or, d'après le chapitre I, x^* est solution de (P) si et seulement si A est semi-définie positive. Lorsque A est semi-définie positive, la solution x^* fournie par l'algorithme de sous-gradient appliquée à (P') est bien une solution optimale globale.

Actuellement, nous nous intéressons aux deux problèmes suivants :

(1) Chercher une réponse théorique à la question : x^* est-elle une solution de (P) ?

On peut fabriquer un exemple simple²⁵ pour montrer que si ρ est choisi tel que $A+\rho I$ est définie positive alors la solution fournie par l'algorithme sous-gradient n'est pas une solution du problème initial (P). Il reste à savoir si le choix de ρ tel que $A+\rho I$ est seulement semi-définie positive permet d'obtenir la solution du problème initial (P).

(2) Parallèlement nous comparons cet algorithme avec ceux du chapitre I pour les simulations numériques.

²⁵ Voir cet exemple dans [A.Chine 1991]

8.1. REMARQUE

Il est facile de tester numériquement si une matrice symétrique est semi-définie positive. En effet, il suffit de décomposer par cholesky la matrice $A + \epsilon I$ pour $\epsilon > 0$ suffisamment petit.

CONCLUSIONS

Les constructions de algorithmes de sous-gradients en optimisation d.c. sont assez souples et variées grâce aux techniques de régularisation. Ces techniques, en permettant d'améliorer la convergence des méthodes de sous gradients, peuvent être vue sous un angle différent : Recherche d'une décomposition d.c. "optimale" pour la résolution.

Les algorithmes de sous gradients sont les seuls actuellement à pouvoir traiter les problèmes d.c. en grande dimension.

Reste le problème crucial : " Comment reconnaître si une solution optimale locale fournie par ces algorithmes est réellement globale ? Et dans le cas contraire comment repartir vers une solution meilleure, puis par des corrections successives vers une solution globale ? " dont des réponses à certaines classes de problèmes ont pu être obtenues [Ph90,91], Hiriart-Urruty 90, Bomze et Danniger 91].

Il est souhaitable qu'un effort particulier (des recherches en optimisation d.c.) soit consacré à ce problème dans les années à venir. Des simulations numériques dans les problèmes concrets de grande taille présentées dans le dernier chapitre montrent la supériorité (en temps de calcul) des méthodes de sous gradients vis à vis des autres méthodes connues dans la littérature pour leurs robustesses et fiabilités. Et ce qui est très important, est que cette supériorité s'accroît lorsque la dimension augmente.

9. APPLICATIONS

Avant d'exposer les applications, considérons les remarques suivantes :

1) Soit $f(x) = (\langle Ax, x \rangle)^{1/2}$ où A semi-définie positive. Le sous-différentiel de f est,

$$\partial f(x) = \begin{cases} \frac{Ax}{\sqrt{\langle x, Ax \rangle}} & \text{si } Ax \neq 0 \\ U_0 & \text{sinon} \end{cases}$$

où $U_0 = \{ y = Lx, x \in B(0,1) \}$ avec $B(0,1)$ la boule unité et L est une matrice symétrique " la racine carrée de A ", i.e., $A = L^2 = L^T L$.

En effet, soit $A = L^2$ (obtenue à partir de la décomposition spectrale) alors $f(x) = \|Lx\|$. D'où, d'après le chapitre 0, $\partial f(x) = L^T \partial \varphi_2(x) = L \partial \varphi_2(x)$ avec $\varphi_2(x) = \|x\|$. Donc,

$$\partial f(x) = \begin{cases} \frac{Ax}{\varphi_2(Lx)} & \text{si } Lx \neq 0 \\ \text{LB}(0,1) & \text{sinon} \end{cases}$$

or, $Lx=0 \Leftrightarrow Ax=0$ car A est s.d.positive.

2) Soient x^0 arbitraire tel que $Ax^0 \neq 0$. Alors la suite $\{x^k\}$ définie par

$$x^{k+1} = x^k + \frac{Ax^k}{\sqrt{\langle x^k, Ax^k \rangle}}$$

vérifie $Ax^k \neq 0 \forall k \geq 0$.

En effet, dire que $Ax^{k+1} = 0 \Leftrightarrow \langle x^k, Ax^k \rangle = \langle Ax^k, Ax^k \rangle = 0 \Leftrightarrow Ax^k = 0$ (car A est s.d.positive) ce qui contredit notre hypothèse.

Cette remarque permet d'écrire l'algorithme appliqué à la recherche de valeurs propres sans passer par les points où f n'est pas différentiable.

9.1 CALCUL DES VALEURS PROPRES D'UNE MATRICE SEMI-DEFINIE POSITIVE

Considérons l'exemple suivant :

$$\text{Max } \{ f(x) : \|x\| \leq 1 \} \quad (9.1)$$

où, $f(x) = (\langle Ax, x \rangle)^{1/2}$, A est une matrice symétrique semi-définie positive et $\|\cdot\|$ est la norme Euclidienne. Il est évident que la valeur optimale du problème (9.1) est égale à la racine carrée de la plus grande valeur propre de A . On a appliqué l'algorithme du Chapitre III (toutes les conditions sont satisfaites) pour résoudre (9.1) et le problème d.c intermédiaire (P_λ) est résolu par l'algorithme sous-gradient avec régularisation (où les paramètres de régularisation $\mu = \gamma = 1$) ce qui permet d'obtenir les formules suivantes :

$$x^{k+1} = \frac{1}{\lambda + \mu} \left[x^k + \frac{Ax^k}{\sqrt{\langle x^k, Ax^k \rangle}} \right]$$

si $x^k \neq 0$ et $x^{k+1} = \omega e$ sinon, où $e = (1, \dots, 1)^t$, ω est un réel précis et λ est le multiplicateur de Lagrange.

Dans les trois exemples suivants, A est une matrice tri-diagonale avec les éléments de la diagonale principale sont égaux à τ et les autres éléments - ξ . On a obtenu²⁵ :

Exemple 1. $n=2$, $\tau=5$ et $\xi=4$ (On sait que $\lambda_2(A)=9$).

- a) $f(x^*) = 3.0000000000$
- b) $\lambda^* = 3.000000036$ où λ^* est le multiplicateur de Lagrange.
- c) $\|x^*\| = 1.0000001$.
- d) $x^* = (-0.70710, +0.70710)$.

Exemple 2. $n=3$, $\gamma=7$ et $\xi=1.414$.

- a) $f(x^*) = 2.9999950000$
- b) $\lambda^* = 2.999994966$
- c) $\|x^*\| = 1.00000012$.
- d) $x^* = (0.49999993, -0.70710667, 0.50000000)$

Exemple 3. $n=6$, $\gamma=10$ et $\xi=4$.

- a) $f(x^*) = 4.148222820$
- b) $\lambda^* = 4.148222620$.
- c) $\|x^*\| = 1.00000005$.
- d) $x^* = (-0.23192, 0.41790, -0.52112, 0.52112, -0.41790, 0.23192)$.

9.2. CALCUL DES VALEURS SINGULIÈRES

Soit le problème : $\text{Max} \{ \|Ax\| : \|x\| \leq 1 \}$ (9.2)

On applique l'algorithme du Chapitre III combiné avec le sous-gradient régularisé (ici, $\mu = \gamma = 1$). La recherche des valeurs singulières peut être considérée comme un cas particulier de la précédente mais le calcul sera complètement différent voire complexe.

1). $n=2$, $A = \begin{pmatrix} -1 & 2 \\ -1 & -4 \end{pmatrix}$ (on sait que $\lambda_2(A^t A) = 11 + \sqrt{85}$).

On a obtenu les résultats suivants² :

- a) $f(x^*) = 4.49661420$
- b) $\lambda^* = 4.49661478$ où λ^* est le multiplicateur de Lagrange.
- c) $\|x^*\| = 0.9999999$.
- d) $x^* = (0.109116, 0.994028)$.

Il est facile de vérifier que les solutions obtenues coïncident avec les solutions exactes.

²⁵ Programmes (en Pascal) tournés sur PC 8086.

$$2). n= 3, A = \begin{pmatrix} -1 & 2 & -3 \\ -5 & 4 & -2 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

- a) $f(x^*) = 7.38092477$
- b) $\lambda^* = 7.38092454$
- c) $\|x^*\| = 1.00000000$.
- d) $x^* = (0.68008, -0.603171, 0.4167381)$

3).MATRICE TRI-DIAGONALE

Soit A une matrice tri-diagonale symétrique. Les éléments de la diagonale principale égaux à 2 excepté le premier élément qui est égal à 1 et le reste de la matrice égal à -1.

- i) $n= 5$, (on connaît $\lambda_j(A) = 4\cos^2[\pi j/(2n+1)]$, $j=1,\dots,n$).

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

- a) $f(x^*) = 3.6825070$
- b) $\lambda^* = 3.6825074$
- c) $\|x^*\| = 1.00000005$.
- d) $x^* = (0.16989, -0.4557341, 0.596884, -0.548528, 0.326018)$.

- ii) $n = 10$

- a) $f(x^*) = 3.908258$
- b) $\|x^*\| = 1.00000007$

- 7) $n = 20$

- a) $f(x^*) = 3.976175$
- b) $\|x^*\| = 1.0000000$

- iii) $n = 30$.

- a) $f(x^*) = 3.9892439$
- b) $\|x^*\| = 1.00000977$

4).MATRICE DE HILBERT

Soit A est une matrice symétrique²⁶ où $A_{ij} = 1/(i+j -1)$.

²⁶ La matrice de Hilbert devient mal conditionnée lorsque la taille augmente [Br71]. Puisqu'elle est symétrique on obtient donc sa plus grande valeur propre.

Pour les grandes dimensions nous donnons ci-après la valeur optimale (la racine carrée de la plus grande valeur singulière de A).

i) $n = 6$.

a) $f(x^*) = 1.618900$

b) $\lambda^* = 1.6188990$ où λ^* est le multiplicateur de Lagrange.

c) $\|x^*\| = 1.00000004$.

d) $x^* = (1.748, 0.4407, 0.3207, 0.2543, 0.2115, 0.18144)$.

ii) $n = 10$.

a) $f(x^*) = 1.751919$

b) $\|x^*\| = 1.00000005$

iii) $n = 20$

a) $f(x^*) = 1.9071347$

b) $\|x^*\| = 1.000000029$

iv) $n = 30$.

a) $f(x^*) = 1.9864925$

b) $\|x^*\| = 1.000000022$

v) $n = 40$

a) $f(x^*) = 2.0383668$

b) $\|x^*\| = 1.00000018$

vi) $n = 50$

a) $f(x^*) = 2.07629668$

b) $\|x^*\| = 1.00000016$

COMMENTAIRES

On donne, à la fin du chapitre V, une comparaison de cet algorithme, le paramètre de régularisation étant quelconque, avec les méthodes standards pour la recherche de la plus grande valeur propre. On observe, en particulier, que pour des dimensions assez grandes (≥ 50) cet algorithme est le plus rapide.

APPLICATION EN MECANIQUE DES FLUIDES

SIMULATIONS NUMERIQUES DE FLUIDES INCOMPRESSIBLES DANS LES CONDUITES PLANES OU AXISYMETRIQUES

Dans le contexte de la mise en forme des problèmes, la simulation numérique des écoulements de fluides incompressibles en géométrie complexe suscite un intérêt croissant, sur le plan fondamental et sur le plan industriel. La résolution de tels problèmes fait appel, en général, aux méthodes de différences finies ou d'éléments finis. Dans l'approche que nous présentons, la méthode utilisée, appelée méthode des tubes de courants [Ya89] est basée sur la transformation du domaine d'écoulement D en un domaine rectangulaire D' tel que les transformées des lignes de courant soient des droites parallèles (cf. Figure 1). Cette méthode permet de calculer l'écoulement principal, sur des tubes de courants successifs, dans le domaine transformé, de la paroi vers la région centrale de l'écoulement. En écoulement isotherme, les inconnues du problème sont : La transformation f , la pression et les composantes du tenseur des contraintes T . Avec cette transformation, la conservation de la masse est automatiquement vérifiée et seules les équations de la dynamique sont à prendre en compte, sous la forme :

$$\operatorname{div} \sigma [f, p, T] = 0 \quad (1)$$

ici 0 désigne le vecteur nul et T est le tenseur des contraintes.
avec les contraintes aux limites associées

$$\mathfrak{L}[f, p, T] = 0 \quad (2)$$

où σ est la matrice tenseur des contraintes totales, telle que :

$$\sigma = -pI + T \quad (3)$$

où pI est la contribution sphérique de σ et T est le tenseur des contraintes donné par la loi de comportement du matériau. La discrétisation de (1) et (2) sur un tube de courant conduit à un système non linéaire de m équations à n inconnues de la forme :

$$\phi(X) = 0 \quad (4)$$

où $\phi = (\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_m)$ avec ϕ de classe C^1 et $X = (X_1, \dots, X_n)$.

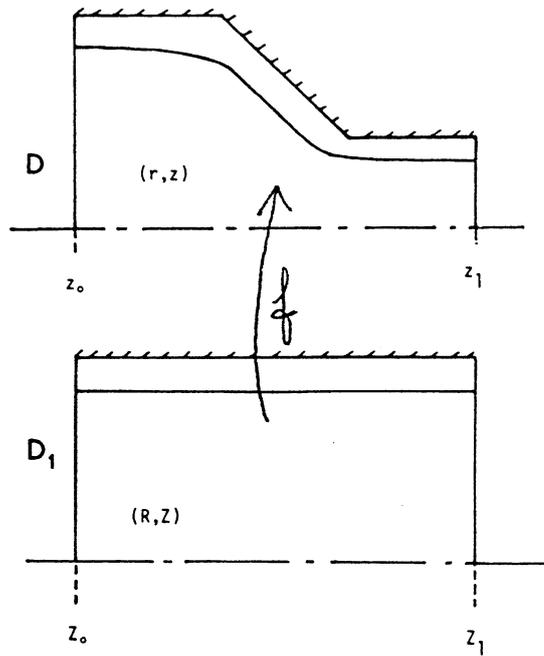


Figure 1 : Transformation du domaine physique D en un domaine rectangulaire D_1 .

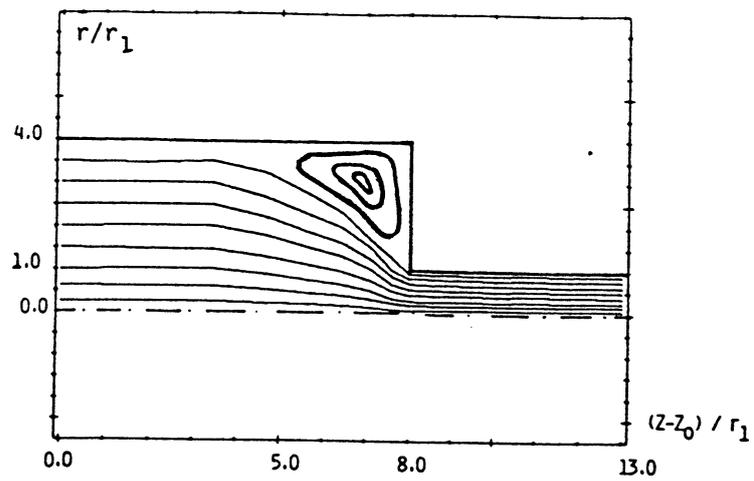


Figure 2 : Ecoulement dans une contraction brusque axi-symétrique.

