3.3 Algorithmes d'optimisation sans contrainte

Soit $f \in C(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$. On suppose qu'il existe $\bar{\boldsymbol{x}} \in \mathbb{R}^n$ tel que $f(\bar{\boldsymbol{x}}) = \inf_{\mathbb{R}^n} f$.
On cherche à calculer $\bar{\boldsymbol{x}}$ (si f est de classe C^1, on a nécessairement $\nabla f(\bar{\boldsymbol{x}}) = 0$). On va donc maintenant développer des algorithmes (ou méthodes de calcul) du point $\bar{\boldsymbol{x}}$ qui réalise le minimum de f. Il existe deux grandes classes de méthodes :

- Les méthodes dites "directes" ou bien "de descente", qui cherchent à construire une suite minimisante, c.à.d. une suite $(\boldsymbol{x}^{(k)})_{k\in\mathbb{N}}$ telle que :
$$f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) \leq f(\boldsymbol{x}^{(k)}),$$
$$\boldsymbol{x}^{(k)} \to \bar{\boldsymbol{x}} \text{ quand } k \to +\infty.$$
- Les méthodes basées sur l'équation d'Euler, qui consistent à chercher une solution de l'équation (dite d'Euler) $\nabla f(\boldsymbol{x}) = 0$ (ces méthodes nécessitent donc que f soit dérivable).

3.3.1 Méthodes de descente

Définition 3.17. *Soit $f \in C(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$.*

1. *Soit $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$, on dit que $\boldsymbol{w} \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ est une direction de descente en $\boldsymbol{x}$ s'il existe $\alpha_0 > 0$ tel que*
$$f(\boldsymbol{x} + \alpha\boldsymbol{w}) \leq f(\boldsymbol{x}), \ \ \forall \alpha \in [0, \alpha_0]$$
2. *Soit $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$, on dit que $w \in \mathbb{R}^n \setminus \{\boldsymbol{0}\}$ est une direction de descente stricte en $\boldsymbol{x}$ si s'il existe $\alpha_0 > 0$ tel que*
$$f(\boldsymbol{x} + \alpha\boldsymbol{w}) < f(\boldsymbol{x}), \ \ \forall \alpha \in]0, \alpha_0].$$
3. *Une "méthode de descente" pour la recherche de $\bar{\boldsymbol{x}}$ tel que $f(\bar{\boldsymbol{x}}) = \inf_{\mathbb{R}^n} f$ consiste à construire une suite $(x_k)_{k\in\mathbb{N}}$ de la manière suivante :*
   (a) *Initialisation : $\boldsymbol{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n$;*
   (b) *Itération k : on suppose $\boldsymbol{x}^{(0)}, \ldots, \boldsymbol{x}^{(k)}$ connus ($k \geq 0$) ;*
      i. *On cherche $\boldsymbol{w}^{(k)}$ direction de descente stricte en $\boldsymbol{x}^{(k)}$*
      ii. *On prend $\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_k \boldsymbol{w}^{(k)}$ avec $\alpha_k > 0$ "bien choisi".*

Proposition 3.18 (Caractérisation des directions de descente)**.** *Soient $f \in C^1(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$, $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ et $\boldsymbol{w} \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$; alors*

1. *si $\boldsymbol{w}$ direction de descente en $\boldsymbol{x}$ alors $\boldsymbol{w} \cdot \nabla f(\boldsymbol{x}) \leq 0$*
2. *si $\nabla f(\boldsymbol{x}) \neq 0$ alors $w = -\nabla f(\boldsymbol{x})$ est une direction de descente stricte en $\boldsymbol{x}$.*

DÉMONSTRATION –
Soit $\boldsymbol{w} \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ une direction de descente en $\boldsymbol{x}$: alors par définition,
$$\exists \alpha_0 > 0 \text{ tel que } f(\boldsymbol{x} + \alpha\boldsymbol{w}) \leq f(\boldsymbol{w}), \ \ \forall \alpha \in [0, \alpha_0].$$
Soit φ la fonction de $\mathbb{R}$ dans $\mathbb{R}$ définie par : $\varphi(\alpha) = f(\boldsymbol{x}+\alpha\boldsymbol{w})$. On a $\varphi \in C^1(\mathbb{R}, \mathbb{R})$ et $\varphi'(\alpha) = \nabla f(\boldsymbol{x}+\alpha\boldsymbol{w})\cdot\boldsymbol{w}$.
Comme $\boldsymbol{w}$ est une direction de descente, on peut écrire : $\varphi(\alpha) \leq \varphi(0), \forall \alpha \in [0, \alpha_0]$, et donc
$$\forall \alpha \in]0, \alpha_0[, \quad \frac{\varphi(\alpha) - \varphi(0)}{\alpha} \leq 0;$$
en passant à la limite lorsque α tend vers 0, on déduit que $\varphi'(0) \leq 0$, c.à.d. $\nabla f(\boldsymbol{x}) \cdot \boldsymbol{w} \leq 0$.

2. Soit $\boldsymbol{w} = -\nabla f(\boldsymbol{x}) \neq 0$. On veut montrer qu'il existe $\alpha_0 > 0$ tel que si $\alpha \in]0, \alpha_0]$ alors $f(\boldsymbol{x} + \alpha \boldsymbol{w}) < f(\boldsymbol{x})$ ou encore que $\varphi(\alpha) < \varphi(0)$ où φ est la fonction définie en 1 ci-dessus. On a : $\varphi'(0) = \nabla f(\boldsymbol{x}) \cdot \boldsymbol{w} = -|\nabla f(\boldsymbol{x})|^2 < 0$. Comme φ' est continue, il existe $\alpha_0 > 0$ tel que si $\alpha \in [0, \alpha_0]$ alors $\varphi'(\alpha) < 0$. Si $\alpha \in]0, \alpha_0]$ alors $\varphi(\alpha) - \varphi(0) = \int_0^\alpha \varphi'(t) dt < 0$, et on a donc bien $\varphi(\alpha) < \varphi(0)$ pour tout $\alpha \in]0, \alpha_0]$, ce qui prouve que w est une direction de descente stricte en x.

■

Algorithme du gradient à pas fixe Soient $f \in C^1(E, \mathbb{R})$ et $E = \mathbb{R}^n$. On se donne $\alpha > 0$.

$$\left\{ \begin{array}{ll} \text{Initialisation :} & \boldsymbol{x}^{(0)} \in E, \\ \text{Itération } k : & \boldsymbol{x}^{(k)} \text{ connu, } (k \geq 0) \\ & \boldsymbol{w}^{(k)} = -\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}), \\ & \boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha \boldsymbol{w}^{(k)}. \end{array} \right. \tag{3.20}$$

Théorème 3.19 (Convergence du gradient à pas fixe)**.** *Soient $E = \mathbb{R}^n$ et $f \in C^1(E, \mathbb{R})$ vérifiant les hypothèses 3.10a et 3.10b de la proposition 3.13. La fonction f est donc strictement convexe et croissante à l'infini, et admet donc un unique minimum. De plus, si $0 < \alpha < \dfrac{2\alpha}{M^2}$ alors la suite $(\boldsymbol{x}^{(k)})_{k \in \mathbb{N}}$ construite par* (3.20) *converge vers $\bar{\boldsymbol{x}}$ lorsque $k \to +\infty$.*

DÉMONSTRATION –
Montrons la convergence de la suite construite par l'algorithme de gradient à pas fixe en nous ramenant à un algorithme de point fixe. On pose $h(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x} - \alpha \nabla f(\boldsymbol{x})$. L'algorithme du gradient à pas fixe est alors un algorithme de point fixe pour h.

