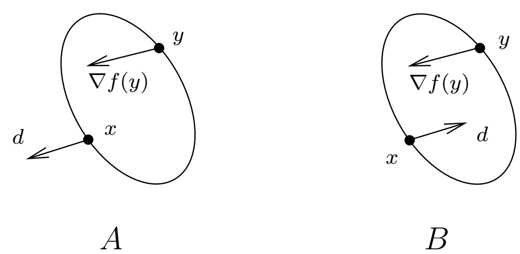
Cours OPT 201

Optimisation Différentiable – Théorie et Algorithmes

Exercices de la séance 5
(Newton, quasi-Newton, moindres-carrés, conditions d'optimalité)

1 Notion de direction de descente

Les dessins de la figure ci-dessous représentent une courbe de niveau (ou iso-valeur) d'une fonction quadratique $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ (f est constante sur cette courbe). Dans quels dessins (A ou B ou les deux) la direction d est-elle de descente au point x ? Justifiez votre réponse.



2 Pas optimal pour un critère quadratique

On considère le critère quadratique sur $\mathbb{R}^n$:

$$f(x) = \frac{1}{2} x^{\mathsf{T}} A x + b^{\mathsf{T}} x,$$

où A est d'ordre n symétrique définie positive et $b \in \mathbb{R}^n$.

1. Soit d_k une direction de descente en $x_k \in \mathbb{R}^n$. Calculez le pas optimal le long de d_k.
2. Montrez que l'on peut exprimer le pas optimal comme fonction de la décroissance de f obtenue avec ce pas, sans faire intervenir A.

3 Mise en œuvre de la règle de Wolfe

La règle de recherche linéaire de Wolfe consiste à trouver un pas $\alpha_k > 0$ tel que l'on ait

$$f_{k+1} \leqslant f_k + \alpha_k \omega_1 g_k^{\mathsf{T}} d_k, \tag{5.1}$$

$$g_{k+1}^{\mathsf{T}} d_k \geqslant \omega_2 g_k^{\mathsf{T}} d_k, \tag{5.2}$$

où $f_k = f(x_k)$, $f_{k+1} = f(x_k + \alpha_k d_k)$, $g_k = \nabla f(x_k)$, $g_{k+1} = \nabla f(x_k + \alpha_k d_k)$, d_k est une direction de descente ($g_k^{\mathsf{T}} d_k < 0$) et $0 < \omega_1 < \omega_2$.

Nous allons montrer que si f est C^1 et bornée inférieurement sur $x_k + \mathbb{R}_+ d_k$, alors on peut toujours trouver un pas α_k vérifiant ces deux conditions. L'algorithme ci-dessous le fait en un nombre fini d'étapes.

Pour cela, on considère l'algorithme suivant :

1. prendre $\alpha_k > 0$, $\underline{\alpha} := 0$, $\overline{\alpha} := +\infty$.
2. **répéter** :
   2.1. **si** (5.1) n'est pas vérifiée ;
   2.2. **alors** $\overline{\alpha} := \alpha_k$, $\alpha_k := \frac{1}{2}(\underline{\alpha} + \overline{\alpha})$;

2.3. **sinon si** (5.2) est vérifiée ;
2.4. **alors** on sort avec α_k ;
2.5. **sinon** $\underline{\alpha} = \alpha_k$;
2.6. **si** $\overline{\alpha} = +\infty$;
2.7. **alors** $\alpha_k := 10\alpha_k$;
2.8. **sinon** $\alpha_k = \frac{1}{2}(\underline{\alpha} + \overline{\alpha})$.

On montre la finitude de l'algorithme en raisonnant par l'absurde, i.e., en supposant que la boucle « répéter » est parcourue indéfiniment (on ne passe jamais par l'étape 2.4). Montrez que

1. on passe un nombre fini de fois dans 2.7,
2. $\exists \hat{\alpha} \geqslant 0 : \underline{\alpha} \to \hat{\alpha}$ et $\overline{\alpha} \to \hat{\alpha}$,
3. $$f(x_k + \hat{\alpha} d_k) = f_k + \omega_1 \hat{\alpha} g_k^\mathsf{T} d_k, \tag{5.3}$$
4. $$g(x_k + \hat{\alpha} d_k)^\mathsf{T} d_k \leqslant \omega_2 g_k^\mathsf{T} d_k, \tag{5.4}$$
5. $$g(x_k + \hat{\alpha} d_k)^\mathsf{T} d_k \geqslant \omega_1 g_k^\mathsf{T} d_k, \tag{5.5}$$
6. cela conduit à une contradiction.