Le vecteur inconnu X regroupe toutes les composantes des inconnus du problème et pour le déterminer on résout on transforme le problème (4) au problème équivalent suivant :

$$0 = \min \{ \mathcal{F}(X) : X \in \mathbb{R}^n \} \quad (5)$$

$$\text{où } \mathcal{F}(X) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \phi_i^2(X)$$

Nous avons appliqué la méthode de la région de confiance avec le nouvel algorithme pour la résolution successive du problème quadratique local (RC-New) et dans ce contexte nous l'avons comparé avec la procédure de Levenberg-Marquardt ¹ qui était jusqu'alors la procédure standard choisi de la librairie d'optimisation pour la résolution le calcul d'écoulement. On désignera par LM1 la procédure de minimisation de Levenberg-Marquardt. Signalons que la méthode RC-safe est trop lente (par rapport à RC-New et LM1) et pour cette raison nous ne l'avons pas sélectionnée.

Le premier test effectué concerne l'écoulement de " Poiseuille " de fluide Newtonien en géométrie axisymétrique, i.e, l'écoulement d'un fluide dans une conduite circulaire et caractérisé par la loi de comportement

$$T = 2\mu D \quad (6)$$

où μ est la constante de viscosité et D le tenseur vitesse de déformation. La solution analytique de ce problème est connue (eu particulier la transformation f est l'identité). Les deux algorithmes ci-dessus (RC-New et LM1) ont été appliqués en partant d'un vecteur initial X^0 fortement perturbé par rapport à la solution analytique connue, i.e, le X^0 est de la forme :

$$X^0 = X_{sol} + \Delta \quad (7)$$

avec le nombre d'inconnus est $n=192$ et le nombre d'équations est $m=154$. Enfin, signalons que les deux procédures utilisent les approximations de Gauss-Newton, i.e, le Hessien $H(X)$ de la fonction objectif est calculé comme suit :

$$H(X) = J^t(X).J(X) \quad (8)$$

¹ La procédure de Levenberg-Marquardt figure dans la bibliothèque d'optimisation sous un nom différent que celui employé dans cette Thèse.

Cette formule d'approximation est d'autant plus intéressante que le Jacobien $J(X)$ de notre problème est non singulière [Ya89].

Ci-après nous donnons l'analyse de l'application de ces deux procédures de minimisation.

- Cas de Poiseuille

- Les deux procédures convergent vers la solution analytique de Poiseuille.
- La qualité de la solution obtenue avec RC-New est meilleure (en particulier le gradient en norme est très faible à la convergence voir aussi les tableaux 1-2 ci dessous).
- RC-New est plus rapide en temps de calcul. 12 minutes et 31 secondes pour RC-New et 19 minutes et 47 secondes pour LM1.

- Cas de contraction brusque axisymétrique

Ce cas correspond à un écoulement de fluide Newtonien dans une contraction brusque axisymétrique (Figure 2). Le changement brusque de section provoque évidemment des variations importantes de pression et de contraintes au voisinage de la section de contraction. Le vecteur initial est choisi à l'aide d'une procédure numérique de façon à être " assez proche " d'une solution numérique vérifiant $\mathcal{F}(X^0) \approx 0$. Les deux procédures convergent vers des solutions très voisines qui présentent la même évolution des lignes de courant, de pression et de contraintes (cf. Figure 3). La valeur optimale et les la norme du gradient sont du même ordre de grandeur pour les deux méthodes (voir tableaux 3-4 ci-dessous). Le RC-New est toujours plus rapide en temps de calcul (5min 41 sec pour RC-New et 9 min 4sec pour LM1). En conclusion des tests effectués, il apparait que la méthode de la région de confiance basée sur la nouvelle procédure locale conduit à des solutions fiables et précises. Elle permet surtout de gagner en rapidité lorsqu'on part d'un itéré initial, à priori, éloigné de la solution numérique à qui correspond à la plupart des cas le calcul d'écoulements. En particulier, il nous semble que son application peut être très efficace dans le calcul d'écoulements véritablement tri-dimensionnels avec des lois de comportement plus complexes que le comportement newtonien (cas des fluides de viscoélastiques) comportant un grand nombre d'inconnus et d'équations et dont la solution numérique est délicate à estimer pour l'évaluation de l'itéré initial X^0 .

LIGNES DE COURANT

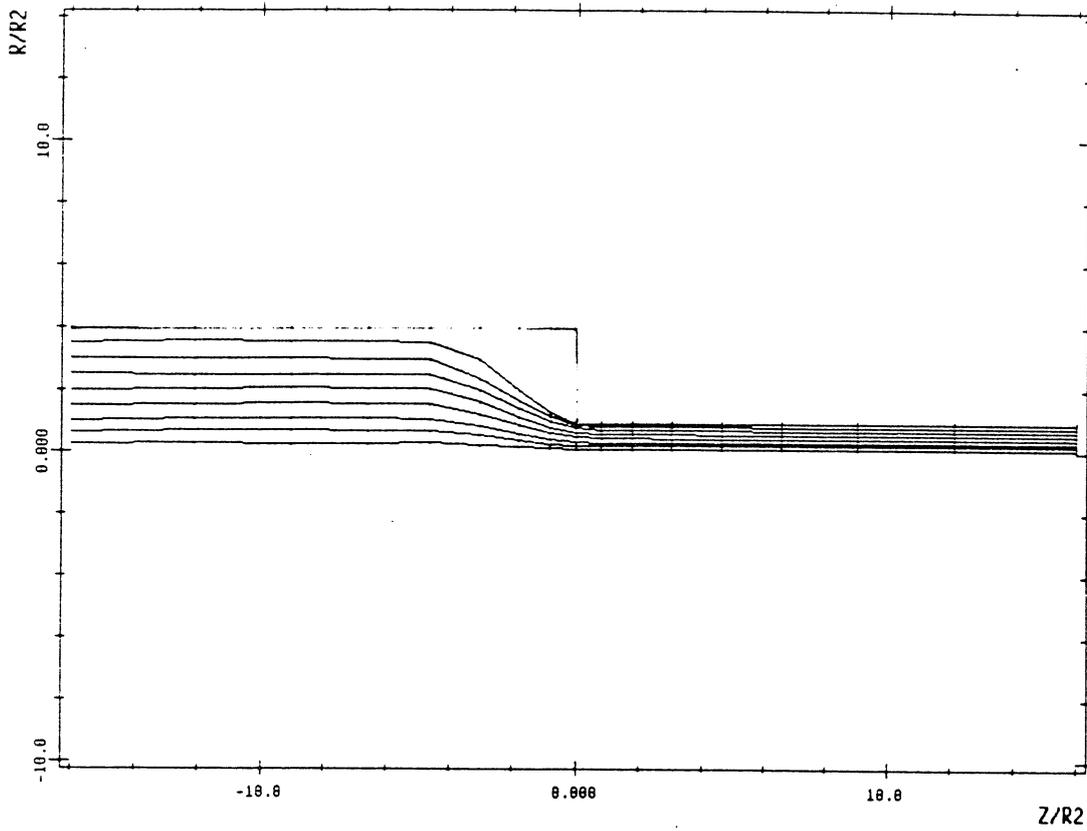


Figure 3a : Réseau des lignes de courant de l'écoulement principal.

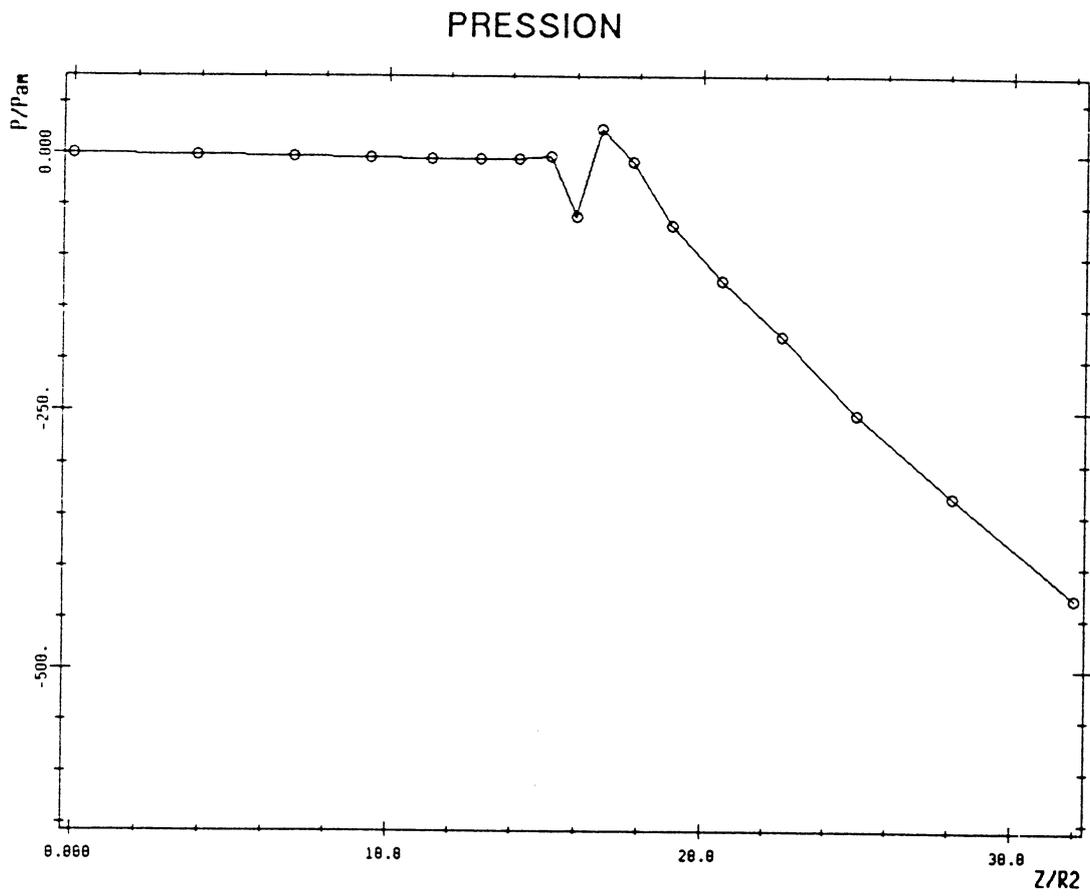


Figure 3b : Evolution des pressions au voisinage de la paroi.

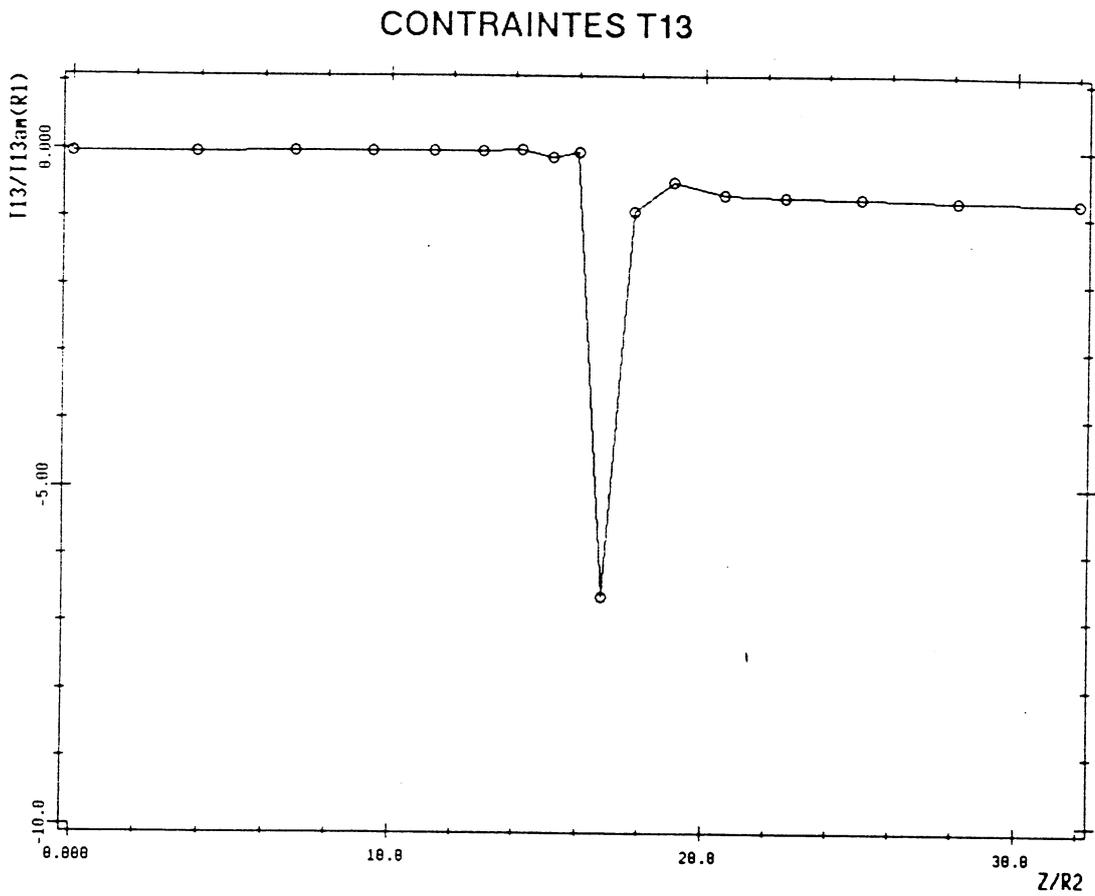


Figure 3c : Evolution des contraintes $T^{13} = T^{rz}$ au voisinage de la paroi.

n° Iteration	Valeur de Φ	Norme gradient	Commentaires
0	15694.7	1677789.07	Test de Poiseuille avec X^0 Initial fortement perturbé où $n=192$, $m = 154$..
1	48.304	34371.58	
2	4.6401	1079.60	
3	0.2907	1240.42	
4	2.48E-04	113.89	
5	4.00E-05	71.543	
12	1.16E-10	1.59E-02	On s'approche de la solution du système.
13	2.98E-11	7.34E-03	Et le rayon de confiance est encore grand.

Tableau 1. Résultats de RC-New

n° Iteration	Valeur de Φ	Norme gradient	Commentaires
0	15694.7	1677787.76	Test de Poiseuille avec X^0 Initial fortement perturbé où $n=192$, $m = 154$..
1	4.722	1677787.75	
2	0.733	23273.77	
3	0.439	5854.93	
4	0.34839	3945.83	
5	0.1970	3383.10	
45	1.89E-06	6.733	
46	1.83E-06	1.407	

Tableau 2. Résultats de Levenberg-Marquardt.

Iteration n°	Valeur de Φ	Norme gradient	Commentaires
0	0.2548	3.64	Test de Contraction brusque.
1	3.04E-02	3.13	avec X^0 Initial calculé par une procédure
2	2.45E-04	0.527	de sorte qu'il soit assez proche de la solution
3	1.9E-05	8.6E-02	
4	1.83E-06	3.5E-02	
5	1.2E-06	4.5E-02	
6	9.0E-07	3.8E-02	
7	6.2E-07	2.8E-02	La solution est déjà atteinte.
10	2.6E-07	8.0E-03	
14	1.3E-07	1.2E-03	
15	1.2E-07	8.0E-04	Le rayon de confiance est encore grand.

Tableau 3. Résultats de RC-New.