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} - \alpha \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) = h(\boldsymbol{x}^{(k)}).$$

Grâce au théorème 2.8 page 154, on sait que h est strictement contractante si

$$0 < \alpha < \frac{2\alpha}{M^2}.$$

Donc la suite $(x^{(k)})_{k \in \mathbb{N}}$ converge vers l'unique point fixe $\bar{\boldsymbol{x}}$ de h, caractérisé par

$$\bar{\boldsymbol{x}} = h(\bar{\boldsymbol{x}}) = \bar{\boldsymbol{x}} - \alpha \nabla f(\bar{\boldsymbol{x}})$$

On a donc $\nabla f(\bar{\boldsymbol{x}}) = 0$, et, comme f est strictement convexe, $f(\bar{\boldsymbol{x}}) = \inf_E f$. ■

Algorithme du gradient à pas optimal L'idée de l'algorithme du gradient à pas optimal est d'essayer de calculer à chaque itération le paramètre qui minimise la fonction dans la direction de descente donnée par le gradient. Soient $f \in C^1(E, \mathbb{R})$ et $E = \mathbb{R}^n$, cet algorithme s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \text{Initialisation :} & \boldsymbol{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n. \\ \text{Itération } n : & \boldsymbol{x}^{(k)} \text{ connu.} \\ & \text{On calcule } \boldsymbol{w}^{(k)} = -\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}). \\ & \text{On choisit } \alpha_k \geq 0 \text{ tel que} \\ & \quad f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_k \boldsymbol{w}^{(k)}) \leq f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha \boldsymbol{w}^{(k)}) \ \ \forall \alpha \geq 0. \\ & \text{On pose } \boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_k \boldsymbol{w}^{(k)}. \end{array} \right. \tag{3.21}$$

Les questions auxquelles on doit répondre pour s'assurer du bien fondé de ce nouvel algorithme sont les suivantes :

1. Existe–t–il α_k tel que $f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_k \boldsymbol{w}^{(k)}) \leq f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha \boldsymbol{w}^{(k)}), \forall \alpha \geq 0$?
2. Comment calcule–t'on α_k ?
3. La suite $(\boldsymbol{x}^{(k)})_{k \in \mathbb{N}}$ construite par l'algorithme converge–t–elle ?

La réponse aux questions 1. et 3. est apportée par le théorème suivant :

Théorème 3.20 (Convergence du gradient à pas optimal)**.**
Soit $f \in C^1(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$ telle que $f(\boldsymbol{x}) \to +\infty$ quand $|\boldsymbol{x}| \to +\infty$. Alors :

1. *La suite $(\boldsymbol{x}^{(k)})_{k\in\mathbb{N}}$ est bien définie par (3.21). On choisit $\alpha_k > 0$ tel que $f(\boldsymbol{x}^{(k)}+\alpha_k \boldsymbol{w}^{(k)}) \le f(x_k+\alpha \boldsymbol{w}^{(k)})$ $\forall \alpha \ge 0$ (α_k existe mais n'est pas nécessairement unique).*
2. *La suite $(\boldsymbol{x}^{(k)})_{k\in\mathbb{N}}$ est bornée et si $(\boldsymbol{x}^{(k_\ell)})_{\ell\in\mathbb{N}}$ est une sous suite convergente, i.e. $x^{(k_\ell)} \to x$ lorsque $\ell \to +\infty$, on a nécessairement $\nabla f(\boldsymbol{x}) = 0$. De plus si f est convexe on a $f(x) = \inf_{\mathbb{R}^n} f$*
3. *Si f est strictement convexe on a alors $\boldsymbol{x}^{(k)} \to \bar{\boldsymbol{x}}$ quand $k \to +\infty$, avec $f(\bar{\boldsymbol{x}}) = \inf_{\mathbb{R}^n} f$*

La démonstration de ce théorème fait l'objet de l'exercice 113. On en donne ici les idées principales.

1. On utilise l'hypothèse $f(\boldsymbol{x}) \to +\infty$ quand $|\boldsymbol{x}| \to +\infty$ pour montrer que la suite $(\boldsymbol{x}^{(k)})_{k\in\mathbb{N}}$ construite par (3.21) existe : en effet, à $\boldsymbol{x}^{(k)}$ connu,
   1er cas : si $\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) = 0$, alors $\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)}$ et donc $\boldsymbol{x}^{(p)} = \boldsymbol{x}^{(k)}$ $\forall p \ge k$,
   2ème cas : si $\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) \ne 0$, alors $\boldsymbol{w}^{(k)} = \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ est une direction de descente stricte.
   Dans ce deuxième cas, il existe donc α_0 tel que
   $$f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha \boldsymbol{w}^{(k)}) < f(\boldsymbol{x}^{(k)}),\ \forall \alpha \in]0, \alpha_0]. \tag{3.22}$$
   De plus, comme $\boldsymbol{w}^{(k)} \ne 0$, $|\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha \boldsymbol{w}^{(k)}| \to +\infty$ quand $\alpha \to +\infty$ et donc $f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha \boldsymbol{w}^{(k)}) \longrightarrow +\infty$ quand $\alpha \to +\infty$. Il existe donc $M > 0$ tel que si $\alpha > M$ alors $f(x_k + \alpha \boldsymbol{w}^{(k)}) \ge f(\boldsymbol{x}^{(k)})$. On a donc :
   $$\inf_{\alpha \in \mathbb{R}_+^*} f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha \boldsymbol{w}^{(k)}) = \inf_{\alpha \in [0,M]} f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha \boldsymbol{w}^{(k)}).$$
   Comme $[0, M]$ est compact, il existe $\alpha_k \in [0, M]$ tel que $f(x_k + \alpha_k \boldsymbol{w}^{(k)}) = \inf_{\alpha\in[0,M]} f(x_k + \alpha \boldsymbol{w}^{(k)})$. De plus on a grâce à (3.22) que $\alpha_k > 0$.
2. Le point 2. découle du fait que la suite $(f(\boldsymbol{x}^{(k)}))_{k\in\mathbb{N}}$ est décroissante, donc la suite $(\boldsymbol{x}^{(k)})_{k\in\mathbb{N}}$ est bornée (car $f(\boldsymbol{x}) \to +\infty$ quand $|\boldsymbol{x}| \to +\infty$). On montre ensuite que si $\boldsymbol{x}^{(k_\ell)} \to \boldsymbol{x}$ lorsque $\ell \to +\infty$ alors $\nabla f(\boldsymbol{x}) = 0$ (ceci est plus difficile, les étapes sont détaillées dans l'exercice 113).