4 Acceptation du pas unité dans les méthodes de Newton et de quasi-Newton

Considérons le problème d'optimisation sans contrainte

$$\begin{cases} \min f(x) \\ x \in \mathbb{R}^n, \end{cases}$$

où f est de classe C^2.

Soit $\{x_k\}$ une suite générée par la récurrence

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

où $\{\alpha_k\}$ est bornée dans $(0, \infty)$ et d_k est donnée par la formule

$$d_k = -M_k^{-1} g_k,$$

dans laquelle $\{M_k\}$ est une suite de matrices définies positives et $g_k = \nabla f(x_k)$ est le gradient de f en x_k. Supposons que x_k converge vers un point x_* vérifiant les conditions d'optimalité de second ordre ($\nabla f(x_*) = 0$ et $\nabla^2 f(x_*)$ est définie positive) et que $d_k \to 0$.

1. Montrez que si les matrices M_k **sur**estiment $\nabla^2 f(x_k)$ dans le sens où
$$d_k^\mathsf{T} \left(M_k - \nabla^2 f(x_k) \right) d_k \geqslant o(\|d_k\|^2), \tag{5.6}$$
et si $\omega_1 \in (0, \frac{1}{2})$, alors il existe un indice k_1 tel que pour tout $k \geqslant k_1$, on ait
$$f(x_k + d_k) \leqslant f(x_k) + \omega_1 g_k^\mathsf{T} d_k.$$
On a donc acceptation asymptotique du pas unité pour la règle d'Armijo.

2. Montrez que si les matrices M_k approchent $\nabla^2 f(x_k)$ dans le sens où

$$d_k^\mathsf{T} \left(M_k - \nabla^2 f(x_k)\right) d_k = o(\|d_k\|^2), \tag{5.7}$$

et si $\omega_2 > 0$, alors il existe un indice k_2 tel que pour tout $k \geqslant k_2$, on ait

$$g(x_k + d_k)^\mathsf{T} d_k \geqslant \omega_2 g_k^\mathsf{T} d_k.$$

On a donc acceptation asymptotique du pas unité pour la condition de courbure de la règle de Wolfe.

5 Problème de moindres-carrés linéaire

On considère le problème suivant

$$(P) \qquad \inf_{x \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2}\|Ax - b\|^2, \tag{5.8}$$

où A est $m \times n$, $b \in \mathbb{R}^m$ et $\|\cdot\|$ est la norme euclidienne. Ce problème se rencontre dans les deux situations suivantes.

- Le premier cadre est « concret ». On cherche à déterminer des *paramètres* $x \in \mathbb{R}^n$ d'un « système » au moyen de *mesures* $b \in \mathbb{R}^m$ réalisées sur celui-ci. La loi qui relie les paramètres x aux *quantités mesurées* Ax est donc supposée linéaire. Le problème de moindres-carrés linéaire permet de déterminer des paramètres x qui donnent des quantités mesurées Ax au plus proche des mesures b.

- Le second cadre est « abstrait ». On s'intéresse à la résolution du système linéaire $Ax = b$. On n'impose pas que $b \in \mathcal{R}(A)$, si bien que ce système n'a peut-être pas de solution (c'est souvent le cas lorsque le système est *surdéterminé*, c'est-à-dire lorsqu'il y a plus d'équations que d'inconnues). Le problème de moindres-carrés linéaire cherche alors à résoudre ce système linéaire « au mieux », en minimisant le résidu $Ax - b$.

Il s'agit donc d'un problème « fondamental », auquel sont rattachés divers concepts bien connus en algèbre linéaire.

1. Montrez que le problème (P) a au moins une solution.

2. Montrez que le problème (P) a une solution unique si, et seulement si, A est injective.

3. Déterminez l'ensemble des solutions, connaissant une solution particulière, et montrez que la valeur optimale s'écrit

$$\operatorname{val}(P) = \frac{1}{2}\| \mathrm{P}_{\mathcal{R}(A)^\perp} b\|^2.$$

4. Si le problème de moindres-carrés linéaire a plusieurs solutions (cas où A n'est pas injective), on peut s'intéresser à *son unique* solution de norme minimale $\hat{x}$, qui est *la* solution de

$$\left\{ \begin{array}{l} \min \frac{1}{2}\|x\|^2 \\ A^\mathsf{T} A x = A^\mathsf{T} b. \end{array} \right. \tag{5.9}$$

(a) Montrez que ce problème a une solution et une seule. On la note $\hat{x}$.

(b) Montrez que $\hat{x}$ dépend linéairement de b : $\hat{x} = A^\dagger b$ (l'opérateur $A^\dagger$ est appelé le **pseudo-inverse** de A).