Iteration N°	Valeur de Φ	Norme gradient	Commentaires
0	0.2548	3.64..	Test de Contraction brusque.
1	2.07E-03	3.64..	avec X^0 Initial calculé par une procédure
2	1.07E-03	0.2008	de sorte qu'il soit assez proche de la solution
3	4.3E-04	0.15	
4	3.7E-05	0.10	
5	1.0E-05	2.8E-02	
6	1.5E-07	1.6E-02	On s'approche de la solution.
7	1.0E-07	2.0E-03	A partir de cette itération la fonction est pratiquement constante
10	1.0E-07	1.3E-03	mais le gradient continue à décroître.

Tableau 4. Levenberg-Marquardt

Commentaires

Il suffit de comparer dans ces tableaux l'évolution des suites $f(x^k)$ et $\|g(x^k)\|$ surtout lorsqu'on s'approche de la solution pour voir que RC-New est plus précise et plus rapide. On constate également que le rayon de confiance dans RC-New est à la convergence assez grand ce qui permet de dire que l'on peut améliorer encore, si nécessaire, la qualité de la solution obtenue.

**LES APPLICATIONS DES METHODES DE
LA REGION DE CONFIANCE POUR
LA MINIMISATION SANS CONTRAINTES**

1. INTRODUCTION

Les nombreux tests que nous avons effectué pour valider l'algorithme de la région de confiance sont choisis de l'article très intéressant de Moré, Garbow et Hillstrom [M-G-H81]. Cette longue liste d'exemples est fabriquée afin de tester et valider les nouveaux algorithmes d'optimisation [cf page 2 [M-G-H81]]. La fonction de Rosenbrock, par exemple, est utile pour vérifier la capacité d'un algorithme de traiter les fonctions du type "vallée allongée et étroite" [Mi83],[M-G-H81], [Fr87]. La fonction de Watson pour $n \geq 9$ est mal conditionnée et l'auteur de [Br71] confirme qu'elle est un très bon test pour une procédure de minimisation. Cette liste est aussi construite pour mesurer la sensibilité de l'algorithme par rapport au point de départ. Par ailleurs, le fait de tester un nouvel algorithme sur un nombre important de fonctions de la littérature et fabriquées pour la plupart "à la main" pour confronter l'algorithme à des difficultés spécifiques permet d'avoir une idée assez claire de sa robustesse.

Les auteurs de [M-G-H81] ont testé ces fonctions avec deux programmes "en Fortran" de la librairie d'optimisation mais qui y figurent sous d'autres appellations. Ils ont choisis des problèmes de tailles allant jusqu'à la dimension quarante (40). Nous avons préféré prendre des dimensions plus importantes pour pouvoir dégager une conclusion assez forte. Et pour raison nos simulations comporte des problèmes avec des tailles allant jusqu'à la dimension 200 (deux cent). Nous désignerons l'algorithme RC basé sur le nouvel algorithme pour la résolution du problème quadratique local (resp. le safeguarding) par RC-New (resp. RC-Safe) et nous les avons appliqué aux trois domaines suivants :

- Résolution de système non linéaires d'équations.
- Résolution des moindres carrés non linéaires.
- Optimisation sans contraintes.

Pour définir les fonctions tests nous avons adopté le format de présentation suivant :

Nom de la fonction (suivi entre [] du n° du problème dans [M-G-H81])

- (a) Dimension du problème.
- (b) La forme explicite de la fonction objectif.
- (c) Le point de départ
- (d) La valeur optimale exacte de f et la solution exacte lorsque cela est commode.

Voici la liste des fonctions que nous avons implémentées. La liste avec les solutions données sont repris de l'article [M-G-H81].

1. Fonction de Rosenbrock [1]

(a) $n = 2$.

(b) $f(x) = (1 - x_1)^2 + (x_2 - x_1^2)^2$

(c) $x_0 = (-1.2, 1)$ (d) $f = 0$ au point $(1, 1)$.

2. Fonction de Freudenstein and Roth [2]

(a) $n = 2$.

(b) $f(x) = f_1^2(x) + f_2^2(x)$

où $f_1(x) = -13 + x_1 + (5 - x_2)x_2^2 - x_2$ et $f_2(x) = -29 + x_1 + (1 + x_2)x_2^2 - 14x_2$

(c) $x_0 = (0.5, -2)$ (d) $f = 0$ au point $(5, 4)$ et $f = 48.9842..$ au $(11.41.., -0.8968..)$.

3. Fonction de Powell badly scaled [3]

(a) $n = 2$.

(b) $f(x) = f_1^2(x) + f_2^2(x)$

où $f_1(x) = 10^4 x_1 x_2^2 - 1$ et $f_2(x) = \exp(-x_1) + \exp(-x_2) - 1.0001$

(c) $x_0 = (0, 1)$ (d) $f = 0$ au point $(1.098E-5, 9.106..)$.

4. Fonction de Brown badly scaled [4]

(a) $n = 2$.

(b) $f(x) = f_1^2(x) + f_2^2(x) + f_3^2(x)$

où $f_1(x) = -10^6 + x_1$, $f_2(x) = \exp(-x_1) + x_2 - 0.000002$ et $f_3(x) = x_1 x_2 - 2$

(c) $x_0 = (1, 1)$ (d) $f = 0$ au point $(1.0E+6, 0.000002)$.

5. Fonction de Beale [5]

(a) $n = 2$.

(b) $f(x) = f_1^2(x) + f_2^2(x) + f_3^2(x)$

où $f_1(x) = 1.5 - x_1(1 - x_2)$, $f_2(x) = 2.25 - x_1(1 - x_2^2)$ et $f_3(x) = 2.625 - x_1(1 - x_2^3)$

(c) $x_0 = (1, 1)$ (d) $f = 0$ au point $(3, 0.5)$.

6. Fonction de Jennrich & Sampson [6]

(a) $n = 2$.

(b) $f(x) = f_1^2(x) + f_2^2(x) + f_3^2(x) + \dots + f_{10}^2(x)$

où $f_i(x) = 2+2i - (\exp(ix_1) + \exp(ix_2))$ pour $i=1,\dots,10$.(c) $x_0 = (0.3, 0.4)$ (d) $f = 124.362$ au point $x_1 = x_2 = 0.2578\dots$

7. Fonction Helical valey [7]

(a) $n = 3$.

(b) $f(x) = f_1^2(x) + f_2^2(x) + f_3^2(x)$

où $f_1(x) = 10(x_3 - 10\Theta(x_1, x_2))$, $f_2(x) = 10((x_2^2 + x_1^2)^{1/2} - 1)$ et $f_3(x) = x_3$ où $\Theta(x_1, x_2) = 0.5\alpha + \frac{1}{2\pi} \arctan\left(\frac{x_2}{x_1}\right)$ avec $\alpha = 0$ si $x_1 > 0$ et 1 si $x_1 < 0$.(c) $x_0 = (\alpha, 0, 0)$ avec α un réel positif. (dans [M-G-H81], $x_0 = (-1, 0, 0)$)(d) $f = 0$ au point $(1, 0, 0)$.

8. Fonction Box three-dimensional [5]

(a) $n = 3$.

(b) $f(x) = f_1^2(x) + f_2^2(x) + f_3^2(x)$

où $f_i(x) = \exp(-t_i x_1) - \exp(-t_i x_2) - (\exp(-t_i) - \exp(-10t_i))x_3$ où $t_i = (0.1)^i$ (c) $x_0 = (0, 10, 20)$ (d) $f = 0$ au point $(1, 10, 1)$, $(10, 1, -1)$ et $(\xi, \xi, 0)$ avec ξ réel quelconque.

9. Fonction Biggs EXP6 [18]

(a) $n = 6$, m variable ≤ 13 .

(b) $f(x) = f_1^2(x) + f_2^2(x) + f_3^2(x) + \dots + f_m^2(x)$.

où $f_i(x) = x_3 \exp(-t_i x_1) - x_4 \exp(-t_i x_2) + x_6 \exp(-t_i x_5) - y_i$ où $t_i = (0.1)^i$ et $y_i = \exp(-t_i) - 5 \exp(-10t_i) + 3 \exp(4t_i)$.(c) $x_0 = (1, 2, 1, 1, 1, 1)$ (d) $f = 0$ au point $(1, 10, 1, 5, 4, 3)$ et $f = 5.6556E-3$.

10. Fonction Watson [20]

(a) n variable, $2 \leq n \leq m = 31$.

(b) $\sum_{i=1}^m f_i^2(x)$ avec $f_i(x) = \sum_{j=2}^n (j-1)x_j t_i^{j-2} - \left(\sum_{j=1}^n x_j t_i^{j-1}\right)^2 - 1$ avec $t_i = i/29 \quad \forall i=1,\dots,29$

$$f_{30} = x_1 \text{ et } f_{31} = x_2 - x_1^2 - 1$$

(c) $x_0 = (0, 0, \dots, 0)$.

(d) $f = 2.287E-3$ si $n = 6$

$f = 1.399E-6$ si $n = 9$

$f = 4.722E-10$ si $n = 12$

11. Fonction Gulf research and development ² [11]

(a) $n = 3$. m est variable et $n \leq m \leq 100$.

(b) $\sum_{i=1}^m f_i^2(x)$ avec $f_i(x) = \exp\left(-\frac{|y_i - x_2|^{x_3}}{x_1} - \frac{i}{100}\right)$ où $y_i = 25 + \left(-50 \ln\left(\frac{i}{100}\right)\right)^{\frac{2}{3}}$

(c) $x_0 = (5, 2.5, 0.15)$

(d) $f = 0$ au $(50, 25, 15)$.

12. Fonction Extended Rosenbrock [21]

(a) $n =$ variable mais pair et $m = n$.

(b) $\sum_{i=1}^m f_i^2(x)$ avec $f_{2i-1}(x) = 10(x_{2i} - x_{2i-1}^2)$ et $f_{2i}(x) = (1 - x_{2i-1})$

(c) $x_0 = (x_j)$ avec $x_j = 1$ si j est pair et -1.2 sinon.

(d) $f = 0$ au $(1, \dots, 1)$

13. Fonction Extended Powell singular [22]

(a) $n =$ variable mais multiple de 4.

(b) $\sum_{i=1}^m f_i^2(x)$ avec

$$f_{4i-3}(x) = x_{4i-3} + 10 x_{4i-2}, f_{4i-2}(x) = \sqrt{5}(x_{4i-3} - x_{4i})$$

$$f_{4i-1}(x) = (x_{4i-2} - 2x_{4i-1})^2 \text{ et } f_{4i}(x) = \sqrt{10}(x_{4i-3} - x_{4i})^2$$

(c) $x_0 = (x_j)$ avec $x_{4i-3} = 3$, $x_{4i-2} = -1$, $x_{4i-1} = 0$ et $x_{4i} = 1$

(d) $f = 0$ au $(0, \dots, 0)$.

². La formule dans [M-G-H85] est incorrecte, voir Fraley [Fr87].

14. Fonction Variably Dimensioned [25]

(a) n variable et $m=n+2$.

(b) $\sum_{i=1}^m f_i^2(x)$ avec $f_i(x) = (x_i - 1)$, $f_{n+1}(x) = \sum_{j=1}^n j(x_j - 1)$ et $f_{n+2}(x) = (f_{n+1}(x))^2$

(c) $x_0 = (x_i)$ avec $x_i = 1 - (i/n)$.(d) $f = 0$ au $(1, \dots, 1)$.

15. Fonction de Wood [14]

(a) $n = 4$

(b) $f(x) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_2)^2 + 90(x_4 - x_3^2)^2 + (1 - x_3)^2 + 10(-2 + x_4 + x_2)^2 + 10^{-1}(-x_4 + x_2)^2$

(c) $x_0 = (-3, -1, -3, -1)$ (d) $f = 0$ au $(1, 1, 1, 1)$.

16. Trigonometric function [26]

(a) n variable et $m = n$.

(b) $\sum_{i=1}^m f_i^2(x)$ avec $f_i(x) = n - \sum_{j=1}^n \cos x_j + i(1 - \cos x_j) - \sin x_j$

(c) $x_0 = (1/n, \dots, 1/n)$ (d) $f = 0$.

17. Linear function rank 1 [33]

(a) n variable et $m \geq n$.

(b) $\sum_{i=1}^m f_i^2(x)$ avec $f_i(x) = i(\sum_{j=1}^n j(x_j)) - 1$

(c) $x_0 = (1, \dots, 1)$.

(d) $f = \frac{m(m-1)}{2(2m+1)}$ à n'importe quel point tel que $\sum_{j=1}^n j(x_j) = \frac{3}{2m+1}$

18. Broyden tridiagonal function [30]

(a) n variable et $m = n+1$.(b) $\sum_{i=1}^m f_i^2(x)$ avec $f_i(x) = (3 - 2x_i)x_i - x_{i-1} - 2x_{i+1} + 1$ où $x_0 = x_{n+1} = 0$ (c) $x_0 = (-1, \dots, -1)$.(d) $f = 0$.

19. Penalty function I [23]

(a) n variable et $m = n$.(b) $\sum_{i=1}^m f_i^2(x)$ avec $f_i(x) = \sqrt{10^{-5}}(1 - x_i)$ pour $i=1, \dots, n$ et $f_i(x) = \sum_{j=1}^n x_j^2 - 1/4$ (c) $x_0 = (1, 2, \dots, j, \dots, n-1, n)$.(d) $f = 2.24997 \dots 10^{-5}$ pour $n=4$ et $f = 7.08765 \dots 10^{-5}$ pour $n=10$. $f_i(x) = x_1 \exp\left(\frac{x_2}{x_3 + 45 + 5i}\right) - y_i$ où y_i sont données par le tableau suivant :

i	1	2	3	4	5	6	7	8
y_i	34780	28610	23650	19630	16370	13720	11540	9744
i	9	10	11	12	13	14	15	16
y_i	8261	7030	6005	5147	4427	3820	3307	2872

REMARQUE

Nous avons trouvé des solutions différentes de celles présentées dans la liste précédente et nous les préciserons ci-après.

RESOLUTION DE SYSTEME D'EQUATIONS NON LINEAIRES

Soit le système suivant :

$$f_i(x) = 0 \quad i = 1, \dots, n. \quad (*)$$

avec $x \in \mathbf{R}^n$ $f_i : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$ de classe C^2 . Posons $f(x) = (f_1(x), f_2(x), \dots, f_n(x))$.

Pour ce domaine nous avons testé les fonctions suivantes (voir ci-dessus):

-Rosenbrock function

-Powell singular function

-Powell badly scaled function

- Wood function
- Helical valley function
- Watson function
- Variably dimensioned function
- Trigonometric function
- Broyden tridiagonal function

RESOLUTION DES MOINDRES CARREES NON LINEAIRES

Soit le problème :

$$\text{Min } \{ f(x) : x \in \mathbf{R}^n \} \quad (**)$$

avec $f(x) = f_1^2(x) + f_2^2(x) + \dots + f_m^2(x)$ où m est variable. Pour cette application nous avons testé les fonctions suivantes :

- Rosenbrock function
- Powell singular function
- Helical valley function
- Freudenstein and Roth function
- Watson function
- Box three-dimensional function
- Jennrich and Saampson function
- Linear function rank 1

MINIMISATION SANS CONTRAINTES

Soit le problème :

$$\text{Min } \{ f(x) : x \in \mathbf{R}^n \} \quad (***)$$

Pour ce domaine nous avons testé les fonctions suivantes :

- Helical valley function
- Biggs EXP6 function
- Powell badly scaled function

- Box three-dimensional function
- Variably dimensioned function
- Watson function
- Gulf research and development function
- Trigonometric function
- Brown badly scaled function
- Extended Rosenbrock function
- Extended Powell singular Function
- Wood function
- Beale function
- Penalty function I.