Reste la question du calcul de α_k, qui est le paramètre optimal dans la direction de descente $\boldsymbol{w}^{(k)}$, c.à.d. le nombre réel qui réalise le minimum de la fonction φ de $\mathbb{R}_+$ dans $\mathbb{R}$ définie par : $\varphi(\alpha) = f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha \boldsymbol{w}^{(k)})$. Comme $\alpha_k > 0$ et $\varphi(\alpha_k) \le \varphi(\alpha)$ pour tout $\alpha \in \mathbb{R}_+$, on a nécessairement
$$\varphi'(\alpha_k) = \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_k \boldsymbol{w}^{(k)}) \cdot \boldsymbol{w}^{(k)} = 0.$$
Cette équation donne en général le moyen de calculer α_k.
Considérons par exemple le cas (important) d'une fonctionnelle quadratique, *i.e.* $f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2} A\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{x} - \boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{x}$, A étant une matrice symétrique définie positive. Alors $\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) = A\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{b}$, et donc
$$\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_k\, \boldsymbol{w}^{(k)}) \cdot \boldsymbol{w}^{(k)} = (A\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_k A\boldsymbol{w}^{(k)} - \boldsymbol{b}) \cdot \boldsymbol{w}^{(k)} = 0.$$
On a ainsi dans ce cas une expression explicite de α_k, avec $\boldsymbol{r}^{(k)} = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}^{(k)}$,
$$\alpha_k = \frac{(\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}^{(k)}) \cdot \boldsymbol{w}^{(k)}}{A\boldsymbol{w}^{(k)} \cdot \boldsymbol{w}^{(k)}} = \frac{\boldsymbol{r}^{(k)} \cdot \boldsymbol{w}^{(k)}}{A\boldsymbol{w}^{(k)} \cdot \boldsymbol{w}^{(k)}} \tag{3.23}$$
Remarquons que $A\boldsymbol{w}^{(k)} \cdot \boldsymbol{w}^{(k)} \ne 0$ (car A est symétrique définie positive).
Dans le cas d'une fonction f générale, on n'a pas en général de formule explicite pour α_k. On peut par exemple le calculer en cherchant le zéro de f' par la méthode de la sécante ou la méthode de Newton…

L'algorithme du gradient à pas optimal est donc une méthode de minimisation dont on a prouvé la convergence. Cependant, cette convergence est lente (en général linéaire), et de plus, l'algorithme nécessite le calcul du paramètre α_k optimal.

Algorithme du gradient à pas variable Dans ce nouvel algorithme, on ne prend pas forcément le paramètre optimal pour α, mais on lui permet d'être variable d'une itération à l'autre. L'algorithme s'écrit :

$$\begin{cases} \text{Initialisation :} & x^{(0)} \in \mathbb{R}^n. \\ \text{Itération :} & \text{On suppose } x^{(k)} \text{ connu ; soit } \boldsymbol{w}^{(k)} = -\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) \text{ où } : \boldsymbol{w}^{(k)} \neq 0 \\ & (\text{si } \boldsymbol{w}^{(k)} = 0 \text{ l'algorithme s'arrête}). \\ & \text{On prend } \alpha_k > 0 \text{ tel que } f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_k \boldsymbol{w}^{(k)}) < f(x_k). \\ & \text{On pose } \boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_k \boldsymbol{w}^{(k)}. \end{cases} \tag{3.24}$$

Théorème 3.21 (Convergence du gradient à pas variable)**.**
Soit $f \in C^1(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$ une fonction telle que $f(x) \to +\infty$ quand $|x| \to +\infty$, alors :

1. *On peut définir une suite $(x^{(k)})_{k\in\mathbb{N}}$ par (3.24).*
2. *La suite $(\boldsymbol{x}^{(k)})_{k\in\mathbb{N}}$ est bornée. Si $\boldsymbol{x}^{(k_\ell)} \to \boldsymbol{x}$ quand $\ell \to +\infty$ et si $\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k_\ell)}) \to 0$ quand $\ell \to +\infty$ alors $\nabla f(\boldsymbol{x}) = 0$. Si de plus f est convexe on a $f(\boldsymbol{x}) = \inf_{\mathbb{R}^n} f$*
3. *Si $\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) \to 0$ quand $k \to +\infty$ et si f est strictement convexe alors $\boldsymbol{x}^{(k)} \to \bar{\boldsymbol{x}}$ et $f(\bar{\boldsymbol{x}}) = \inf_{\mathbb{R}^n} f$.*

La démonstration s'effectue facilement à partir de la démonstration du théorème précédent : reprendre en l'adaptant l'exercice 113.

3.3.2 Algorithme du gradient conjugué

La méthode du gradient conjugué a été découverte en 1952 par Hestenes et Steifel pour la minimisation de fonctions quadratiques, c'est-à-dire de fonctions de la forme

$$f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2} A\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{x} - b \cdot \boldsymbol{x},$$

où $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ est une matrice symétrique définie positive et $b \in \mathbb{R}^n$. On rappelle (voir le paragraphe 3.2.2) que $f(\bar{\boldsymbol{x}}) = \inf_{\mathbb{R}^n} f \Leftrightarrow A\bar{\boldsymbol{x}} = b$.
L'idée de la méthode du gradient conjugué est basée sur la remarque suivante : supposons qu'on sache construire n vecteurs (les directions de descente) $\boldsymbol{w}^{(0)}, \boldsymbol{w}^{(1)}, \ldots, \boldsymbol{w}^{(n-1)}$ libres et tels que $\boldsymbol{r}^{(n)} \cdot \boldsymbol{w}^{(p)} = 0$ pour tout $p < n$. On a alors $\boldsymbol{r}^{(n)} = \boldsymbol{0}$: en effet la famille $(\boldsymbol{w}^{(0)}, \boldsymbol{w}^{(1)}, \ldots, \boldsymbol{w}^{(n-1)})$ engendre $\mathbb{R}^n$; le vecteur $\boldsymbol{r}^{(n)}$ est alors orthogonal à tous les vecteurs d'une $\mathbb{R}^n$, et il est donc nul.
Pour obtenir une famille libre de directions de descente stricte, on va construire les vecteurs $\boldsymbol{w}^{(0)}$, $\boldsymbol{w}^{(1)}$, ..., $\boldsymbol{w}^{(n-1)}$ de manière à ce qu'ils soient orthogonaux pour le produit scalaire induit par A. Nous allons voir que ce choix marche (presque) magnifiquement bien. Mais avant d'expliquer pourquoi, écrivons une méthode de descente à pas optimal pour la minimisation de f, en supposant les directions de descente $\boldsymbol{w}^{(0)}$ connues.
On part de $\boldsymbol{x}^{(0)}$ dans $\mathbb{R}^n$ donné ; à l'itération k, on suppose que $\boldsymbol{r}^{(k)} = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}^{(k)} \neq \boldsymbol{0}$ (sinon on a $\boldsymbol{x}^{(k)} = \bar{\boldsymbol{x}}$ et on a fini). On calcule le paramètre α_k optimal dans la direction $\boldsymbol{w}^{(k)}$ par la formule (3.23). Et on calcule ensuite le nouvel itéré :