(c) Montrez que $\hat{x}$ est l'unique solution du problème de moindres-carrés qui est dans $\mathcal{R}(A^\mathsf{T})$.

(d) Donnez une expression de $A^\dagger$

i. lorsque $A = 0$,

ii. lorsque $A \neq 0$ et que l'on dispose d'une matrice Y dont les colonnes forment une base de $\mathcal{R}(A^\mathsf{T})$,

iii. lorsque $A \neq 0$ et que l'on dispose de la décomposition en valeurs singulières de A, supposée de rang $r > 0$: $A = V\Sigma U^\mathsf{T}$, avec V une matrice $m \times r$ telle que $V^\mathsf{T} V = I_r$, Σ une matrice diagonale d'ordre r inversible et U une matrice $r \times n$ telle que $U^\mathsf{T} U = I_r$.

6 Problème de moindres-carrés non linéaire : méthode de Gauss-Newton

Soit $r : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^p$ une fonction régulière. On appelle $r(x)$ le **résidu** en x. On cherche à minimiser celui-ci au sens des moindres-carrés :

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \left(f(x) = \frac{1}{2}\|r(x)\|^2 \right),$$

où $\|\cdot\|$ est la norme ℓ_2. On note $J(x) = r'(x)$ la jacobienne du résidu, qui est une matrice de type $p \times n$. En pratique, on a $p \gg n$.

Algorithme de Gauss-Newton. Soit $x_k \in \mathbb{R}^n$ l'itéré courant. On note $r_k = r(x_k)$ et $J_k = J(x_k)$. On calcule d_k, solution de

$$\min_{d\in\mathbb{R}^n} \frac{1}{2}\|r_k + J_k d\|^2. \tag{5.10}$$

On prend alors $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$, où α_k est déterminé par une recherche linéaire convenable sur f (c'est-à-dire assurant la condition de Zoutendijk).

1. Calculez $\nabla f(x)$ et $\nabla^2 f(x)$ (pour le produit scalaire euclidien). En déduire une interprétation de l'algorithme de Gauss-Newton, en le comparant à l'algorithme de Newton.

2. Montrez que l'algorithme de Gauss-Newton est bien défini dans le sens où

   (a) le problème (5.10) a toujours une solution,

   (b) d_k est une direction de descente de f en x_k si x_k n'est pas stationnaire.

3. Montrez que

   (a) si $J(x)$ est bornée et *uniformément* injective (i.e., il existe $\alpha > 0$ tel que pour tout $v \in \mathbb{R}^n$ et pour tout $x \in \mathbb{R}^n$ on ait $\alpha\|v\| \leqslant \|J(x)v\| \leqslant \frac{1}{\alpha}\|v\|$), alors l'algorithme de Gauss-Newton converge globalement vers un point stationnaire de f,

   (b) si x_k converge vers un point stationnaire x_* de f vérifiant

   (i) ou bien $r(x_*)$ est nul ou bien $r''(x_*)$ est nul et

   (ii) $J(x_*)$ est injective,

   alors la convergence est quadratique.

7 Approximation de rang un d'une matrice symétrique

On cherche à déterminer un vecteur $x \in \mathbb{R}^n$ tel que la matrice xx^T soit la plus proche d'une matrice $M \in \mathcal{S}^n$ d'ordre n symétrique. On mesure la proximité par la norme de Frobenius

$$A \in \mathcal{S}^n \mapsto \|A\|_F = \left(\operatorname{tr} A^2\right)^{1/2} = \left(\sum_{i=1}^{n} A_{ij}^2\right)^{1/2}.$$

Le problème s'écrit donc

$$(P) \qquad \inf_{x \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2}\|M - xx^\mathsf{T}\|_F^2.$$

On note $\|\cdot\|$ la norme euclidienne et λ_1 la valeur propre maximale de M.

1. Montrez que ce problème a une solution.
2. En utilisant la condition d'optimalité du premier ordre, montrez qu'une solution x est soit le vecteur nul, soit un vecteur propre de M de valeur propre $\|x\|^2$.

   En particulier, $x = 0$ si $\lambda_1 \leqslant 0$.
3. On suppose maintenant que $\lambda_1 > 0$. En utilisant la condition d'optimalité du second ordre, montrez qu'une solution x doit être un vecteur propre de M associé à la valeur propre maximale λ_1.
4. Montrez la réciproque lorsque $\lambda_1 > 0$: tout vecteur propre associé à λ_1, de norme $\lambda_1^{1/2}$, est solution du problème.