Le tableau suivant donne les résultats de nos programmes effectués sur Station Sun³. On spécifie dans la première colonne le numéro du problème suivi de(s) domaine(s) d'application.

³ Station Sun SLC du Laboratoire LMI, INSA-Rouen.

N° Pb	n	m	Nb.Iter	Valeur minimum	Norme du gradient	Solution	vecteur initial
1 (D1,2)	2	2	64	0.0000000	0.0000000	(1.00000000, 1.00000000)	(10, 10)
1	2	2	78	0.0000000	0.0000000	(0.99999999, 0.99999999)	(-12, 12)
2 (D2)	2	2	10	48.984253	0.0000000	(11.41277899, -0.89680525)	(0.5, - 2)
2 (D2)	2	2	24	48.984253	0.00000428	(11.41277881, -0.89680525)	(50, - 20)
2 (D2)	2	2	16	0.0000000	0.00047458	(4.99996069, 4.000005517)	(2, 15)
2 (D2)	2	2	47	0.0000000	0.0000000	(4.99999999, 4.000000000)	(200, 400)
2 (D2)	2	2	42	0.0000000	0.0000000	(4.99999999, 4.000000000)	(50, 200)
3 (D1,3)	2	2	3	0.0000000	0.0000000	(1.1363E-6, 87.999980926)	(0, 88) +
3 (D1,3)	2	2	3	0.0000000	0.0000006	(1.1365E-6, 87.9879673325)	(1, 88) +
3	2	2	106	0.0000000	4.562866	(8.4278, 1.18E-5)	(1, 1) F+
3	2	2	106	0.0000000	4.562866	(8.4278, 1.18E-5)	(0, 22) L+
7 (D1,2,3)	3	3	9	0.0000000	0.0000000	(1.0000,0.0000, 0.0000)	(444, 0, 0)
7			10	"	"	"	(800, 0, 0)
7			11	"	"	"	(2000, 0, 0)
7			13				(8000, 0, 0)
7			7	"	"	"	(800, 0, 0)
9 (D3)	6	13	8	0.000088	0.00075	(1,10.2,1.1,5.2,4.3,2.9)	(1,2,1,....,1)
9 (D3)	6	6	30	0.0000374	0.00083	(2.04,12.4,1.3,4.03,2.04,1.3)	(1,2,1,....,1)
9 (D3)	6	13	15	0.306366	0.000027	(400,1.22,1,-0.13,1.22,1.52)	(400,1,....,1) +
9 (D3)	6	13	59	0.0000003	0.000075	(1.02,9.8,1.04,5.14,4.1,3.1)	(2,9,12,3,6,8) M
9 (D3)	6	13	24	0.00868	0.000358	(1.6,26.0,1.1,10.9,1.64,1.1)	(10,20,10,...., 10)
9 (D3)	6	6	26	0.0045	0.00046	(1.6,23.6,1.1,8.7,1.63,1.1)	(10,20,10,...., 10)
9 (D3)	6	3	24	0.0000000	0.000043	(2.69,9.5,1.8,4.5,2.69,1.85)	(1,2,1,....,1)
9 (D3)	6	13	26	0.011	0.000711	(1.6,31.8,1.09,19.05,1.6,1.0)	(15, 30, 15,,15)

NOTES ET COMMENTAIRES

Dans [M-G-H81] le point initial est un multiple de x_0 , nous avons utilisé ce choix particulier pour la quasi-totalité des tests. Lorsque le point de départ est arbitraire nous avons pu obtenir des solutions ne figurant pas dans [M-G-H81]. Les symboles ci-dessus ont les significations suivantes :

M une solution meilleure (voir la valeur minimum f^*)

L local minimum.

+ une solution qui ne figure pas dans [M-G-H81]

F l'algorithme s'arrête avant d'obtenir la solution car le rayon de confiance est trop petit.

Le point qu'on a obtenu est un point stationnaire mais la valeur de f est identique à la valeur de f mentionnée dans l'article [M-G-H81]. Il vient du fait que le rayon de confiance est déjà suffisamment petit alors que le minimum n'est pas trop loin du point stationnaire.

Pour mesurer la sensibilité de l'algorithme par rapport au point de départ initial nous avons adopté le choix suivant : On prend x_s standard précisé dans la liste, puis $10x_s$ puis $100x_s$.

Il est intéressant de tester l'habileté d'un algorithme avec ce choix particulier car si l'algorithme fonctionne avec x_s rien n'assure qu'il fonctionne également avec les multiples de x_s . Il est évident que si la fonction test est invariante par rapport à l'homothétie ce choix est inutile.

Nous avons choisi des tests avec des dimensions plus grandes que celles choisies par Moré & al [M-S83] pour en déduire une idée suffisamment claire sur le comportement de l'algorithme par rapport au choix du point initial.

Le tableau suivant dresse les résultats de nos simulations établies sur Sun.

Name fonction	n	m	Nb.Iter	Valeur optimale	Norme du gradient	Solution	Facteur de x_0	Info
Rosenbrock	2	2	34	4.067e-12	2.750e-05	(0.9999999, 0.999999999)	1.0	1
Rosenbrock	2	2	68	1.857e-12	3.481e-05	(1.0e+0, 1.0e+0)	10.0	1
Rosenbrock	2	2	182	6.261e-12	9.401e-05	(0.9999999, 0.999999999)	100.0	1
Biggsxp6	2	2	9	48.9842	1.807e-05	(11.412, -0.8968)	1.0	1
Freudenstein&al	2	2	23	48.9842	6.567e-04	(11.412, -0.8968)	10.0	1
Freudenstein&al	2	2	41	48.9842	1.34e-05	(11.412, -0.8968)	100.0	1
Biggsxp6	6	6	30	3.739e-05	8.338e-04	2.04,12.4,1.3,4.0,2.04,1.3	1.0	1
Biggsxp6	6	10	40	1.593e-03	3.876e-04	1.8,15.3,1.22,4.5,1.8,1.22	1.0	1
Biggsxp6	6	30	30	3.456e-02	7.275e-04	1.5,21.05,1.0,6.2,1.54,1.07	1.0	1
Biggsxp6	6	40	45	3.767e-02	1.851e-04	1.5,26.8,1.04,10.6,1.51,1.0	1.0	1
Linear Rank1	2	2	2	0.20e+0	4.96e-16	0.52e+0, 0.04e+0 (Cf.Notes)	1.0	1
Linear Rank1	10	10	2	2.142857	5.942e-11		1.0	1
Linear Rank1	30	30	3	7.131	1.092e-08		1.0	1
Linear Rank1	40	40	3	9.629	5.782e-07		1.0	1
Linear Rank1	2	2	4	0.20e+0	6.7e-14	4.1199999, -1.760e+0	10.0	1
Linear Rank1	10	10	5	2.142857	1.97e-9		10.0	1
Linear Rank1	30	30	6	7.131	1.961e-06		10.0	1
Linear Rank1	40	40	6	9.629	1.629e-05		10.0	1
Trigonometric	10	10	1	6.083e-03	6.937e-02		1	0
Trigonometric	30	30	21	1.309e-07	6.907e-04		1	1
Trigonometric	50	50	1	1.397e-03	4.517e-02		1	0

Name fonction	n	m	Nb.Iter	Valeur optimale	Norme du gradient	Solution	Facteur de x_0	Info
Penalty I	3	n+1	11	1.7e-05	1.9e-04	9.5e-2,0.25,0.418	1.0	1
Penalty I	4	n+1	12	2.7e-05	2.9e-05	0.4,0.26,0.1,-3.1e-2	1.0	1
Penalty I	10	n+1	14	8.1e-05	8.6e-05		1.0	1
Penalty I (Cf.Notes)	40	n+1	25	3.7e-05	1.4e-04		1.0	1

NOTES ET COMMENTAIRES

1) La dernière colonne du tableau précédent donne la valeur de l'entier " Info ". Il est égal à 1 si l'algorithme RC-new réussit à trouver la solution pour une fonction donnée et zéro sinon.

2) La fonction Linear Rank1 est révélatrice en ce sens qu'elle illustre clairement l'efficacité de la région de confiance puisqu'elle emploie les directions de Newton dans ce cas particulier.

La région de confiance pour cet exemple est tout l'espace car le modèle quadratique coïncide avec la fonction objectif. D'où, comme on l'a pu vérifié par programme sur cet exemple, que la fonction décroît de la première itération à la seconde d'un facteur de l'ordre de 10^{10} ce qui est, bien sûr, a permet d'obtenir la solution en trois itérations en moyenne. On vérifie aisément que les solutions obtenues sont exactes (voir la liste des fonctions ci-dessus).

3) La comparaison, bien que rudimentaire, de nos résultats obtenues pour le cas de la fonction Penalty I avec les résultats de l'application de NEQ1⁴ et NEQ2¹ de l'article de Moré, Garbow et Hillstrom sont très encourageant.

En particulier, pour $n=40$, l'algorithme NEQ1 echoue dans la recherche de la solution alors que NEQ2 trouve un point assez proche de la solution (voir Table VI et Table VII de l'article [M-G-H81]). Avec l'algorithme RC-new on a pu obtenir la solution. Cette comparaison élémentaire laisse favoriser le nouvel algorithme RC-new mais on est certainement loin d'en déduire une conclusion définitive.

Le tableau suivant présente les résultats de nos programmes effectués sur PC8086. On donne dans la première colonne le numéro de la fonction test suivi de(s) domaine(s) d'application.

N° Pb	n	m	Iter	Temps (sec)	Valeur minimum	Norme du gradient	Solution	Info
1 (D1,2)	2	2	34	2.69	0.0000000	0.0000275	(9.9999E-1, 9.9999E-1)	1
2 (D2)	2	2	10	2.58	48.984253	0.00004862	(11.412775, -0.896805)	1
3 (D1,3)	2	2	82	10.05	0.0000000	0.0249834	(1.09928E-5, 9.0968199)	L
4 (D3)	2	3	47	6.65	0.0000000	0.00000000	(9.99999E+5, 2.0000E-6)	1
5 (D3)	2	3	12	2.64	0.0000002	0.00051132	(2.99988464, 0.499719)	1
6 (D2)	2	10	10	5.60	124.36218	0.0000077	(0.2578252, 0.2578252)	1
8 (D2,3)	3	13	79	80.36	0.0134505	0.7381441	(-1.040, 9.637, 1.0391)	0
8 (D2,3)	3	7	79	80.36	0.00884	0.0097	(-6.4e-01, 6.045, 7.9e-01)	1
9 (D3)	6	13	8		0.0000884	0.0007562	(1.0, 10.2, 1.1, 5.2, 4.3, 2.9)	1
10 (D2,3)	2	31	5	2.31	0.5758098	0.0005672	(-0.4927..., 1.0783...)	1
10 (D2,3)	4	31	13	20.05	0.071326	0.000020	(-0.185, 1.07, -0.43, -0.66)	1
10 (D2,3)	9	31	21	209.7	0.0006696	0.000452	(0, 1, 0, 0.2, 0.18, ..., 6E-3)	1
10 (D2,3)	12	31	27	565	0.0000136	0.000537	(0, -0.1, 0.02, 0.2, ..., 0.14)	1

NOTES

Dans la colonne " info" les symboles ont la signification suivante :

L minimum local, 0 signifie l'algorithme s'arrête (rayon de confiance trop petit) sans aboutir à la solution et info est égal à 1 si tout passe bien.

⁴ NEQ1 et NEQ2 sont des sous-routines pour la résolution des systèmes d'équations non linéaires choisies de la librairie d'optimisation mais qui y sont sous d'autres noms (voir page 37 de [M-G-H81]).

CONCLUSION ET PERSPECTIVES

Dans ce travail, nous avons proposé une nouvelle méthode pour résoudre le problème quadratique local associé à l'algorithme de la région de confiance général. Notre approche diffère de celle de Moré & al[M-S83] et il nous semble, sur la base de nombreux tests de la littérature et des applications concrètes, que notre approche est meilleure en ce sens qu'elle donne constamment une solution (cf. les tableaux ci-dessus) alors que l'approche de Safeguarding se dégrade dans certaines situations critiques. Sur le plan de l'implémentation, notre schéma est facile et nécessite moins de volume calculatoire en chaque itération. Il est évident que le calcul exact du Hessien de la fonction objectif, lorsqu'il n'est pas trop coûteux, améliore considérablement la vitesse de convergence de la méthode.

Signalons que dans l'ensemble des tests numériques le calcul du Hessien est coûteux, pour cela nous avons employé constamment les approximations BFGS. Nous avons également varié le point de départ pour estimer la capacité de l'algorithme d'atteindre le minimum global. Et les tests effectués permettent d'affirmer que d'une manière générale l'algorithme RC s'arrête sur le premier minimum local rencontré si le point initial est loin du minimum global.

Il nous semble que la nouvelle approche est efficace et il y a plusieurs raisons de croire qu'elle va prouver beaucoup d'intérêt et d'utilité pratique. Nous pensons, en perspective, élaborer un algorithme de résolution complète du problème quadratique car il intervient dans beaucoup de domaines d'application (par exemple, constrained eigenvalue problem).

Les premiers résultats obtenus sont très encourageants. Ces résultats peuvent être expliqués par le fait que notre approche est très flexible, i.e., que le critère d'arrêt, dans le cas critique, est plus au moins indépendant de la structure du problème au voisinage de la solution, en plus, il est facile d'améliorer la qualité de la solution en augmentant la tolérance (précision sur la largeur de l'intervalle de certitude final). En plus, il est facile de développer de nouvelles versions qui fonctionnent très bien pour les différents problèmes quadratiques cités au Chapitre I et ceci en ne modifiant que certains paramètres initiaux.

**APPLICATION MDS
(MULTIDIMENSIONAL SCALING PROBLEM)**

1. INTRODUCTION

En travaillant au sens des moindres carrées, le problème MDS (MultiDimensional Scaling problem) consiste à trouver une $p \times n$ matrice $X = [X_1, X_2, \dots, X_n]$ telle que

$$\sigma(X) = \frac{1}{2} \sum_{i,j}^n [W_{ij} \|X_i - X_j\| - \delta_{ij}]^2 \text{ soit le plus petit possible.}$$

où $\|\cdot\|$ désigne la norme Euclidienne sur \mathbb{R}^p , δ_{ij} sont les données du problème telles que :

$$\delta_{ij} = \delta_{ji} > 0 \quad \forall i \neq j; \quad \delta_{ii} = 0 \quad i, j = 1, \dots, n.$$

et $W = (W_{ij})$ une matrice de poids avec $W_{ij} \in \mathbb{R}$. Nous avons choisi, sans perte de généralité, une matrice de poids standard, c'est à dire, vérifie :

$$W_{ij} = W_{ji} = 1 \text{ si } i \neq j \text{ et } W_{ii} = 0 \quad \forall i, j = 1, \dots, n.$$

On notera par $M_{n,p}(\mathbb{R})$ l'ensemble des matrices $n \times p$ à valeurs réelles ($M_{n,p}(\mathbb{R})$ est équivalent à $(\mathbb{R}^p)^n$), par $\Delta = (\delta_{ij})$ la matrice symétrique (dite de dissimilarité) et $d_{ij}(X)$ les semi-normes définies par :

$$d_{ij}(X) = \|X_i - X_j\|$$

$$\text{On voit clairement que } \sigma(X) = \frac{1}{2} \eta^2(X) - \rho(X) + \frac{1}{2} \eta_\delta^2$$

où,

$$\rho(X) = \sum_{i < j} W_{ij} \cdot \delta_{ij} \cdot d_{ij}(X), \quad \eta^2(X) = \sum_{i < j} W_{ij} \cdot d_{ij}^2(X) \text{ et } \eta_\delta^2 = \sum_{i < j} W_{ij} \cdot \delta_{ij}^2$$

Notons que ρ et η^2 sont deux semi-normes sur $M_{n,p}(\mathbb{R})$ et leur noyau commun est :

$$\mathfrak{H} = \{ X \in M_{n,p}(\mathbb{R}) : X_1 = X_2 = \dots = X_n \}$$

En analyse de données, $\mathfrak{W} = \mathfrak{H}^\perp$ est appelé l'espace des matrices centrées. Le sous-espace \mathfrak{W} jouera un rôle important dans la définition des suites construites par l'algorithme de sous gradients. Enfin, signalons que l'on peut toujours centrer une matrice donnée.