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_k \boldsymbol{w}^{(k)}.$$

Notons que $\boldsymbol{r}^{(k+1)} = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}^{(k+1)}$ et donc

$$\boldsymbol{r}^{(k+1)} = \boldsymbol{r}^{(k)} - \alpha_k A\boldsymbol{w}^{(k)}. \tag{3.25}$$

De plus, par définition du paramètre optimal α_k, on a $\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) \cdot \boldsymbol{w}^{(k)} = 0$ et donc

$$\boldsymbol{r}^{(k+1)} \cdot \boldsymbol{w}^{(k)} = 0 \tag{3.26}$$

Ces deux dernières propriétés sont importantes pour montrer la convergence de la méthode. Mais il nous faut maintenant choisir les vecteurs $\boldsymbol{w}^{(k)}$ qui soient des directions de descente strictes et qui forment une famille libre. A l'étape 0, il est naturel de choisir la direction opposée du gradient :

$$\boldsymbol{w}^{(0)} = -\nabla f(\boldsymbol{x}^{(0)}) = \boldsymbol{r}^{(0)}.$$

A l'étape $k \geq 1$, on choisit la direction de descente $\boldsymbol{w}^{(k)}$ comme combinaison linéaire de $\boldsymbol{r}^{(k)}$ et de $\boldsymbol{w}^{(k-1)}$, de manière à ce que $\boldsymbol{w}^{(k)}$ soit orthogonal à $\boldsymbol{w}^{(k-1)}$ pour le produit scalaire associé à la matrice A.

$$\boldsymbol{w}^{(0)} = \boldsymbol{r}^{(0)}, \tag{3.27a}$$

$$\boldsymbol{w}^{(k)} = \boldsymbol{r}^{(k)} + \lambda_k \boldsymbol{w}^{(k-1)}, \text{ avec } \boldsymbol{w}^{(k)} \cdot A\boldsymbol{w}^{(k-1)} = 0, \text{ pour } k \geq 1. \tag{3.27b}$$

La contrainte d'orthogonalité $A\boldsymbol{w}^{(k)} \cdot \boldsymbol{w}^{(k-1)} = 0$ impose le choix du paramètre λ_k suivant :

$$\lambda_k = -\frac{\boldsymbol{r}^{(k)} \cdot A\boldsymbol{w}^{(k-1)}}{\boldsymbol{w}^{(k-1)} \cdot A\boldsymbol{w}^{(k-1)}}.$$

Remarquons que si $\boldsymbol{r}^{(k)} \neq \boldsymbol{0}$ alors $\boldsymbol{w}^{(k)} \cdot \boldsymbol{r}^{(k)} > 0$ car $\boldsymbol{w}^{(k)} \cdot \boldsymbol{r}^{(k)} = \boldsymbol{r}^{(k)} \cdot \boldsymbol{r}^{(k)}$ en raison de la propriété (3.26). On a donc $\boldsymbol{w}^{(k)} \cdot \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) < 0$, ce qui montre que $\boldsymbol{w}^{(k)}$ est bien une direction de descente stricte.
On a donc (on a déjà fait ce calcul pour obtenir la formule (3.23) du paramètre optimal)

$$\alpha_k = \frac{\boldsymbol{r}^{(k)} \cdot \boldsymbol{w}^{(k)}}{A\boldsymbol{w}^{(k)} \cdot \boldsymbol{w}^{(k)}} = \frac{\boldsymbol{r}^{(k)} \cdot \boldsymbol{r}^{(k)}}{A\boldsymbol{w}^{(k)} \cdot \boldsymbol{w}^{(k)}}. \tag{3.28}$$

On suppose que $\boldsymbol{r}^{(k)} \neq \boldsymbol{0}$ pour tout $k \in \{0, \ldots, n-1\}$. Montrons alors par récurrence que pour $k = 1, \ldots, n-1$, on a :

$$\begin{array}{ll} (i)_k & \boldsymbol{r}^{(k)} \cdot \boldsymbol{w}^{(p)} = 0 \text{ si } p < k, \\ (ii)_k & \boldsymbol{r}^{(k)} \cdot \boldsymbol{r}^{(p)} = 0 \text{ si } p < k, \\ (iii)_k & A\boldsymbol{w}^{(k)} \cdot \boldsymbol{w}^{(p)} = 0 \text{ si } p < k, \end{array}$$

Ces relations sont vérifiées pour $k = 1$. Supposons qu'elles le sont jusqu'au rang k, et montrons qu'elles le sont au rang $k+1$.

$(i)_{k+1}$: Pour $p = k$, la relation $(i)_{k+1}$ est verifiée au rang $k+1$ grâce à (3.26) ; pour $p < k$, on a

$$\boldsymbol{r}^{(k+1)} \cdot \boldsymbol{w}^{(p)} = \boldsymbol{r}^{(k)} \cdot \boldsymbol{w}^{(p)} - \alpha_k A\boldsymbol{w}^{(k)} \cdot \boldsymbol{w}^{(p)} = 0$$

par (3.25) et hypothèse de récurrence.

$(ii)_{k+1}$: Par les relations (3.27b) et $(i)_{k+1}$, on a, pour $p \leq k$,

$$\boldsymbol{r}^{(k+1)} \cdot \boldsymbol{r}^{(p)} = \boldsymbol{r}^{(k+1)} \cdot (\boldsymbol{w}^{(p)} - \lambda_p \boldsymbol{w}^{(p-1)}) = 0.$$

$(iii)_{k+1}$: Pour $p = k$ la relation $(iii)_{k+1}$ est vérifiée grâce au choix de λ_{k+1}.
Pour $p < k$, on remarque que, avec (3.27b) et $(iii)_k$

$$\boldsymbol{w}^{(k+1)} \cdot A\boldsymbol{w}^{(p)} = (\boldsymbol{r}^{(k+1)} + \lambda_{k+1}\boldsymbol{w}^{(k)}) \cdot A\boldsymbol{w}^{(p)} = \boldsymbol{r}^{(k+1)} \cdot A\boldsymbol{w}^{(p)}.$$

On utilise maintenant (3.25) et $(i)_{k+1}$ pour obtenir

$$\boldsymbol{w}^{(k+1)} \cdot A\boldsymbol{w}^{(p)} = \frac{1}{\alpha_p}\boldsymbol{r}^{(k+1)} \cdot (\boldsymbol{r}^{(p)} - \boldsymbol{r}^{(p+1)}) = 0.$$

On a ainsi démontré la convergence de la méthode du gradient conjugué.

Mettons sous forme algorithmique les opérations que nous avons exposées, pour obtenir l'algorithme du gradient conjugué.

Algorithme 3.22 (Méthode du gradient conjugué)**.**

1. **Initialisation**
Soit $\boldsymbol{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n$, *et soit* $\boldsymbol{r}^{(0)} = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}^{(0)} = -\nabla f(\boldsymbol{x}^{(0)})$.