8 Valeurs singulières

Soit $A : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ une application linéaire entre deux espaces euclidiens (de dimension finie donc). On note de la même manière les produits scalaires de $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ (par $\langle\cdot,\cdot\rangle$) et les normes associées (par $\|\cdot\|$). Le produit scalaire sur $\mathbb{E} \times \mathbb{F}$ est pris égal à la somme de ceux sur $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$: pour $z = (x, y)$ et $z' = (x', y') \in \mathbb{E} \times \mathbb{F}$, $\langle z, z'\rangle = \langle x, x'\rangle + \langle y, y'\rangle$. On note enfin $A^* : \mathbb{F} \to \mathbb{E}$ l'adjointe de A pour les produits scalaires donnés sur $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$.

On considère le problème de **max**imisation en $(x, y) \in \mathbb{E} \times \mathbb{F}$ suivant :

$$(P) \qquad \begin{cases} \sup \langle Ax, y\rangle \\ \|x\|^2 = 1 \\ \|y\|^2 = 1. \end{cases}$$

On introduit l'application linéaire auto-adjointe $\hat{A} : \mathbb{E} \times \mathbb{F} \to \mathbb{E} \times \mathbb{F} : (x, y) \mapsto (A^*y, Ax)$, qui sous forme matricielle s'écrit

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 0 & A^* \\ A & 0 \end{pmatrix}.$$

Les valeurs propres strictement positives de $\hat{A}$ sont les *valeurs singulières* (non nulles) de A. On notera au passage que si (x, y) est vecteur propre de $\hat{A}$, de valeur propre λ, alors $(-x, y)$ est vecteur propre de $\hat{A}$, de valeur propre $-\lambda$. Si $\operatorname{rg} A = r$, $\hat{A}$ est de rang $2r$ et a donc r valeurs propres > 0, r valeurs propres < 0 et $n + m - 2r$ valeurs propres nulles.

1. Montrez que (P) a une solution.

2. Montrez que les contraintes de (P) sont qualifiées en tout point admissible.

3. Montrez que $(x, y) \in \mathbb{E} \times \mathbb{F}$ est un point stationnaire de (P) si, et seulement si, (x, y) est un vecteur propre de $\hat{A}$ vérifiant $\|x\| = \|y\| = 1$.

   Dans ce cas, $\langle Ax, y\rangle$ est la valeur propre de $\hat{A}$ associée à (x, y).

4. Soit $(\bar{x}, \bar{y})$ une solution de (P) et $\bar{\lambda} = \langle A\bar{x}, \bar{y}\rangle$. Montrez que $\bar{\lambda}$ est la valeur propre **max**imale de $\hat{A}$ (il s'agit donc de la valeur singulière maximale de A).

9 Formule de BFGS

On note $\mathcal{S}^n$ l'ensemble des matrices d'ordre n symétriques, que l'on munit du produit scalaire

$$\langle A, B\rangle = \operatorname{tr} AB,$$

où la fonction $\operatorname{tr} : \mathcal{S}^n \to \mathbb{R}$ désigne la trace (somme des éléments diagonaux). On note $\mathcal{S}^n_{++}$ le cône formé des matrices définies positives. Soit $\psi : \mathcal{S}^n \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ la fonction définie par

$$\psi(M) = \operatorname{tr} M + \operatorname{ld} M,$$

où la fonction log-déterminant $\operatorname{ld} : \mathcal{S}^n \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ est définie en $M \in \mathcal{S}^n$ par

$$\operatorname{ld}(M) = \begin{cases} -\log\det M & \text{si } M \in \mathcal{S}^n_{++} \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases}$$

1. Montrez que ψ admet comme unique minimum la matrice identité.
2. Soient y, $s \in \mathbb{R}^n$, avec $s \neq 0$, et $M_0 \in \mathcal{S}^n_{++}$. On considère le problème

$$\begin{cases} \inf_{M\in\mathcal{S}^n}\ \psi(M_0^{-1/2} M M_0^{-1/2}) \\ y = Ms. \end{cases} \tag{5.11}$$

   Montrez que, pour que ce problème ait une solution, on doit avoir $y^\mathsf{T} s > 0$.
3. Montrez que la contrainte de (5.11) est qualifiée en tout point $M \in \mathcal{S}^n$.
4. Inversement, montrez que si $y^\mathsf{T} s > 0$, le problème (5.11) a une unique solution $\bar{M}$, qui est donnée par la formule de BFGS (du nom des auteurs : Broyden, Fletcher, Goldfarb et Shanno)

$$\bar{M} = M_0 + \frac{yy^\mathsf{T}}{y^\mathsf{T} s} - \frac{M_0 s s^\mathsf{T} M_0}{s^\mathsf{T} M_0 s}. \tag{5.12}$$