Donc, le problème MDS est :

$$\text{Min} \left\{ \frac{1}{2} \eta^2(X) - \rho(X) \quad : X \in M_{n,p}(\mathbb{R}) \right\} \quad (P)$$

Avant de chercher d'autres formulations équivalentes du problème (P), nous donnons un résultat de De Leeuw [De88] permettant d'obtenir des représentations matricielles de (P).

1.2. LEMME

$d_{ij}(X)$ est convexe, positivement homogène et non-négative.

Et on a,

$$\rho(X) = \text{Tr}(X^t B(X) X) \text{ et } \eta^2(X) = \text{Tr}(X^t V X)$$

où,

$$B(X) = (B_{ij}) : B_{ij} = \begin{cases} \frac{-W_{ij} \cdot \delta_{ij}}{d_{ij}(X)} & \text{Si } i \neq j \text{ et } d_{ij}(X) \neq 0 \\ \sum_{k=1}^n \frac{W_{ik} \cdot \delta_{ik}}{d_{ik}(X)} & \text{Si } i=j \text{ et } d_{ik}(X) \neq 0 \quad \forall k=1, \dots, n. \\ 0 & \text{Sinon} \end{cases}$$

$$V = (V_{ij}) : V_{ij} = \begin{cases} -W_{ij} & \text{Si } i \neq j \\ \sum_{k=1}^n W_{ik} & \text{Sinon.} \end{cases}$$

et $\text{Tr}(B)$ désigne la trace de la matrice B. 🍎

Signalons de passage qu'avec une matrice de poids standard on obtient les formules simples suivantes :

$$V_{ij} = -1 \quad \text{si } i \neq j \quad \text{et } V_{ii} = n-1.$$

Ces formules s'écrivent en notation matricielle :

$$V = (I - \frac{1}{n} e \cdot e^t) \text{ avec } e = (1, \dots, 1)^t$$

Cela permet d'en déduire rapidement que :

$$V^+ = \frac{1}{n^2} V \quad (V^+ \text{ est le pseudo-inverse de } V).$$

Comme $\text{Min}\{ \sigma(X) : X \in M_{n,p}(\mathbb{R}) \} = \text{Min}\{ \sigma(tX) : X \in M_{n,p}(\mathbb{R}), t > 0 \} =$

$$\text{Min}_X \text{Min}_{t > 0} \{ 0.5 t^2 \eta^2(X) - t \rho(X) \} = \text{Min}_X \{ -\rho^2(X) / \eta^2(X) : \eta(X) \neq 0 \}$$

alors (P) est équivalent à

$$\text{Max} \left\{ \frac{\rho(X)}{\eta(X)} : \eta(X) \neq 0 \right\} \quad (P_1)$$

On constatera que ce dernier problème est équivalent au problème :

$$\text{Max} \left\{ \rho(X) : \frac{1}{2} \eta^2(X) \leq \frac{1}{2} \right\} \quad (P_2)$$

Enfin, nous allons introduire, à l'aide de la fonction indicatrice, une autre représentation d.c (différence de deux fonctions convexes) du problème initial (P), qui est par nature un problème d.c. On obtient donc le problème d.c suivant :

$$\text{Min} \{ \chi_C(X) - \rho(X) : X \in C \} \quad (P_3)$$

où $C = \{ X : \frac{1}{2} \eta^2(X) \leq \frac{1}{2} \}$ et $\chi_C(X)$ est la fonction indicatrice de C.

2. RESOLUTION DU PROBLEME MDS

Nous allons présenter dans ce paragraphe les différentes méthodes employées pour la résolution du problème MDS. Ces méthodes varient selon la formulation mathématique du problème MDS.

Pour résoudre le problème (P), nous avons donc appliqué :

- i) l'algorithme de la région de confiance sur le problème (P) car les dérivées premières et secondes sont disponibles.
- ii) l'algorithme sous-gradient car le problème (P) est un problème d.c.

L'algorithme primal-dual présenté dans le chapitre III est appliqué au problème (P₂) en utilisant la dualité lagrangienne.

D'autre part, nous avons utilisé l'algorithme sous-gradient avec et sans régularisation pour analyser l'apport de la régularisation, en dehors du fait qu'elle permette de bien définir les suites construites par l'algorithme, sur les performances de l'algorithme sous-gradient.

Enfin, pour dégager une idée suffisamment claire sur les performances de l'algorithme sous-gradient appliqué à différentes décompositions d.c du même problème MDS, nous avons employé l'algorithme de sous-gradient pour résoudre les problèmes (P) et (P₃). Cela nous a conduit à poser la question de la décomposition d.c " optimale ", i.e., une décomposition permettant d'obtenir une très bonne qualité de convergence.

Remarquons que ce problème nous a permis de comparer l'ensemble des méthodes introduites dans cette thèse. Ces implémentations ont conduit à des questions intéressantes qui sont des problèmes ouverts. Parmi ces questions, nous soulignons, en particulier, la question importante du choix optimal du paramètre de régularisation qui permet d'améliorer les performances des algorithmes sous-gradient et peut être de trouver des méthodes compétitives avec celle de Newton.

2.1 RESOLUTION DE (P) AVEC L'ALGORITHME DE SOUS-GRADIENT

On désigne par DCA1 (resp. RDCA1) l'algorithme de sous gradient sans (resp. avec) la technique de la régularisation pour résoudre le problème (P) :

$$\text{Min} \left\{ \frac{1}{2} \eta^2(X) - \rho(X) : X \in \mathbb{R}^{n \times p} \right\} \quad (P)$$

Signalons qu'une étude détaillée de ce problème ainsi que l'algorithme sous-gradient régularisé est faite dans (Pham Dinh.T., Chine.A, Yassine.A, à paraître).

L'algorithme DCA1 consiste à définir deux suites $\{X^k\}$ et $\{Y^k\}$ telles que :

$$X^k \longrightarrow Y^k \in \partial\rho(X^k) \longrightarrow X^{k+1} \in \partial\left(\frac{1}{2}\eta^2\right)^*(Y^k)$$

Un calcul simple donne :

$$X^k \longrightarrow Y^k = B(X^k).X^k \longrightarrow X^{k+1} = V+.B(X^k).X^k = \left(V + \frac{1}{n} e.e^t\right)^{-1}.B(X^k).X^k$$

Donc, pour établir un nouvel itéré X^{k+1} il faut résoudre le système linéaire suivant :

$$\left(V + \frac{1}{n} e.e^t\right).X^{k+1} = B(X^k).X^k$$

Signalons que l'algorithme RDCA1 n'est autre que DCA1 appliqué au problème régularisé (régularisation de Moreau-Yosida) suivant :

$$\text{Inf} \left\{ \left(0.5\gamma\eta^2(X) + \frac{\mu}{2} \|X\|^2 \right) - \left(0.5\gamma\rho(X) + \frac{\mu}{2} \|X\|^2 \right) : X \in \mathbb{R}^{n \times p} \right\}$$

où μ est un réel positif appelé paramètre de régularisation.

D'une manière analogue, on construit deux suites $\{X^k\}$ et $\{Y^k\}$ telles que

$$X^k \longrightarrow Y^k = \gamma.B(X^k).X^k + \mu.X^k \longrightarrow Y^k = \gamma.V.X^{k+1} + \mu.X^{k+1}$$

Donc, pour établir un nouvel itéré X^{k+1} il faut résoudre le système linéaire suivant :

$$(I + \gamma.V).X^{k+1} = (\gamma.B(X^k) + \mu.I)X^k$$

2.1.1. REMARQUES IMPORTANTES

1) Avec la régularisation de Moreau-Yosida, on a une formule explicite de la suite $\{X^k\}$ en fonction de $\{Y^k\}$ (rappelons que $Y^k \in \partial[\rho + \mu\|\cdot\|^2](X^{(k-1)})$ et μ est le réel de régularisation) :

$$X_i^{(k+1)} = \frac{1}{1 + \mu n} \left(Y_i^{(k)} + \mu \sum_{j=1}^n Y_j^{(k)} \right)$$

où X_i et $Y_i \in \mathbb{R}^p$.

D'autre part, les suites $\{X^k\}$ et $\{Y^k\}$ de l'algorithme RDCA1 sont bien définies lorsque $\{X^k\} \in \mathcal{W}$.

En effet, la fonction ρ est finie partout sur \mathcal{W} , c'est une norme sur \mathcal{W} , et donc ces suites sont bien définies (voir le chapitre IV).

Notons qu' on a une sorte de "loi de conservation" de la forme :

$$\sum_{j=1}^n X_i^{(k+1)} = \sum_{j=1}^n Y_j^{(k)}$$

Et en particulier,

$$\sum_{j=1}^n X_i^{(k+1)} - \sum_{j=1}^n Y_j^{(k)} = 0 \quad \forall X \in \mathcal{W}$$

2) Sans la régularisation, on est amené à rajouter une condition supplémentaire sur $\{Y^k\}$ pour que la suite $\{X^k\}$ soit définie.

En effet, la "loi de conservation" devient, dans ce cas, pénalisante et restrictive, c'est à dire, que la suite $\{Y^k\}$ doit être choisie nécessairement dans le sous-espace des matrices centrées pour assurer que la suite $\{X^k\}$ soit définie.

Enfin, signalons que le concept de centrage des matrices étudié dans [Ha89] a permis de trouver une expression simple de la suite $\{X^k\}$.

2.2. RESOLUTION DE (P) AVEC LA REGION DE CONFIANCE

Pour résoudre ce même problème, nous avons appliqué la méthode de la région de confiance avec les deux schémas proposés pour la résolution du problème quadratique local (cf. Chapitre I).

Problème	Dimension	Temps-Safe	Temps-New	Iter-Safe	Iter-New	$\sigma(X^*)$	grad(x*)
dn12	12	10.88	15.30	33	31	13E-8	89E-5
du12	12	6.70	17.63	14	45	77E-9	11E-5
dexp12	12	14.77	11.00	38	32	4.008	96E-5
d12	12	17.68	26.20	63	66	3E-8	97E-5
dc.24	24	24.33	22.57	17	16	0.175480	89E-5
d3.24	24	46.58	46.19	28	28	837.7287	95E-5
du3.24	24	26.58	26.30	15	15	1.138248	98E-5
duc.24	24	74.70	26.05	42	49	0.169885	91E-5
dexp.24	24	44.22	46.36	25	24	5618.098	79E-5
duexp.24	24	51.90	40.20	33	30	3.362287	95E-5

2.3. RESOLUTION DU PROBLEME (P₂)

Puisque $\rho(X)$ et $\eta^2(X) \in \Gamma_0(\mathbb{R}^n)$ sont des semi-normes de noyau commun alors toutes les conditions sont réunies pour appliquer le nouvel algorithme 5.1 présenté au chapitre III.

On désigne par DUAL1 cet algorithme combiné avec la région de confiance pour résoudre le problème intermédiaire (P_λ) des étapes 1 et 3 (cf. algorithme 5.1 du chapitre III).

2.3.1. RESULTATS NUMERIQUES DE DUAL1¹

Problème	Dimension	Nb. Itér	Temps	λ^*	K	$g(\lambda^*)$
dn12	12	81	2.47	12.09644	-73.16198	-12.09644
du12	12	68	2.08	2.348250	-2.757150	-2.348250
dexp12	12	59	1.81	20.82469	-216.8338	-20.82469
d12	12	165	5.00	6.490700	-21.06444	-6.490700
dc.24	24	43	4.78	17.44388	-152.1438	-17.44388
d3.24	24	56	6.16	81.86637	-3351.050	-81.86637
du3.24	24	26	2.97	3.403690	-5.792578	-3.403690
duc.24	24	37	4.12	4.985460	-12.42742	-4.985460
dexp.24	24	44	4.89	179.9289	-16187.14	-179.9289
duexp.24	24	70	7.64	12.97322	-84.15230	-12.97322

2.4. RESOLUTION DU PROBLEME (P₃)

Dans ce paragraphe on désigne par DCA2 (resp. RDCA2) l'algorithme de sous-gradient sans (resp. avec) la technique de la régularisation pour la résolution du problème (P₃) qui est du même type que (P). L'application de RDCA2 à ce problème avec un μ quelconque donne les formules suivantes :

$$X^k \longrightarrow Y^k = (\gamma.B(X^k) + \mu.I)X^k \longrightarrow X^{k+1} \in (\mu.I + \gamma.\partial\chi_C)^*(Y^k)$$

Pour $\mu=1$ on obtient :

$$X^{k+1} = (I + \gamma.\partial\chi_C)^{-1}(Y^k) = \text{Proj}_C(Y^k)$$

i.e.,

$$X^{k+1} = \begin{cases} Y^k & \text{Si } \eta(Y^k) \leq 1 \\ \frac{Y^k}{\eta(Y^k)} & \text{Sinon} \end{cases}$$

D'où

$$x^{k+1} = \begin{cases} \gamma.B(X^k).X^k + X^k & \text{Si } \eta(Y^k) \leq 1 \\ \frac{\gamma.B(X^k).X^k + X^k}{\eta(\gamma.B(X^k).X^k + X^k)} & \text{Sinon} \end{cases}$$

De même façon l'algorithme DCA2 génère deux suites $\{X^k\}$ et $\{Y^k\}$ telles que :

$$X^k \in C \longrightarrow Y^k = B(X^k).X^k \longrightarrow X^{k+1} \in \partial(\chi_C(Y^k))^* \text{ i.e., } Y^k \in \partial(\chi_C)(X^{k+1})$$

donc, $Y^k = V.X^{k+1}$ avec $\gamma \geq 0$ et $\eta^2(X^{k+1}) = 1$.

¹ Implémentations faites sur PC_Olivetti 380.

Donc,

$$X^{k+1} = \frac{V^+.Y^k}{\eta(V^+.Y^k)} = \frac{\frac{1}{n}.B(X^k).X^k}{\eta(\frac{1}{n}.B(X^k).X^k)} = \frac{B(X^k).X^k}{\eta(B(X^k).X^k)}$$

2.4.1. RESULTATS NUMERIQUES ¹

On distingue deux cas selon le choix des paramètres de régularisation γ et μ dans RDCA1 :

- 1) Le premier cas on prend $\gamma = \mu = 1$.
- 2) Le deuxième cas (cas général) on prend $\gamma = 1$ et on varie μ .