   Si $\boldsymbol{r}^{(0)} = \boldsymbol{0}$, *alors* $A\boldsymbol{x}^{(0)} = \boldsymbol{b}$ *et donc* $\boldsymbol{x}^{(0)} = \bar{\boldsymbol{x}}$, *auquel cas l'algorithme s'arrête.*
   Sinon, on pose
$$\boldsymbol{w}^{(0)} = \boldsymbol{r}^{(0)},$$
   et on choisit α_0 *optimal dans la direction* $\boldsymbol{w}^{(0)}$. *On pose alors*
$$\boldsymbol{x}^{(1)} = \boldsymbol{x}^{(0)} + \alpha_0 \boldsymbol{w}^{(0)}.$$

2. **Itération** k, $1 \leq k \leq n-1$ *; on suppose* $\boldsymbol{x}^{(0)}, \ldots, \boldsymbol{x}^{(k)}$ *et* $\boldsymbol{w}^{(0)}, \ldots, \boldsymbol{w}^{(k-1)}$ *connus et on pose*
$$\boldsymbol{r}^{(k)} = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}^{(k)}.$$
   Si $\boldsymbol{r}^{(k)} = \boldsymbol{0}$, *alors* $A\boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{b}$ *et donc* $\boldsymbol{x}^{(k)} = \bar{\boldsymbol{x}}$, *auquel cas l'algorithme s'arrête.*
   Sinon on pose
$$\boldsymbol{w}^{(k)} = \boldsymbol{r}^{(k)} + \lambda_{k-1}\boldsymbol{w}^{(k-1)},$$
   avec λ_{k-1} *tel que*
$$\boldsymbol{w}^{(k)} \cdot A\boldsymbol{w}^{(k-1)} = 0,$$
   et on choisit α_k *optimal dans la direction* $\boldsymbol{w}^{(k)}$, *donné par* (3.23). *On pose alors*
$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k \boldsymbol{w}^{(k)}.$$

Nous avons démontré plus haut la convergence de l'algorithme, résultat que nous énonçons dans le théorème suivant.

Théorème 3.23 (Convergence de l'algorithme du gradient conjugué)**.** *Soit* A *une symétrique définie positive,* $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^n$ *et* $f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}A\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{x}$. *L'algorithme* (3.22) *définit une suite* $(\boldsymbol{x}^{(k)})_{k=0,\ldots,p}$ *avec* $p \leq n$ *telle que* $\boldsymbol{x}^{(p)} = \bar{\boldsymbol{x}}$ *avec* $A\bar{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{b}$. *On obtient donc la solution exacte de la solution du système linéaire* $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ *en moins de* n *itérations.*

Efficacité de la méthode du gradient conjugué On peut calculer le nombre d'opérations nécessaires pour calculer $\bar{\boldsymbol{x}}$ (c.à.d. pour calculer $\boldsymbol{x}^{(n)}$, sauf dans le cas miraculeux où $\boldsymbol{x}^{(k)} = \bar{\boldsymbol{x}}$ pour $k < n$) et montrer (exercice) que :
$$N_{gc} = 2n^3 + \mathcal{O}(n^2).$$
On rappelle que le nombre d'opérations pour Choleski est $\frac{n^3}{6}$ donc la méthode du gradient conjugué n'est pas intéressante comme méthode directe car elle demande 12 fois plus d'opérations que Choleski.
On peut alors se demander si la méthode est intéressante comme méthode itérative, c.à.d. si on peut espérer que $\boldsymbol{x}^{(k)}$ soit "proche de $\bar{\boldsymbol{x}}$" pour "$k \ll n$". Malheureusement, si la dimension n du système est grande, ceci n'est pas le cas en raison de l'accumulation des erreurs d'arrondi. Il est même possible de devoir effectuer plus de n itérations pour se rapprocher de $\bar{\boldsymbol{x}}$. Cependant, dans les années 80, des chercheurs se sont rendus compte que ce défaut pouvait être corrigé à condition d'utiliser un "préconditionnement". Donnons par exemple le principe du préconditionnement dit de "Choleski incomplet".

Méthode du gradient conjugué préconditionné par Choleski incomplet On commence par calculer une "approximation" de la matrice de Choleski de A c.à.d. qu'on cherche L triangulaire inférieure inversible telle que A soit "proche" de LL^t, en un sens à définir. Si on pose $y = L^t\boldsymbol{x}$, alors le système $A\boldsymbol{x} = b$ peut aussi s'écrire $L^{-1}A(L^t)^{-1}y = L^{-1}b$, et le système $(L^t)^{-1}y = \boldsymbol{x}$ est facile à résoudre car L^t est triangulaire supérieure. Soit $B \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ définie par $B = L^{-1}A(L^t)^{-1}$, alors

$$B^t = ((L^t)^{-1})^t A^t (L^{-1})^t = L^{-1}A(L^t)^{-1} = B$$

et donc B est symétrique. De plus,

$$B\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{x} = L^{-1}A(L^t)^{-1}\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{x} = A(L^t)^{-1}\boldsymbol{x} \cdot (L^t)^{-1}\boldsymbol{x},$$

et donc $B\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{x} > 0$ si $\boldsymbol{x} \neq 0$. La matrice B est donc symétrique définie positive. On peut donc appliquer l'algorithme du gradient conjugué à la recherche du minimum de la fonction f définie par

$$f(\boldsymbol{y}) = \frac{1}{2}B\boldsymbol{y} \cdot \boldsymbol{y} - L^{-1}b \cdot \boldsymbol{y}.$$

On en déduit l'expression de la suite $(\boldsymbol{y}^{(k)})_{k\in\mathbb{N}}$ et donc $(\boldsymbol{x}^{(k)})_{k\in\mathbb{N}}$.
On peut alors montrer (voir exercice 120) que l'algorithme du gradient conjugué préconditionné ainsi obtenu peut s'écrire directement pour la suite $(\boldsymbol{x}^{(k)})_{k\in\mathbb{N}}$, de la manière suivante :

Itération k On pose $\boldsymbol{r}^{(k)} = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}^{(k)}$,
on calcule $\boldsymbol{s}^{(k)}$ solution de $LL^t\boldsymbol{s}^{(k)} = \boldsymbol{r}^{(k)}$.
On pose alors $\lambda_{k-1} = \dfrac{\boldsymbol{s}^{(k)} \cdot \boldsymbol{r}^{(k)}}{\boldsymbol{s}^{(k-1)} \cdot \boldsymbol{r}^{(k-1)}}$ et $\boldsymbol{w}^{(k)} = \boldsymbol{s}^{(k)} + \lambda_{k-1}\boldsymbol{w}^{(k-1)}$.
Le paramètre optimal α_k a pour expression :

$$\alpha_k = \frac{\boldsymbol{s}^{(k)} \cdot \boldsymbol{r}^{(k)}}{A\boldsymbol{w}^{(k)} \cdot \boldsymbol{w}^{(k)}},$$

et on pose alors $\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_k\boldsymbol{w}^{(k)}$.
Le choix de la matrice L peut se faire par exemple dans le cas d'une matrice creuse, en effectuant une factorisation "LL^t" incomplète, qui consiste à ne remplir que certaines diagonales de la matrice L pendant la factorisation, et laisser les autres à 0.

Méthode du gradient conjugué pour une fonction non quadratique. On peut généraliser le principe de l'algorithme du gradient conjugué à une fonction f non quadratique. Pour cela, on reprend le même algorithme que (3.22), mais on adapte le calcul de λ_{k-1} et α_k.