10 Méthodes des régions de confiance

On considère le problème d'optimisation suivant :

$$\begin{cases} \min f(x) \\ \|x\| \leqslant \Delta, \quad x \in \mathbb{R}^n, \end{cases} \tag{5.13}$$

où $\|\cdot\|$ est la norme euclidienne (ou ℓ_2), $\Delta > 0$ et f est la fonction quadratique définie par

$$f(x) = \frac{1}{2}x^\mathsf{T}Ax - b^\mathsf{T}x,$$

avec A matrice d'ordre n symétrique (non nécessairement définie positive) et $b \in \mathbb{R}^n$. On note

$$c(x) := \frac{1}{2}\left(\|x\|^2 - \Delta^2\right).$$

On va montrer que $\bar{x}$ est solution *globale* de (5.13) si, et seulement si, il existe $\bar{\lambda} \in \mathbb{R}$ tel que

$$(A + \bar{\lambda}I)\bar{x} = b, \tag{5.14}$$

$$\|\bar{x}\| \leqslant \Delta, \tag{5.15}$$

$$\bar{\lambda} \geqslant 0, \quad \bar{\lambda}(\|\bar{x}\| - \Delta) = 0, \tag{5.16}$$

$$(A + \bar{\lambda}I) \ \text{ est semi-définie positive.} \tag{5.17}$$

1. Montrez que le problème (5.13) a au moins une solution. Soit $\bar{x}$ une solution.
2. Montrez qu'il existe un $\bar{\lambda} \in \mathbb{R}$ tel que l'on ait (5.14), (5.15) et (5.16).
3. Montrez que si $\|\bar{x}\| < \Delta$, alors A est semi-définie positive et donc (5.17) est vérifiée.
4. On regarde à présent le cas où $\|\bar{x}\| = \Delta$.

   (i) Montrez que $h^\mathsf{T}(A + \bar{\lambda}I)h \geqslant 0$, pour tout h tel que $\bar{x}^\mathsf{T}h = 0$.

   (ii) Montrez que $f(\bar{x}) \leqslant f(x)$, pour tout x tel que $\|x\| = \|\bar{x}\|$.

   (iii) Montrez que

   $$f(\bar{x}) = -\frac{1}{2}\bar{x}^\mathsf{T}A\bar{x} - \bar{\lambda}\|\bar{x}\|^2.$$

   En déduire que pour tout x vérifiant $\|x\| = \|\bar{x}\|$, on a

   $$0 \leqslant \frac{1}{2}(x - \bar{x})^\mathsf{T}(A + \bar{\lambda}I)(x - \bar{x}).$$

   (iv) Soit $h \in \mathbb{R}^n$ tel que $\bar{x}^\mathsf{T}h \neq 0$. Montrez que l'équation en α

   $$\|\bar{x} + \alpha h\|^2 = \|\bar{x}\|^2$$

   a deux racines réelles distinctes.

   (v) Montrez que $h^\mathsf{T}(A + \bar{\lambda}I)h \geqslant 0$, pour tout h tel que $\bar{x}^\mathsf{T}h \neq 0$.

5. Montrez que (5.17) est vérifiée.
6. On montre à présent la réciproque. On suppose que $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ et qu'il existe $\bar{\lambda} \in \mathbb{R}$ tel que $(\bar{x}, \bar{\lambda})$ vérifie les conditions (5.14), (5.15), (5.16) et (5.17).

   (i) Montrez que $\bar{x}$ est solution du problème

   $$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \ \ell(x, \bar{\lambda}),$$

   où $\ell(x, \lambda) = f(x) + \lambda\, c(x)$.

   (ii) En déduire que $\bar{x}$ est solution globale de (5.13).

11 Conditions d'optimalité du second ordre

On considère le problème d'optimisation en $(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2$ suivant

$$\begin{cases} \inf \frac{1}{3}(x_1^3 + x_2^3) \\ \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2 - 1) = 0. \end{cases} \tag{5.18}$$

Ce problème admet les 6 points stationnaires (ou solutions des conditions d'optimalité du premier ordre, ou de Lagrange) suivants

$$x = \pm(0, 1), \qquad x = \pm(1, 0) \qquad \text{et} \qquad x = \pm(1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2}).$$

En utilisant les conditions d'optimalité du second ordre, déterminez si ces points sont des minima ou des maxima locaux. Le plus rapide est de traiter chaque couple de points stationnaires en une fois.