1) Cas de $\gamma = \mu = 1$

i) Temps de calcul

Problème	Dimension	DCA1	RDCA1	DCA2	RDCA2
dn12	12	2.58	2.2	2.36	2.53
du12	12	2.08	1.75	1.98	2.20
dexp12	12	1.87	1.60	1.71	1.81
d12	12	5.33	4.56	4.83	5.17
dc.24	24	5.44	4.18	4.84	5.00
d3.24	24	7.36	5.76	6.49	6.70
du3.24	24	3.08	2.47	2.75	2.96
duc.24	24	4.67	3.63	4.17	4.29
dexp.24	24	5.71	4.39	5.11	5.27
duexp.24	24	9.23	7.2	8.08	8.40

ii) Nombre d'itérations

Problème	Dimension	DCA1	RDCA1	DCA2	RDCA2
dn12	12	74	86	74	76
du12	12	60	70	61	66
dexp12	12	53	62	53	54
d12	12	154	180	154	158
dc.24	24	40	43	43	40
d3.24	24	54	59	59	54
du3.24	24	22	25	25	23
duc.24	24	34	37	37	34
dexp.24	24	42	45	45	42
duexp.24	24	68	74	74	68

2) Le cas général

i) Temps de calcul

Problème	Dimension	DCA1	RDCA1	DCA2
dn12	12	9.34	9.89	11.64
du12	12	4.45	4.78	5.77
dexp12	12	3.40	3.68	4.29
d12	12	12.31	13.12	15.38
dc.24	24	11.42	11.54	14.50
d3.24	24	9.12	9.23	11.54
du3.24	24	3.52	3.62	4.45
duc.24	24	7.47	7.52	9.50
dexp.24	24	5.44	5.49	6.86
duexp.24	24	10.60	10.71	13.45
d.30	30	44.27	45.00	59.15
d.40	40	45.64	44.76	65.47
d.50	50	71.19	68.70	105.0
d.60	60	116.0	112.6	172.7
d.70	70	356.0	350.5	468.8

ii) Nombre d'Itérations

Problème	Dimension	DCA1	RDCA1	DCA2
dn12	12	178	189	179
du12	12	85	94	89
dexp12	12	65	70	66
d12	12	235	251	236
dc.24	24	83	85	84
d3.24	24	66	65	67
du3.24	24	25	26	26
duc.24	24	54	55	55
dexp.24	24	39	40	40
duexp.24	24	77	79	78
d.30	30	228	237	240
d.40	40	138	139	156
d.50	50	141	140	164
d.60	60	162	162	189
d.70	70	368	373	378

3. COMPARAISON (EN GRANDE DIMENSION)

Dans la suite, nous exposerons les expérimentations numériques comparatives concernant tous les algorithmes appliqués à la résolution du problème MDS.

On distingue deux cas selon le choix de la matrice de dissimilarité :

cas1: On prend les dissimilarités comme des distances entre les points de l'espace (dans ce cas on sait que la valeur optimale est nulle).

cas 2: Les dissimilarités sont des réels positifs générés aléatoirement (à priori, la valeur optimale est inconnue).

Ci-après les implémentations effectuées sur SUN concernant le problème MDS de grandes tailles ($2 \leq n \leq 600$) ont permis de comparer à bon escient ces différentes méthodes. Les deux colonnes RC-New et RC-Safe des tableaux suivants donnent le nombre d'itérations réussites et entre parenthèses le nombre d'itérations échouées. Le nombre d'itérations échouées (resp. réussites) signifie le nombre de fois que l'algorithme global réduit (resp. augmente) le rayon de confiance pour améliorer la qualité de l'approximation quadratique local (resp. pour déterminer un nouvel itéré proche du minimum).

-Nombre d'itérations (cas 1)

Dimension	RDCA1	DualDC	RDCA2	DCA2	DCA1	RC-New	RC-Safe	$\sigma(X^*)$	grad (X^*)
50	99	97	95	95	95	99 (37)	43 (29)	28E-8	84E-7
100	102	102	100	100	100	39 (19)	38 (23)	11E-6	91E-7
150	104	105	103	103	103	46 (32)	25 (19)	25E-6	98E-7
200	106	107	105	105	105	34 (26)	26 (19)	44E-6	94E-7
400	111	112	110	110	110			17E-5	88E-7
500	112	114	112	112	112	✿	✿	28E-5	99E-7
600	114	115	113	113	113			39E-5	86E-7

-Nombre d'itérations (cas 2)

Dimension	RDCA 1	DualDC	RDCA 2	DCA2	DCA1	RC-New	RC-Safe	$\sigma(X^*)$	grad (X^*)
50	46	46	45	44	44	15 (18)	15 (18)	5.4798	89E-7
100	49	50	48	48	48	15 (20)	15 (20)	21.919	97E-7
150	51	53	51	51	51	16 (20)	16 (20)	49.318	98E-7
200	53	54	52	52	52	16 (19)	16 (19)	87.676	86E-7
400	57	58	56	56	56			350.70	80E-7
500	58	60	58	58	58			547.980	85E-7
600	59	61	59	59	59	✿	✿	711.404	91E-7

Il est très difficile d'avoir une idée claire en ne considérant que le nombre d'itérations tout en ignorant la complexité calculatoire de chaque itération. Pour cette raison on donne ci-après le temps de calcul de chaque méthode appliqué au problème MDS.

-Temps de calcul (cas 1)

Dimensi on	RDCA1	DualDC	RDCA2	DCA2	DCA1	RC-New	RC-Safe
50	3	5	6	6	6	282	104
100	12	15	16	16	18	276	391
150	16	21	25	26	30	1874	862
200	25	33	37	39	42	3216	2194
400	160	193	212	219	231		
500	278	349	376	388	416		
600	403	437	482	501	549		
1000	1503	1984					

-Temps de calcul (cas 2)

Dime- nsion	RDCA1	DualDC	RDCA2	DCA2	DCA1	RC-New	RC-Safe
50	3	3	5	5	5	38	45
100	8	9	10	11	14	133	159
150	12	14	16	16	19	529	568
200	21	27	30	32	38	1615	1674
400	74	95	107	108	123		
500	103	126	141	143	168		
600	298	354	371	382	407		
1000	782	1096	1225				

CONCLUSIONS ET COMMENTAIRES

1. Il n'est pas commode de comparer les méthodes sur la base du nombre d'itérations lorsque ces méthodes sont de nature différente (par exemple, l'une de premier ordre et l'autre de second ordre). Quant au temps de calcul, il aurait été souhaitable de faire tourner l'algorithme plusieurs fois de suite (4 fois par exemple) et prendre la moyenne des temps car le temps de calcul dépend beaucoup de l'état de machine au moment de l'opération. Nous n'avons ici fait tourner qu'une seule fois et prendre le temps donné par ce procédé.
2. S'il est vrai qu'augmenter la taille du problème donne une progression faible en nombre d'itérations (qui devient d'ailleurs constant à partir d'une certaine taille) le temps lui évolue d'une manière exponentielle. Cela dit, on est comme toujours en analyse numérique confronté au problème de fiabilité du temps machine.
3. D'après les tableaux précédents, on remarquera que dans le cas (2) le nombre d'itérations des deux algorithmes est le même.
4. Pour les deux cas, la moyenne du temps de calcul de RC-safe est légèrement plus petit (moyenne = 526 secondes) du temps moyenne de RC-New (668 secondes).
5. L'algorithme de RC-new donne constamment une solution par contre pour certains tests l'algorithme de RC-safe n'aboutit pas.
6. On peut affirmer que si la méthode de la région de confiance termine avec un rayon de confiance pratiquement nul alors le problème posé est délicat.

7. Il est vrai que parfois le temps semble en retard (voire incohérent) dans sa progression par rapport au nombre d'itérations mais cela s'explique par le fait que les évaluations de la fonction objectif et des dérivées semblent faciles. D'une manière générale, bien que le temps semble vouloir suivre les fortes variations du nombre d'itérations mais c'est la progression du temps qui prévaut. Signalons que la précision sur la norme de gradient en x^* n'est pas toujours la même. Enfin, on peut confirmer la règle : à bonnes fonctions, bons résultats !.

On donne ci-après les matrices de dissimilarités utilisées dans nos simulations.

dn12 :

0.000	1.598	2.792	2.928	1.305	2.142
1.598	0.000	1.367	4.147	2.091	3.277
2.792	1.367	0.000	5.506	2.724	4.639
2.928	4.147	5.506	0.000	3.994	0.873
1.305	2.091	2.724	3.994	0.000	3.311
2.142	3.277	4.639	0.873	3.311	0.000

du12 :

0.000	0.333	0.214	0.647	0.933	0.801
0.333	0.000	0.446	0.509	0.827	0.797
0.214	0.446	0.000	0.558	0.800	0.625
0.647	0.509	0.558	0.000	0.318	0.362
0.933	0.827	0.800	0.318	0.000	0.275
0.801	0.797	0.625	0.362	0.275	0.000

d12 :

0.000	0.835	1.500	0.911	2.844	0.132
0.835	0.000	0.869	0.803	2.205	0.704
1.500	0.869	0.000	1.664	1.358	1.376
0.911	0.803	1.664	0.000	2.969	0.861
2.844	2.205	1.358	2.969	0.000	2.275
0.132	0.704	1.376	0.861	2.275	0.000

dexp12 :

0.000	1.909	4.394	2.289	9.658	3.063
1.909	0.000	5.773	2.028	11.256	1.874
4.394	5.773	0.000	3.056	2.292	5.072
2.928	2.028	3.056	0.000	5.587	1.721
9.658	11.256	2.292	5.587	0.000	8.288
3.063	1.874	5.072	1.721	8.288	0.000

dc.24 :

0.000	1.528	1.614	1.607	0.825	1.254	1.508	0.929	1.790	2.060	0.742	2.840
1.528	0.000	2.590	2.032	1.042	2.347	0.239	2.253	3.115	3.288	1.853	3.889
1.614	2.590	0.000	1.101	2.183	0.589	2.555	1.500	1.570	2.494	1.073	3.495
1.607	2.032	1.101	0.000	1.954	1.182	1.993	1.926	2.344	3.107	1.205	4.047
0.825	1.042	2.183	1.954	0.000	1.850	1.036	1.486	2.374	2.449	1.321	3.062
1.254	2.347	0.589	1.182	1.850	0.000	2.315	1.122	1.362	2.188	0.730	3.171
1.508	0.239	2.555	1.993	1.036	2.315	0.000	2.234	3.093	3.278	1.824	3.889
0.929	2.253	1.500	1.926	1.486	1.122	2.234	0.000	1.090	1.415	0.938	2.322
1.790	3.115	1.570	2.344	2.374	1.362	3.093	1.090	0.000	1.241	1.574	2.246
2.060	3.288	2.494	3.107	2.449	2.188	3.278	1.415	1.241	0.000	2.148	1.213
0.742	1.853	1.073	1.205	1.321	0.730	1.824	0.938	1.574	2.148	0.000	3.054
2.840	3.889	3.495	4.047	3.062	3.171	3.889	2.322	2.246	1.213	3.054	0.000

du.24

0.000	26.606	8.699	5.807	33.237	17.112	7.292	21.03	11.87	19.655	4.609	24.442
26.60	0.000	2.118	4.356	0.297	3.592	1.145	22.224	1.294	4.591	18.052	3.861
8.699	2.118	0.000	0.046	6.212	0.291	0.388	4.886	0.010	0.576	2.401	0.861
5.807	4.356	0.046	0.000	10.068	0.487	0.776	3.475	0.188	0.794	0.984	1.370
33.23	0.297	6.212	10.06	0.000	10.364	2.571	41.032	4.671	12.464	31.276	11.158
17.11	3.592	0.291	0.487	10.364	0.000	2.486	2.118	0.266	0.005	2.830	0.034
7.292	1.145	0.388	0.776	2.571	2.486	0.000	13.965	0.367	3.562	6.342	4.039
21.03	22.224	4.886	3.475	41.03	2.118	13.96	0.000	5.894	1.639	1.333	2.495
11.87	1.294	0.010	0.188	4.671	0.266	0.367	5.894	0.000	0.541	3.659	0.682
19.65	4.591	0.576	0.794	12.464	0.005	3.562	1.639	0.541	0.000	3.025	0.014
4.609	18.05	2.401	0.984	31.27	2.830	6.342	1.333	3.659	3.025	0.000	4.804
24.44	3.861	0.861	1.370	11.15	0.034	4.039	2.495	0.682	0.014	4.804	0.000

du3.24 :

0.000	0.012	0.445	0.155	1.710	0.008	0.114	0.007	0.111	0.300	0.023	0.691
0.012	0.000	0.252	0.059	1.026	0.000	0.017	0.000	0.135	0.088	0.007	0.286
0.445	0.252	0.000	0.014	0.127	0.331	0.141	0.259	0.108	0.342	0.544	0.158
0.155	0.059	0.014	0.000	0.297	0.090	0.029	0.062	0.060	0.144	0.189	0.120
1.710	1.026	0.127	0.297	0.000	1.213	0.503	1.090	0.937	0.585	1.542	0.126
0.008	0.000	0.331	0.090	1.213	0.000	0.027	0.000	0.166	0.102	0.003	0.350
0.114	0.017	0.141	0.029	0.503	0.027	0.000	0.025	0.234	0.014	0.048	0.066
0.007	0.000	0.259	0.062	1.090	0.000	0.025	0.000	0.117	0.113	0.009	0.331
0.111	0.135	0.108	0.060	0.937	0.166	0.234	0.117	0.000	0.629	0.329	0.693
0.300	0.088	0.342	0.144	0.585	0.102	0.014	0.113	0.629	0.000	0.095	0.042
0.023	0.007	0.544	0.189	1.542	0.003	0.048	0.009	0.329	0.095	0.000	0.419
0.691	0.286	0.158	0.120	0.126	0.350	0.066	0.331	0.693	0.042	0.419	0.000

duc.24

0.000	0.469	0.404	0.541	0.550	0.444	0.801	0.628	0.739	0.740	0.465	0.602
0.469	0.000	0.432	0.511	0.489	0.453	0.548	0.363	0.473	0.643	0.336	0.728
0.404	0.432	0.000	0.339	0.346	0.574	0.662	0.572	0.628	0.836	0.316	0.505
0.541	0.511	0.339	0.000	0.239	0.706	0.634	0.627	0.632	0.949	0.376	0.472
0.550	0.489	0.346	0.239	0.000	0.697	0.595	0.595	0.594	0.930	0.354	0.510
0.444	0.453	0.574	0.706	0.697	0.000	0.781	0.539	0.690	0.496	0.554	0.838
0.801	0.548	0.662	0.634	0.595	0.781	0.000	0.455	0.302	0.853	0.551	0.906
0.628	0.363	0.572	0.627	0.595	0.539	0.455	0.000	0.356	0.609	0.463	0.872
0.739	0.473	0.628	0.632	0.594	0.690	0.302	0.356	0.000	0.751	0.512	0.900
0.740	0.643	0.836	0.949	0.930	0.496	0.853	0.609	0.751	0.000	0.776	1.123
0.465	0.336	0.316	0.376	0.354	0.554	0.551	0.463	0.512	0.776	0.000	0.609
0.602	0.728	0.505	0.472	0.510	0.838	0.906	0.872	0.900	1.123	0.609	0.000

dexp.24 :