Itération n **:**
A $\boldsymbol{x}^{(0)}, \ldots, \boldsymbol{x}^{(k)}$ et $w^{(0)}, \ldots, w^{(k-1)}$ connus, on calcule $\boldsymbol{r}^{(k)} = -\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$.
Si $\boldsymbol{r}^{(k)} = 0$ alors $\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) = 0$ auquel cas l'algorithme s'arrête (le point $\boldsymbol{x}^{(k)}$ est un point critique de f et il minimise f si f est convexe).
Si $\boldsymbol{r}^{(k)} \neq 0$, on pose $\boldsymbol{w}^{(k)} = \boldsymbol{r}^{(k)} + \lambda_{k-1}w^{(k-1)}$ où λ_{k-1} peut être choisi de différentes manières :

1ère méthode (Fletcher–Reeves)

$$\lambda_{k-1} = \frac{\boldsymbol{r}^{(k)} \cdot \boldsymbol{r}^{(k)}}{\boldsymbol{r}^{(k-1)} \cdot \boldsymbol{r}^{(k-1)}},$$

2ème méthode (Polak–Ribière)

$$\lambda_{k-1} = \frac{(\boldsymbol{r}^{(k)} - \boldsymbol{r}^{(k-1)}) \cdot \boldsymbol{r}^{(k)}}{\boldsymbol{r}^{(k-1)} \cdot \boldsymbol{r}^{(k-1)}}.$$

On pose alors $\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_k \boldsymbol{w}^{(k)}$, où α_k est choisi, si possible, optimal dans la direction $\boldsymbol{w}^{(k)}$.
La démonstration de la convergence de l'algorithme de Polak–Ribière fait l'objet de l'exercice 122 page 241.

En résumé, la méthode du gradient conjugué est très efficace dans le cas d'une fonction quadratique à condition de l'utiliser avec préconditionnement. Dans le cas d'une fonction non quadratique, le préconditionnement ne se trouve pas de manière naturelle et il vaut donc mieux réserver cette méthode dans le cas "n petit".

3.3.3 Méthodes de Newton et Quasi–Newton

Soit $f \in C^2(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$ et $g = \nabla f \in C^1(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^n)$. On a dans ce cas :

$$f(\boldsymbol{x}) = \inf_{\mathbb{R}^n} f \Rightarrow g(\boldsymbol{x}) = 0.$$

Si de plus f est convexe alors on a $g(\boldsymbol{x}) = 0 \Rightarrow f(\boldsymbol{x}) = \inf_{\mathbb{R}^n} f$. Dans ce cas d'équivalence, on peut employer la méthode de Newton pour minimiser f en appliquant l'algorithme de Newton pour chercher un zéro de $g = \nabla f$. On a $D(\nabla f) = H_f$ où $H_f(\boldsymbol{x})$ est la matrice hessienne de f en $\boldsymbol{x}$. La méthode de Newton s'écrit dans ce cas :

$$\begin{cases} \text{Initialisation} & \boldsymbol{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n, \\ \text{Itération } k & H_f(\boldsymbol{x}^{(k)})(\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)}) = -\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}). \end{cases} \tag{3.30}$$

Remarque 3.24. La méthode de Newton pour minimiser une fonction f convexe est une méthode de descente. En effet, si $H_f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ est inversible, on a $\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)} = [H_f(\boldsymbol{x}^{(k)})]^{-1}(-\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}))$ soit encore $\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_k \boldsymbol{w}^{(k)}$ où $\alpha_k = 1$ et $w^{(k)} = [H_f(\boldsymbol{x}^{(k)})]^{-1}(-\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}))$. Si f est convexe, H_f est une matrice symétrique positive (déjà vu). Comme on suppose $H_f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ inversible par hypothèse, la matrice $H_f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ est donc symétrique définie positive.
On en déduit que $w^{(k)} = 0$ si $\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) = 0$ et, si $\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) \neq 0$,

$$-\boldsymbol{w}^{(k)} \cdot \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) = [H_f(\boldsymbol{x}^{(k)})]^{-1} \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) \cdot \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) > 0,$$

ce qui est une condition suffisante pour que $\boldsymbol{w}^{(k)}$ soit une direction de descente stricte.
La méthode de Newton est donc une méthode de descente avec $\boldsymbol{w}^{(k)} = -H_f(\boldsymbol{x}^{(k)})^{-1}(\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}))$ et $\alpha_k = 1$.

On peut aussi remarquer, en vertu du théorème 2.19 page 169, que si $f \in C^3(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$, si $\bar{\boldsymbol{x}}$ est tel que $\nabla f(\bar{\boldsymbol{x}}) = 0$ et si $H_f(\bar{\boldsymbol{x}}) = D(\nabla f)(\bar{\boldsymbol{x}})$ est inversible alors il existe $\varepsilon > 0$ tel que si $\boldsymbol{x}_0 \in B(\bar{\boldsymbol{x}}, \varepsilon)$, alors la suite $(\boldsymbol{x}^{(k)})_k$ est bien définie par (3.30) et $\boldsymbol{x}^{(k)} \to \bar{\boldsymbol{x}}$ lorsque $k \to +\infty$. De plus, d'après la proposition 2.16, il existe $\beta > 0$ tel que $|\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \bar{\boldsymbol{x}}| \leq \beta |\boldsymbol{x}^{(k)} - \bar{\boldsymbol{x}}|^2$ pour tout $k \in \mathbb{N}$.

Remarque 3.25 (Sur l'implantation numérique)**.** La convergence de la méthode de Newton est très rapide, mais nécessite en revanche le calcul de $H_f(\boldsymbol{x})$, qui peut s'avérer impossible ou trop coûteux.

On va maintenant donner des variantes de la méthode de Newton qui évitent le calcul de la matrice hessienne.

Proposition 3.26. *Soient $f \in C^1(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$, $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ tel que $\nabla f(\boldsymbol{x}) \neq 0$, et soit $B \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ une matrice symétrique définie positive ; alors $w = -B\nabla f(\boldsymbol{x})$ est une direction de descente stricte en $\boldsymbol{x}$.*

DÉMONSTRATION – On a : $w \cdot \nabla f(\boldsymbol{x}) = -B\nabla f(\boldsymbol{x}) \cdot \nabla f(\boldsymbol{x}) < 0$ car B est symétrique définie positive et $\nabla f(\boldsymbol{x}) \neq 0$ donc $\boldsymbol{w}$ est une direction de descente stricte en $\boldsymbol{x}$. En effet, soit φ la fonction de $\mathbb{R}$ dans $\mathbb{R}$ définie par $\varphi(\alpha) = f(\boldsymbol{x} + \alpha \boldsymbol{w})$. Il est clair que $\varphi \in C^1(\mathbb{R}, \mathbb{R})$, $\varphi'(\alpha) = \nabla f(\boldsymbol{x} + \alpha \boldsymbol{w}) \cdot w$ et $\varphi'(0) = \nabla f(\boldsymbol{x}) \cdot w < 0$. Donc $\exists \alpha_0 > 0$ tel que $\varphi'(\alpha) < 0$ si $\alpha \in]0, \alpha_0[$. Par le théorème des accroissements finis, $\varphi(\alpha) < \varphi(0)$ $\forall \alpha \in]0, \alpha_0[$ donc w est une direction de descente stricte. ■