0.000	6.233	10.912	10.711	1.279	10.567	9.410	11.16	2.528	15.37	4.258	7.148
6.233	0.000	67.574	22.363	6.421	2.178	26.168	35.801	14.905	8.412	4.987	15.579
10.912	67.57	0.000	30.655	10.607	113.49	19.854	16.906	5.278	114.45	32.80	24.439
10.71	22.36	30.65	0.000	13.671	20.055	1.624	2.277	8.057	6.804	4.484	1.508
1.279	6.421	10.60	13.671	0.000	11.573	11.886	13.918	2.836	18.832	5.297	9.132
10.56	2.178	113.49	20.05	11.57	0.000	26.123	37.09	2.727	4.871	4.920	14.912
9.410	26.168	19.854	1.624	11.88	26.123	0.000	1.450	5.950	10.379	5.412	1.764
11.16	35.80	16.90	2.277	13.91	37.09	1.450	0.000	6.178	10.025	7.599	2.545
2.528	14.90	5.278	8.057	2.836	2.727	5.950	6.178	0.000	22.136	6.229	5.770
15.37	8.412	114.45	6.804	18.83	4.871	10.37	10.02	22.13	0.000	3.675	6.119
4.258	4.987	32.80	4.484	5.297	4.920	5.412	7.599	6.229	3.675	0.000	3.148
7.148	15.579	24.43	1.508	9.132	14.912	1.764	2.545	5.770	6.119	3.148	0.000

duexp.24 :

0.000	1.789	1.657	1.761	2.231	2.212	1.141	1.340	1.955	1.729	1.846	1.568
1.789	0.000	1.137	1.617	1.407	1.366	2.034	1.536	1.250	1.503	1.486	1.434
1.657	1.137	0.000	1.718	1.595	1.551	1.872	1.522	1.407	1.603	1.613	1.181
1.761	1.617	1.718	0.000	1.490	1.517	1.968	1.316	1.407	1.076	1.129	1.926
2.231	1.407	1.595	1.490	0.000	1.038	2.542	1.727	1.148	1.412	1.321	1.883
2.212	1.366	1.551	1.517	1.038	0.000	2.521	1.726	1.132	1.432	1.344	1.831
1.141	2.034	1.872	1.968	2.542	2.521	0.000	1.508	2.229	1.947	2.084	1.739
1.340	1.536	1.522	1.316	1.727	1.726	1.508	0.000	1.535	1.291	1.383	1.601
1.955	1.250	1.407	1.407	1.148	1.132	2.229	1.535	0.000	1.315	1.255	1.656
1.729	1.503	1.603	1.076	1.412	1.432	1.947	1.291	1.315	0.000	1.078	1.808
1.846	1.486	1.613	1.129	1.321	1.344	2.084	1.383	1.255	1.078	0.000	1.847
1.568	1.434	1.181	1.926	1.883	1.831	1.739	1.601	1.656	1.808	1.847	0.000

**LES APPLICATIONS DES METHODES DE LA REGION
DE CONFIANCE POUR LA MINIMISATION AVEC CONTRAINTES**

Nous avons implémenté la méthode de la région de confiance [B-S287] en employant la méthode QR pour calculer une base du noyau du Jacobien de la fonction contraintes [voir p.39 de [G-M-W81]]. Voici les problèmes que nous avons sélectionné présentés selon le format suivant :

Problème N° et entre [] les dimensions resp. de la fonction objectif et de la fonction contrainte.

- (a) La fonction objectif.
- (b) Les fonctions contraintes.
- (c) La solution s'il y en a.

Problème 1 (n=5, m=3) [n° 3 dans Celis]

$$(a) f(x) = (x_1-1)^2 + (x_1-x_2)^2 + (x_2-x_3)^2 + (x_4-1)^4 + (x_5-1)^4$$

$$(b) c_1(x) = x_1 + x_2^2 + x_3^2 - 2 - 3\sqrt{2}$$

$$c_2(x) = x_2 + x_3^2 + x_4 + 2 - 2\sqrt{2}$$

$$c_3(x) = x_1x_5 - 2$$

$$(c) x^* = (1.1810, 1.3626, 1.4728, 1.6350, 1.6790)$$

Problème 2 (n=5, m=3) [n° 4 dans Celis]

$$(a) f(x) = x_1x_2x_3x_4x_5$$

$$(b) c_1(x) = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 + x_5^2$$

$$c_2(x) = x_2x_3 - 5x_4x_5; c_3(x) = x_1^3 + x_2^3 + 1$$

$$(c) x^* = (-1.7151, 1.5957, 1.8272, -0.7636, -0.7436)$$

Problème 3 (n=2, m=1) [Pillo & Grippo 79]

$$(a) f(x) = \log(1+x_1^2) - x_2$$

$$(b) c(x) = (1+x_1^2)^2 + x_2^2 - 4$$

$$(c) x^* = (0.0, 1.69320)$$

Problème 4 (n=4, m=5) [Pillo & Grippo 79]

(a) $f(x) = -x_1$

(b) $c_1(x) = x_2 - x_1^3 - x_3^2$; $c_2(x) = x_1^2 - x_2 - x_4^2$

(c) $x^* = (1, 1, 0, 0)$

Problème 5 (n=3, m=1) [Pillo & Grippo 79]

(a) $f(x) = 0.01(x_2 - 1)^2 + (x_2 - x_1^2)^2$

(b) $c(x) = x_1 + x_3^2 + 1$

(c) $x^* = (-1, 1, 0.2294E-04)$

Problème 6 (n=5, m=3) [Pillo & Grippo 79]

(a) $f(x) = (x_1 - x_2)^2 + (x_2 + x_3 - 2)^2 + (x_4 - 1)^2 + (x_5 - 1)^2$

(b) $c_1(x) = x_1 + 3x_2$

$c_2(x) = x_3 + x_4 - 2x_5$; $c_3(x) = x_2 - x_5$

(c) $x^* = (-0.76694, 0.2558, 0.6279, -0.1162, 0.2558)$

Problème 7 (n=3, m=1) [n° 1 dans Celis]

(a) $f(x) = (x_1 - 1)^2 + (x_1 - x_2)^2 + (x_2 - x_3)^4$

(b) $c_1(x) = x_1(1 + x_2^2) + x_3^4 - 4 - 3\sqrt{2}$

(c) $x^* = (1.1048, 1.1966, 1.5352)$

Problème 8 (n=5, m=2) [n° 2 dans Celis].

(a) $f(x) = (x_1 - 1)^2 + (x_2 - x_1)^2 + (x_2 - x_3)^2 + (x_4 - 1)^4 + (x_5 - 1)^6$

(b) $c_1(x) = x_4(x_1)^2 + \sin(x_4 - x_5) - 2$ (1.414)

$c_2(x) = x_2 + (x_3)^4(x_4)^2 - 8$ - (1.414)

(c) $x^* = (1.166, 1.1821, 1.3802, 1.5060, 0.6109)$

Considérons maintenant les trois procédures (subroutines) suivantes :

RCCO : Region de Confiance avec COntraintes (cf. Chapitre 2)

VF02AD : la procédure de Powell (cf. Celis & al[C-D-T84]) basée sur SQP (Successive Quadratic Programming¹).

SQPQC : la procédure de Celis& al[C-D-T84] basée également sur l'idée de définir une région de confiance pour les directions mais elle est différente de notre approche.

Ce n'est pas notre intention de comparer ces méthodes rigoureusement mais de dégager une idée sur la nouvelle méthode RCCO. Les tableaux suivants donnent le nombre d'itérations pour les trois méthodes appliquées problèmes 7 et 8.

Le mot "Non" dans les tableaux suivants signifie que le nombre d'itérations est trop grand (i.e., il dépasse 200 itérations) ou bien que l'algorithme s'arrête avant de fournir un minimum, i.e., que le rayon de confiance devient très faible et aucun progrès significatif ne peut être espéré.

Tableau des Itérations. Problème 7.

vecteur initial	(VF02AD)	(SQPQC)	(RCCO)	Observation
(1.5 ,1.5,1.5)	6	16	5	
(1,2,3)	10	17	12	
(1.4,1.5,1.9)	7	16	16	
(11,12,15)	19	24	26	
(2.7,2.9,3.8)	10	19	21	
(27,29,38)	36	31	43	Min différent
(10,10,10)	17	31	24	
(1,1,1)			7	

¹ Cette procédure est disponible dans " Harwell Subroutine Library". See [Po78].

Tableau des Itérations. Problème 8

(vecteur initial)	(VF02AD)	(SQPQC)	(RCCO)	Observation
(10, . . .,10)	Non	22	126	
(2, 2, 2, 2, 2)	10	17	12	
(-1,3,-0.5,-2,-3)	15	11	21	
(-3,-3,3,9,0)	Non	Non	27	
(2.7,2.9,3.8)	21	38	27	
(-1, 8,3,3,0)	Non	31	34	Min différent
(4,3,7,-5,-3)	13	17	11	
(1,.....,1)	15	11	21	

COMMENTAIRES

On ne peut conclure sur la base d'une seule information (ici le nombre d'itérations) tout en ignorant la complexité calculatoire de chaque itération. Néanmoins, on constate que la région de confiance (RCCO) pour la minimisation avec contraintes est compétitive avec les autres algorithmes et donne généralement des résultats satisfaisantes et est le moins sensible au choix du point de départ.

APPLICATIONS DES ALGORITHMES SOUS GRADIENTS ET DE LA STABILITE DE LA DUALITE

Nous donnons dans ce paragraphe la suite des simulations numériques et comparatives concernant les applications établies à la fin du chapitre IV portant sur le calcul des valeurs propres (ou singulières).

Le tableau suivant donne une comparaison (du temps de calcul) entre la méthode de sous gradient régularisée (régularisation de Moreau-Yosida) et celles des méthodes standards les plus rapides de la littérature :

La méthode de puissance itérée standard (pour le calcul de plus grande valeur propre d'une matrice symétrique) qui sera notée POW_ST.

La technique de Linpack combinée avec la puissance itérée que l'on note L_POW.

La technique de Linpack combinée avec celle du quotient de Rayleigh notée L_QRA.

Enfin, on désigne par DUAL_DC l'algorithme 5.1 du chapitre III combiné avec la méthode sous-gradient employée pour résoudre les problèmes d.c intermédiaires (cf. algorithme 5.1).

La matrice test est celle de Hilbert, i.e., $A = (a_{ij})$ où $a_{ij} = 1/(i+j-1)$ et le programme a été tourné sur PC_Olivetti_286.

Dimension de la matrice	L_QRA	POW_ST	L_POW	DUAL_DC
10	0.7	0.7	0.4	1.7 secondes
20	2.9	3.4	1.5	3.2
30	8.5	8.1	3.8	5.8
40	18.6	15	7.3	9.5
50	35	24.7	12.4	13.2
60	75	36.6	18.9	18.5
70	117.2	51.2	28	24.7

Tableau de comparaison de quelques méthodes standards de calcul de la plus grande valeur propre d'une matrice symétrique avec la nouvelle méthode DUAL-DC.

On voit qu'à partir de la taille $n \geq 50$, la nouvelle méthode (DUAL-DC) devient la plus rapide par rapport aux autres méthodes. Par contre, si $n \leq 50$, la méthode L_POW est la plus rapide. Cependant, si on compare les méthodes DUAL-DC et L-POW qui sont, les plus performantes, on constate que la différence de temps de calcul entre ces méthodes n'est pas significative pour de petite taille (i.e., $n \leq 50$).

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [Le44] **Levenberg.K**, "A method for solution of certain problems in least squares"
Appl.Math 2, 1944.pp164-168.
- [Ma63] **Marquardt.D.**, " An algorithm for least squares estimation of nonlinear parameters"
SIAM.J.Appl.Math 11.1963.pp431-441.
- [FG65] **Forsythe.G.E, Golub.G.H** " On the stationary values of a second-degree polynomial on the unit sphere " J.SIAM.13.1965.
- [G-Q-T66] **Goldfeld.S.M, Quandt.R.E, Trotter.H.F** " Maximization by quadratic hill-climbing " Econometrica 34, 1966.pp541-551.
- [Mo66] **Moreau.J.J.**, " Fonctionnelles convexes". Séminaire sur les équations aux dérivées partielles II, Collège de France (1966-1967).
- [Lan69] **Lancaster.P.** " Theory of matrices ". Acad.Press.N.Y.1969.
- [Ne69] **Newman P.** " Some properties of concave functions " J.Econ Th. Vol 1 pp291-314.
- [Ro70] **Rockafellar.R.T** " Convex Analysis" Princeton Univ. Princeton.1970.
- [Br71] **Brent.R.P** "Algorithms for finding zeros and extrema of functions without calculations derivatives" Report, Stanford Univ. 1971.
- [Re71] **Reinsh.H.C** "Smoothing by spline functions II ", Numer Math 16,1971 p451. See also Numer Math 10.1967 (p177).
- [Br73] **Brezis.H**, " Opérateurs maximaux monotones et semi-groupes de contractions dans les Hilbert.", North Holland, Amsterdam. (1973).
- [He73] **Hebden.M.D** " An algorithm for minization using exact second derivatives" Atomic Energy report T.P.515.Harwell, England.1973.
- [E&a174] **Ekeland I. & Temam R.**, "Analyse convexe et problèmes variationnelles" Dunod, Paris, 1974.
- [Po75] **Powell.M.J.D** "Convergence properties of a class of minimization algorithms " Nonlinear Programming 2. Ed Academic Press.1975.
- [Th75] **Thomas.S.W** "Sequential estimation techniques for quasi-Newton algorithms" Ph.D. Cornell Univ.Ithaca, New york.
- [Au76] **Auslender. A.**, "Optimisation, méthodes numériques" Ed.Masson, Paris.1976.
- [Deb76] **Debreu.G** " Least convex utility functions " J.Math Econ. vol 3.1976 p121-129.
- [Ph76] **Pham Dinh. T**, " Méthodes directes et indirectes pour le calcul du maximum d'une forme quadratique définie positive sur la boule unité de la norme du maximum. Colloque national d'Analyse Numérique (Port Bail). 1976.