Méthode de Broyden La première idée pour construire une méthode de type quasi Newton est de prendre comme direction de descente en $\boldsymbol{x}^{(k)}$ le vecteur $\boldsymbol{w}^{(k)} = -(B^{(k)})^{-1}(\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}))$ où la matrice $B^{(k)}$ est censée approcher $H_f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ (sans calculer la dérivée seconde de f). On suppose $\boldsymbol{x}^{(k)}, \boldsymbol{x}^{(k-1)}$ et $B^{(k-1)}$ connus. Voyons comment on peut déterminer $B^{(k)}$. On peut demander par exemple que la condition suivante soit satisfaite :

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) - \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k-1)}) = B^{(k)}(\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^{(k-1)}). \tag{3.31}$$

Ceci est un système à n équations et $n \times n$ inconnues, et ne permet donc pas de déterminer entièrement la matrice $B^{(k)}$ si $n > 1$. Voici un moyen possible pour déterminer entièrement $B^{(k)}$, dû à Broyden. On pose $\boldsymbol{s}^{(k)} = \boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^{(k-1)}$, on suppose que $\boldsymbol{s}^{(k)} \neq 0$, et on pose $\boldsymbol{y}^{(k)} = \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) - \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k-1)})$. On choisit alors $B^{(k)}$ telle que :

$$\begin{cases} B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)} = \boldsymbol{y}^{(k)} \\ B^{(k)}\boldsymbol{s} = B^{(k-1)}\boldsymbol{s}, \ \forall s \perp s^{(k)} \end{cases} \tag{3.32}$$

On a exactement le nombre de conditions qu'il faut avec (3.32) pour déterminer entièrement $B^{(k)}$. Ceci suggère la méthode suivante :

Initialisation Soient $\boldsymbol{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ et $B^{(0)}$ une matrice symétrique définie positive. On pose

$$\boldsymbol{w}^{(0)} = (B^{(0)})^{-1}(-\nabla f(\boldsymbol{x}^{(0)}));$$

alors $\boldsymbol{w}^{(0)}$ est une direction de descente stricte sauf si $\nabla f(\boldsymbol{x}^{(0)}) = 0$.
On pose alors

$$\boldsymbol{x}^{(1)} = \boldsymbol{x}^{(0)} + \alpha^{(0)}\boldsymbol{w}^{(0)},$$

où $\alpha^{(0)}$ est optimal dans la direction $\boldsymbol{w}^{(0)}$.

Itération k On suppose $\boldsymbol{x}^{(k)}$, $\boldsymbol{x}^{(k-1)}$ et $B^{(k-1)}$ connus, $(k \geq 1)$, et on calcule $B^{(k)}$ par (3.32). On pose

$$\boldsymbol{w}^{(k)} = -(B^{(k)})^{-1}(\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})).$$

On choisit $\alpha^{(k)}$ optimal en $\boldsymbol{x}^{(k)}$ dans la direction $\boldsymbol{w}^{(k)}$, et on pose $\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha^{(k)}\boldsymbol{w}^{(k)}$.

Le problème avec cet algorithme est que si la matrice est $B^{(k-1)}$ symétrique définie positive, la matrice $B^{(k)}$ ne l'est pas forcément, et donc $\boldsymbol{w}^{(k)}$ n'est pas forcément une direction de descente stricte. On va donc modifier cet algorithme dans ce qui suit.

Méthode de BFGS La méthode BFGS (de Broyden[1], Fletcher[2], Goldfarb[3] et Shanno[4]) cherche à construire $B^{(k)}$ proche de $B^{(k-1)}$, telle que $B^{(k)}$ vérifie (3.31) et telle que si $B^{(k-1)}$ est symétrique définie positive alors $B^{(k)}$ est symétrique définie positive. On munit $\mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ d'une norme induite par un produit scalaire, par exemple si $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ et $A = (a_{i,j})_{i,j=1,\dots,n}$ on prend $\|A\| = \left(\sum_{i,j=1}^n a_{i,j}^2\right)^{1/2}$. $\mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ est alors un espace de Hilbert.

On suppose $\boldsymbol{x}^{(k)}$, $\boldsymbol{x}^{(k-1)}$, $B^{(k-1)}$ connus, et on définit

$$\mathcal{C}_k = \{B \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R}) | B \text{ symétrique, vérifiant (3.31)}\},$$

qui est une partie de $\mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ convexe fermée non vide. On choisit alors $B^{(k)} = P_{\mathcal{C}_k} B^{(k-1)}$ où $P_{\mathcal{C}_k}$ désigne la projection orthogonale sur $\mathcal{C}_k$. La matrice $B^{(k)}$ ainsi définie existe et est unique ; elle est symétrique d'après le choix de $\mathcal{C}_k$. On peut aussi montrer que si $B^{(k-1)}$ symétrique définie positive alors $B^{(k)}$ est aussi symétrique définie positive.

1. Broyden, C. G., The Convergence of a Class of Double-rank Minimization Algorithms, *Journal of the Institute of Mathematics and Its Applications* 1970, 6, 76-90
2. Fletcher, R., A New Approach to Variable Metric Algorithms, Computer Journal 1970, 13, 317-322
3. Goldfarb, D., A Family of Variable Metric Updates Derived by Variational Means, Mathematics of Computation 1970, 24, 23-26
4. Shanno, D. F.,Conditioning of Quasi-Newton Methods for Function Minimization , Mathematics of Computation 1970, 24, 647-656

Avec un choix convenable de la norme sur $\mathcal{M}_n(\mathbb{R})$, on obtient le choix suivant de $B^{(k)}$ si $s^{(k)} \neq 0$ et $\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) \neq 0$ (sinon l'algorithme s'arrête) :

$$B^{(k)} = B^{(k-1)} + \frac{\boldsymbol{y}^{(k)}(\boldsymbol{y}^{(k)})^t}{(\boldsymbol{s}^{(k)})^t \cdot y^{(k)}} - \frac{B^{(k-1)}\boldsymbol{s}^{(k)}(\boldsymbol{s}^{(k)})^t B^{(k-1)}}{(\boldsymbol{s}^{(k)})^t B^{(k-1)}\boldsymbol{s}^{(k)}}. \tag{3.33}$$

L'algorithme obtenu est l'algorithme de BFGS.

Algorithme de BFGS

$$\left\{\begin{array}{ll}
\underline{\text{Initialisation}} & \text{On choisit } \boldsymbol{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n \text{ et} \\
& B^{(0)} \text{ symétrique définie positive} \\
& (\text{ par exemple } B^{(0)} = Id) \text{ et on pose} \\
& \boldsymbol{w}^{(0)} = -B^{(0)}\nabla f(\boldsymbol{x}^{(0)}) \\
& \text{si } \nabla f(\boldsymbol{x}^{(0)}) \neq 0, \text{ on choisit } \alpha^{(0)} \text{ optimal} \\
& \text{dans la direction } \boldsymbol{w}^{(0)}, \text{ et donc} \\
& \boldsymbol{w}^{(0)} \text{ est une direction de descente stricte.} \\
& \text{On pose } \boldsymbol{x}^{(1)} = \boldsymbol{x}^{(0)} + \alpha^{(0)}\boldsymbol{w}^{(0)}. \\
\underline{\text{Itération } k} & \text{A } \boldsymbol{x}^{(k)},\ \boldsymbol{x}^{(k-1)} \text{ et } B_{k-1} \text{ connus } \ (k \geq 1) \\
& \text{On pose} \\
& \boldsymbol{s}^{(k)} = \boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^{(k-1)} \ \ \boldsymbol{y}^{(k)} = \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) - \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k-1)}) \\
& \text{si } \boldsymbol{s}^{(k)} \neq 0 \text{ et } \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) \neq 0, \\
& \text{on choisit } B^{(k)} \text{ vérifiant (3.33)} \\
& \text{On calcule } \boldsymbol{w}^{(k)} = -(B^{(k)})^{-1}(\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})) \\
& (\text{direction de descente stricte en } \boldsymbol{x}^{(k)}). \\
& \text{On calcule } \alpha^{(k)} \text{ optimal dans la direction } \boldsymbol{w}^{(k)} \\
& \text{et on pose } \boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha^{(k)}\boldsymbol{w}^{(k)}.
\end{array}\right. \tag{3.34}$$

On donne ici sans démonstration le théorème de convergence suivant :

Théorème 3.27 (Fletcher, 1976). *Soit $f \in C^2(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$ telle que $f(\boldsymbol{x}) \to +\infty$ quand $|\boldsymbol{x}| \to +\infty$. On suppose de plus que f est strictement convexe (donc il existe un unique $\bar{\boldsymbol{x}} \in \mathbb{R}^n$ tel que $f(\bar{\boldsymbol{x}}) = \inf_{\mathbb{R}^n} f$) et on suppose que la matrice hessienne $H_f(\bar{\boldsymbol{x}})$ est symétrique définie positive.*
Alors si $\boldsymbol{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ et si $B^{(0)}$ est symétrique définie positive, l'algorithme BFGS définit bien une suite $\boldsymbol{x}^{(k)}$ et on a $\boldsymbol{x}^{(k)} \to \bar{\boldsymbol{x}}$ quand $k \to +\infty$
De plus, si $\boldsymbol{x}^{(k)} \neq \bar{\boldsymbol{x}}$ pour tout k, la convergence est super linéaire i.e.

$$\left|\frac{\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \bar{\boldsymbol{x}}}{\boldsymbol{x}^{(k)} - \bar{\boldsymbol{x}}}\right| \to 0 \text{ quand } k \to +\infty.$$

Pour éviter la résolution d'un système linéaire dans BFGS, on peut choisir de travailler sur $(B^{(k)})^{-1}$ au lieu de $B^{(k)}$.

$$\left\{\begin{array}{l}
\textbf{Initialisation} \text{ Soit } \boldsymbol{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n \text{ et } K^{(0)} \text{ symétrique définie positive} \\
\text{telle que } \alpha_0 \text{ soit optimal dans la direction } -K^{(0)}\nabla f(\boldsymbol{x}^{(0)}) = \boldsymbol{w}^{(0)} \\
\boldsymbol{x}^{(1)} = \boldsymbol{x}^{(0)} + \alpha_0 w^{(0)} \\
\textbf{Itération } k : \text{A } \boldsymbol{x}^{(k)}, \boldsymbol{x}^{(k-1)}, K^{(k-1)} \text{ connus, } k \geq 1, \\
\text{on pose } \boldsymbol{s}^{(k)} = \boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^{(k-1)}, \boldsymbol{y}^{(k)} = \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) - \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k-1)}) \\
\text{et } K^{(k)} = P_{\mathcal{C}_k} K^{(k-1)}. \\
\text{On calcule } \boldsymbol{w}^{(k)} = -K^{(k)}\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) \text{ et on choisit } \alpha_k \\
\text{optimal dans la direction } \boldsymbol{w}^{(k)}. \\
\text{On pose alors } \boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_k \boldsymbol{w}^{(k)}.
\end{array}\right. \tag{3.35}$$

Remarquons que le calcul de la projection de $P_{\mathcal{C}_k} K^{(k-1)}$ peut s'effectuer avec la formule (3.33) où on a remplacé $B^{(k-1)}$ par $K^{(k-1)}$. Malheureusement, on obtient expérimentalement une convergence nettement moins bonne pour l'algorithme de quasi-Newton modifié (3.35) que pour l'algorithme de BFGS (3.33).

3.3.4 Résumé sur les méthodes d'optimisation

Faisons le point sur les avantages et inconvénients des méthodes qu'on a vues sur l'optimisation sans contrainte.

Méthodes de gradient : Ces méthodes nécessitent le calcul de $\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$. Leur convergence est linéaire (donc lente).

Méthode de gradient conjugué : Si f est quadratique (c.à.d. $f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}A\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x} - b\cdot\boldsymbol{x}$ avec A symétrique définie positive), la méthode est excellente si elle est utilisée avec un préconditionnement (pour n grand). Dans le cas général, elle n'est efficace que si n n'est pas trop grand.

Méthode de Newton : La convergence de la méthode de Newton est excellente (convergence localement quadratique) mais nécessite le calcul de $H_f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ (et de $\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$). Si on peut calculer $H_f(\boldsymbol{x}^{(k)})$, cette méthode est parfaite.

Méthode de quasi Newton : L'avantage de la méthode de quasi Newton est qu'on ne calcule que $\nabla f(x^{(k)})$ et pas $H_f(x^{(k)})$). La convergence est super linéaire. Par rapport à une méthode de gradient où on calcule $\boldsymbol{w}^{(k)} = -\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$, la méthode BFGS nécessite une résolution de système linéaire :

$$B^{(k)}\boldsymbol{w}^{(k)} = -\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}).$$

Quasi–Newton modifié :

Pour éviter la résolution de système linéaire dans BFGS, on peut choisir de travailler sur $(B^{(k)})^{-1}$ au lieu de $B^{(k)}$, pour obtenir l'algorithme de quasi Newton (3.35). Cependant, on perd alors en vitesse de convergence.

Comment faire si on ne veut (ou peut) pas calculer $\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$? On peut utiliser des "méthodes sans gradient", c.à.d. qu'on choisit *a priori* les directions $\boldsymbol{w}^{(k)}$. Ceci peut se faire soit par un choix déterministe, soit par un choix stochastique.

Un choix déterministe possible est de calculer $\boldsymbol{x}^{(k)}$ en résolvant n problèmes de minimisation en une dimension d'espace. Pour chaque direction $i = 1, \ldots, n$, on prend $w^{(n,i)} = \boldsymbol{e}_i$, où $\boldsymbol{e}_i$ est le i-ème vecteur de la base canonique, et pour $i = 1, \ldots, n$, on cherche $\theta \in \mathbb{R}$ tel que :

$$f(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \ldots, \theta, \ldots, x_n^{(k)}) \le f(x_1^{(k)}, \boldsymbol{x}_2^{(k)}, \ldots, t, \ldots, \boldsymbol{x}_n^{(k)}), \forall t \in \mathbb{R}.$$

Remarquons que si f est quadratique, on retrouve la méthode de Gauss Seidel.