- [Ro76] **Rockafellar.R.T**, "Monotone operators and the proximal point algorithm " *SIAM.J.Control.Opt.*14 (1976), pp 877-898.
- [Ro76] **Rockafellar.R.T**, "Augmented lagrangien and application of the proximal point algorithm in convex programming" *Math.Oper.Res*, 1 (1976) pp 97-116.
- [C-M-S-W79] **Cline.A, Moler.C, Stewart.G, Wilkinson.J.H** "An estimate for the condition number of a matrix" *SIAM.J. Numer. Analysis* 16. 368-375.1979.
- [G-P79] **Grippo and Pillo**. " " in *SIAM.J.COMP & Optimization*.1979.
- [Tol79] **Tolland.J.F**, " A duality principle for non-convex optimization and calculus of variations " *Arch.Rational.Mech.Analysis*,71 (1979).
- [C2-80] **T.F.Colemaan, A.R.Conn** "Second order conditions for an exact penalty function" *Math Prog* 19.1980.p178-185.
- [Cr80] **Crouzeix.J.P** " Conditions for convexity of quasi-convex functions " in *Math.Oper.Res* vol 5 n°1.1980. pp120-125.
- [Fl80] **Fletcher.R** "Practical methods of Optimization ". Vol.1. Unconstrained Opt. Ed. Wiley.1980.
- [Va80] **Vardi.A** "Trust region strategies for unc & constrained" Ph.D Cornell Univ., Ithaca NY 1980.
- [Ga81] **Gay.D.M** "Computing optimal locally constrained steps" *SIAM.J.Sc.Stat.Comp*.2 June 1981.pp186.
- [Ga81] **Gander.W** "Least squares with a quadratic constraints" *Numer.Math*.36. 1981.
- [C2-V81] **Cline.A, Conn.A.R, Van Loan.C** "Generalizing the Linpack condition estimator" Cornell Univ report 81-462. Ithaca, N.Y.
- [So81] **Sorensen.D.C** " Trust region methods for unconstrained minimization" *Proceeding of the Advanced Research Inst of Nonli.Optimiz*.1981.M.J.D.Powell. Ed.Acad Press.
- [Gi86] **Gilbert J.C**. "Thèse de l'Univ Paris VI.1986.
- [G-M-W 81] **Gill.P.E & W.Murray & M.H.Wright** " Practical Optimization ". Ed. Academic Press London 1981.
- [M-G-H81] **Moré.J.J, B.Garbow, K.Hillstrom** "Testing unconstrained optimization software " *ACM.Trans.Math.Soft*.March 1981.pp17-41.
- [Ph81] **Pham Dinh. T**, " Contribution à la théorie de normes et ses applications à l'analyse numérique. Thèse de Doctorat d'Etat dès Sciences, USMG, Grenoble 1981.
- [Sc81] **Schaible.S**, " A survey of fractional programming, generalized concavity in optimization and economics. Ed. S.Schaible & al. Acad. Press.New.York (1981),pp417-440.

- [C-L-P2.82] **Chamberlain.R.M, Powell.M.J.D, Lemaréchal.C, Pederson.H.C**
 " The watchdog technique for forcing convergence in algorithms for constrained"
 Math.Prog.Study16.1982.pp1-17.
- [Cr82] **Crouzeix.J.P** " Continuity and differentiability properties of quasi-convex functions
 " in Generalized concavity in Optimization & Economics. Ed by Schaible & al. Academic
 Press 1982. pp207-226.
- [HU82] **Hiriart-Urruty.J.B,** " ϵ -subdifferential calculus, in convex analysis and
 optimization " Research Notes in Mathematics Series 57, Pitmann 1982, 43-92.
- [Fl82] **Fletcher.R** " Second order correction for nondifferentiable optimization" in G.A
 Watson, Ed Numer Analysis. 1982.pp85-114.
- [So82] **Sorensen.D.C** " Newton's method with a model trust-region modification" Report
 ANL-80-106, Argonne, Illinois(1980). See also SIAM.J.Numer Anal.19.409-426.1982.
- [D-S83] **Dennis.J.E, Schnabel.R.B** " Numerical methods for unconstrained optimization
 and nonlinear equations" Printice-Hall.1983.
- [Ga83] **Gay.D.M** "A trust region approach to linearly constrained optimization"
 Proceeding of the Dundee Biennial conference on Num Analysis. 1983.
- [Ga83b] **Gay.D.M** " Algorithm 611 : Subroutines for unconstrained minimization using a
 model/trust region Approach " ACM.Trans.Maths.Soft.Vol.9.1983.
- [G-V83] **Golub.G.H, Van Loan.C.F** "Matrix computations" 1983.Ed. J.Hopkins.
- [Mi83] **Minoux.M.** " Programmation Mathématique. Théorie et algorithmes" Dunod.1983
- [Mo83] **Moré.J.J** "Recent developments in algorithm and software for Trust Region
 methods" Math Progr, The state of the Art. p258-287. 1983.
- [M-S83] **Moré.J.J & Sorensen.D.C** " Computing a trust region step"
 SIAM.J.Sc.Stat.Comput.4.1983.pp553-572.
- [C-D-T84] **M.R.Celis, J.E.Dennis,R.A.Tapia** "A trust region strategy for equality
 constrained optimization" Tech Report 84-1. Rice Univ.Houston. Sept 1984. See
 SIAM.Numer.Optimiz. 1985.pp 71-82.
- [C-S84] **Colemann T.F.D & Sorensen.D.C.,** "A note on the computation of an
 orthonormal basis for the null space of a matrix" Math.Programing 29.1984. pp 234-242.
- [El84] **Ellaia, R.** Thèse de l'Université Paul Sabatier, 1984.
- [H-S-N84] **Hiriart-Urruty.J.B, Strodiot.J.J, Nguyen.V.H** "Generalized Hessian
 matrix and second order optimality conditions for problems for $C^{1,1}$ Data" Appl.Math.Opti.
 11 (1984).
- [Ph84] **Pham Dinh. T.,** " Convergence of subgradient method for computing the bound
 norm of matrices. Linear Alg. and Its Appl. 62 (1984), 163-182.

- [D-V85] Dem'yanov F.V and Vasil'ev V.L, " Nondifférentiable optimization "Opt.Software, Inc.New York.1985.
- [HU85] Hiriart Urruty, J.B. " Generalized differentiability, duality and optimization for problems dealing with differences of convex functions." Lect. Notes in Econ. & Maths, 1985.
- [N-O85] Nocedal.J, Overton.M.L "Projected Hessian updating algorithms fo nonlinear constrained Optimization" SIAM.J.Numer.Anal 22, Oct. 1985.pp821.
- [Ph85] Pham Dinh. T., " Algorithmes de calcul d'une forme quadratique sur la boule unité de la norme du maximum. Numer.Math.45.1985,377-440.
- [Ph85] Pham Dinh. T., " Algorithmes pour la résolution d'une classe de problèmes d'optimisation non convexe. Méthodes de sous-gradients. Journées de Fermat. Mathématiques pour l'optimisation, Toulouse, 1985.
- [Va85] Vardi.A " A trust algorithm for equality constrained minimization : convergene properties & implementations " SIAM.J.Numer.Anal 22.1985.
- [S2-B85] G.A.Schultz, R.B.Schnabel & R.H.Byrd., "A family of trust region based algorithms for unconstrained minimization with strong global convergence properties" SIAM.J.Numer.Anal 22.1985.
- [Yu85] Yuan.Y " On the superlinear convergence of a trust region for nonsmooth optimization " Math Progr 31.1985.pp269-285.
- [Be86] Benacer. R., " Contribution à l'étude des algorithmes de l'optimisation non convexe et non différentiable", Thèse de Doctorat de Mathématiques. Univ. Grenoble 1986.
- [Ph86] Pham Dinh. T., "Algorithms for solving a class of non convex optimisation problems. Methods of subgradients. Fermat Days 85. Mathematics for Optimisation, J.B.Hiriart Urruty (ed.), Elsevier Science PublishersB.V. North Holland, 1986.
- [Fr87] Fraley.C " Solution of nonlinear least-squares problems" Thesis Ph.D. July. 1987. Stanford.Univ.
- [S2-B87] R.B.Schnabel, G.A.Schultz, R.H.Byrd. "Trust region for nonlinear optimization " SIAM.J.Numer.Anal.24.1987.
- [S2-B88] R.B.Schnabel, G.A.Schultz, R.H.Byrd. "Approximate solution of the trust region problem by minimization over tho-dimensional subspaces" Math Programming 40. 1988. p247-263.
- [P-E88] Pham Dinh.T.& El Bernoussi S."Duality in difference of convex functions.Subgradient mtehods." International series of Numer Math vol.84.1988.
- [G2-M89] Gander.W, Golub.G.H, Matt.U.V " A constrained Eingenvalue Problem" Linear Algebra & Appl.114. 1989 pp815-839.

- [Ha89] **Hadri. K.**, Thèse de l'Université de Grenoble II. 1989.
- [HU89] **Hiriart Urruty, J.B.**, " How to regularize a difference of two functions ?"
Séminaire d'Analyse Numérique, Université Paul Sabatier, Toulouse 1989.
- [Ph89] **Pham Dinh.T** "Numerical method for minimizing the Hermitian quadratic on the unit sphere" To appear in SIAM.J.An.&Appl 1989.
- [H-L90] **Hiriart Urruty J.B., Lemaréchal. C.**, " Testing necessary and sufficient conditions for global optimality in the problem of maximizing a convex quadratic over a convex polyhedron" Seminar of Numerical Analysis, Univ.Paul Sabatier, Toulouse (1990).
- [Le90] **Lemaréchal. C.**, " Non differentiable optimization handbook for operation research".Eds. Todd, North Holland (1990).
- [Gü91] **Güler.O.**, "On the convergence of th proximal algorithms for convex minimization "
SIAM.Control &Optimization,29,1991.pp403-419.
- [H&a] **Hiriart-Urruty, J.B and Ellaia, R.**, " The conjugate of the difference of convex function." J.Opt.Theory & Appli.
- [De88] **De Leeuw.J.** " Convergence of majorization method for multidimensional scaling"
J.of Classification.5.1988.pp163-180.
- [To88] **P.L.Toint** " Global convergence of a class of trust region Methods for nonconvex Minimization in Hilbert Space" IMA.J.Numer.Anal.8.1988.pp231-252.
- [HU89] **Hiriart-Urruty.J.B.**, "From convex to non convex optimization" Part I :
Necessary and sufficient conditions for global optimality. In Nonsmooth Optimization and
Related Topics, Ed. Clarke.F.H., Demyanov.V.F., Giannessi.F. editor Plenum (1989), pp
219-239.
- [Ya89] **Yassine.A.** Thèse de l'Université de Grenoble. Grenoble I.(1989).
- [Ph90] **Pham Dinh.T** " Algorithmes de sous gradients en optimisation d.c." Rapport de
recherche LMI INSA Rouen.(1990).
- [C-P-Y91] **A.Chine, Pham Dinh Tao, A. Yassine** "Algorithmes de sous gradients pour
la résolution du problème d'analyse multidimensionnelle des tableaux de dissimilarité." A
paraître.
- [Ch91] **A.Chine** private communication. 1991.
- [Ph91] **Pham Dinh.T** " Some new results in non convex optimization." 6th French-
Germain Conference on Optimization. Lambrecht, June 2-8 1991. Submitted for publication.

REFERENCES COMPLEMENTAIRES RECENTES

Conn.A.R, Gould.M, P.L.Toint "Testing a class of methods"

Math.Com 50.1988.pp399

Conn.A.R, Gould.M, P.L.Toint "Global convergence of trust region algorithms for optimization with simple bounds" SIAM.J.Numer.An.25.1988. pp433. See also erratum in SIAM.J.Numer An.26.1989.pp764.

Powell.M.J.D, Yuan.Y "A trust region algorithm for equality constrained optimization" Report DAMTP 1986.Univ. Cambridge.U.K.

Yuan.Y "An a subproblem of trust region algorithms for unconstrained optimization" Math.Progr 47.1990.pp 53-63.

Matt.U.V "A constrained Eigenvalue Problem" Diploma Thesis. Abteilung für Informatik, ETH Zürich.1988.

TABLE DES MATIERES

	page
0. INTRODUCTION GENERALE	0
1. CHAPITRE 0	
1. Eléments d'analyse convexe	3
2. La dualité lié à une famille de perturbations	8
3. Notations	10
2 . CHAPITRE I	11
PARTIE 1 " ETUDE ET ALGORITHMES DE RESOLUTION D'UNE CLASSE DE PROBLEMES QUADRATIQUES "	
1. Introduction	15
2. Classification de problèmes quadratiques	15
3. Etude du problème (Q).	21
4. Résolution de l'équation non linéaire $\phi(\mu) = r$.	24
5. Méthodes de résolution de (Q).	29
Nouvel algorithme	31
Algorithme de Safeguarding	33
6. Technique de Linpack.	35
PARTIE 2 " STABILITE EN OPTIMISATION QUADRATIQUE NON CONVEXE "	
1. Préliminaires	41
2. Caractérisation du problème dual.	43
3. Propriétés de la fonction objectif.	45
4. Résolution du problème dual	48
CHAPITRE II	
PARTIE 1 " METHODES DE LA REGION DE CONFIANCE SANS CONTRAINTES "	
1. Introduction générale	53
2. Algorithme générale de la région de confiance.	55
3. Calcul d'une approximation du Hessien.	57
4. Mise à jour du rayon de confiance.	57
5. Théorie de convergence	58

PARTIE 2 " METHODES DE LA REGION DE CONFIANCE AVEC CONTRAINTES "

1. Introduction	63
2. Position du problème	63
3. Notations	64
4. Système d'optimalité	64
5. Algorithme de la région de confiance	65
6. Théorie de convergence	70
7. Techniques d'implémentation	71

CHAPITRE III 75

PARTIE 1" LA STABILITE DE LA DUALITE LAGRANGIENNE EN OPTIMISATION NON CONVEXE "

Introduction	79
1. Position du problème	80
2. Préliminaires	80
3. Etude du problème (P_λ)	81
4. Stabilité d'un problème non convexe	83
5. Algorithme primal-dual de résolution de (P)	86
5. Cas de semi-normes	88
6. Applications	90

PARTIE 2 " LA STABILITE LAGRANGIENNE VIA PERTURBATIONS EN OPTIMISATION NON CONVEXE "

1. Préliminaires	93
2. Stabilité d'une classe de problèmes non convexes	95
3. Stabilité et algorithmes primal-dual.	97

CHAPITRE IV

1. Dualité en optimisation d.c.	101
2. Algorithmes de sous gradients	104
3. Existence et propriétés des suites ..	106
4. Evaluation du volume de calcul..	108
5. Techniques de régularisation en d.c.	108
6. Régularisation de Moreau-Yosida	115
7. Relations entre les alg. de sous gradients et les alg. proximaux	116
8. Algorithmes de sous gradients en Optimisation quadratique	116

Conclusions	117
9. Applications (Recherche de valeurs propres et singulières)	120

CHAPITRE V

1. Simulations numériques de fluides incompressibles	123
2. Les applications de la région de confiance sans contraintes	133
3. Application MDS	147
- Algorithmes de sous gradients régularisé	149
- Comparaison	155
4. Les applications de la région de confiance sans contraintes	162
5. Application de sous gradients et de la stabilité de la dualité pour la recherche de valeurs propres et comparaison.	167

Cette thèse est consacrée à l'étude des algorithmes en optimisation non convexe, à l'implémentation des codes à l'usage industriel et aux simulations numériques dans les problèmes de grande taille.

L'étude des problèmes quadratiques (convexes ou non convexes) sous contraintes linéaires et quadratiques ainsi que celle des méthodes de région de confiance pour minimisation d'une fonction de classe C^2 , font l'objet de deux premiers chapitres.

Les chapitres 3 et 4 sont réservés à l'optimisation non convexe (classification, dualité, stabilité et les algorithmes de sous gradients de résolution).

Enfin, les simulations numériques dans les problèmes concrets de grande taille sont présentées et commentées dans le dernier chapitre.

ABSTRACT

The aim of the Thesis is to study some non convex optimization algorithms, to describe an implementation, devoted to industrial application, and numerical simulations of concrete problems of large scale.

The study of quadratic problem (convex or not convex) with linear or quadratic constraints as well as constrained or unconstrained trust region methods to minimize a smooth function is the main topic of first two chapters.

Chapters 3 & 4 are devoted to non convex optimization (classification, duality, stability and sub-gradient algorithms).

Finally, numerical simulations of large scale concrete problems are presented and commented in the last chapter.

Mots clés :

Optimisation d.c, dualité Lagrangienne, stabilité, sous-gradient, fonctions conjugués.