Optimisation Différentiable

—

Théories et Algorithmes

Jean Charles GILBERT[†]

24 août 2020

[†] INRIA Paris, 2 rue Simone Iff, CS 42112, F-75589 Paris Cedex 12, France; `Jean-Charles.Gilbert@inria.fr`.

Préface

There are hardly any speculations in geometry more useful or more entertaining than those which relate to maxima and minima.

C. MacLaurin (1742). A treatise of Fluxions.

Telle est, bien sûr, l'ambition secrète et démesurée de tout auteur d'anthologie. S'il la commence pour lui-même, c'est pour d'autres qu'il la termine et la publie. Choisir, dans un domaine déterminé, tout ce qui lui paraît digne et capable de provoquer chez le lecteur le choc de la beauté, voilà l'objet de son effort.

G. Pompidou (1961). Anthologie de la poésie française

Si vous voulez savoir ce qu'une démonstration démontre, regardez la démonstration.

L. Wittgenstein, cité par J. Bouveresse le 17 juin 1998 dans une conférence sur l'affaire Sokal et ses conséquences.

This paper is too long ... please add information on topics X, Y, and Z.

B. Stroustrup (1994), raillant les commentaires contradictoires des rapports d'arbitrage sur son papier résumant la partie historique de son livre [509].

Il s'étonnait de souffrir autant. Profondément éloignée des catégories chrétiennes de la rédemption et de la grâce, étrangère à la notion même de liberté et de pardon, sa vision du monde en acquérait quelque chose de mécanique et d'impitoyable. [...] *La nuit* [*il*] *rêvait d'espaces abstraits, recouverts de neige.*

M. Houellebecq (1998). Les particules élémentaires.

L'optimisation numérique a ceci d'amusant que toute personne ayant une formation minimale en calcul scientifique et s'initiant à la discipline s'estime rapidement suffisamment compétente pour introduire de nouveaux algorithmes ! Il faut dire que le problème qui se pose en optimisation numérique différentiable sans contrainte renvoie à une image familière, celle où il s'agit de descendre au plus bas dans une vallée, et

y trouver un chemin conduisant à destination semble bien être à la portée de tous. Prendre en compte des contraintes d'inégalité ne paraît guère plus difficile puisque cela revient à restreindre la descente à un enclos à la frontière bien définie. Il n'est donc pas rare de rencontrer des ingénieurs ou des chercheurs bricolant de « nouveaux » algorithmes aux propriétés incertaines, à la convergence aléatoire, au temps de calcul démesuré, mais qui satisfont pleinement leurs auteurs..., jusqu'au jour où ceux-ci se rendent compte que le problème n'est peut-être pas si simple, que leur algorithme a bien quelques faiblesses rédhibitoires et qu'il serait sage de consulter un spécialiste. Il est donc sans doute utile de rappeler ici, qu'il existe en effet une petite communauté de chercheurs dont c'est le métier d'étudier et d'améliorer l'algorithmique en optimisation, ayant leurs revues spécialisées, leurs vedettes, leurs maîtres vénérés et ne manquant pas leurs conférences internationales régulières. Il reste probablement beaucoup d'algorithmes à découvrir en optimisation et certainement beaucoup doivent être mieux compris, rendus plus efficaces ou adaptés à des situations nouvelles ou particulières. Ceci est d'autant plus vrai qu'aucun algorithme n'est entièrement satisfaisant, entraînant des déceptions que l'on cherche naturellement à adoucir par de nouveaux remèdes, ou mieux, par une nouvelle interprétation des algorithmes et de leur fondement permettant leur amélioration. L'exploration du champ des possibles est donc souhaitable, pourvu que ceci ne conduise pas à raviver de vieilles recettes périmées. La partie numérique de cet ouvrage rend compte des principales solutions que les numériciens ont apportées à quelques problèmes classiques de l'optimisation différentiable. Les impasses et les écueils à éviter y sont aussi décrits. Nous espérons ainsi être utiles à ceux qui se sentent une âme d'algorithmicien.

Si un objectif important de cet ouvrage est l'algorithmique en optimisation différentiable, le chemin pour y arriver pourra paraître long à certains. Les méthodes numériques efficaces reposent en effet sur une bonne compréhension de la structure et des propriétés des problèmes d'optimisation qu'elles cherchent à résoudre ; c'est une raison suffisante pour étudier ces derniers. Par ailleurs, même si la démonstration de la convergence d'un algorithme ne doit pas être la motivation première lors de sa conception, les algorithmes ne sont vraiment acceptés que si l'on parvient à en décrire les propriétés de convergence globale et locale, voire de complexité. Les numériciens y consacrent une grande partie de leurs efforts. Ces différents aspects requièrent le développement d'une théorie solide, ce qui explique la première partie du sous-titre de cet ouvrage.

Ce livre est long ; il ne contient pourtant qu'une introduction aux différents sujets qu'il aborde, que des *fragments* de ceux-ci. Presque tous ses chapitres, parfois de simples sections, ont été développés en d'épaisses monographies par d'autres auteurs. Le spécialiste sera donc parfois frustré par l'absence de certains concepts ou de leur développement, par l'ignorance de certains algorithmes ou le côté superficiel de leur étude ; par ailleurs, le néophyte pourra être découragé par le foisonnement des sujets traités ou par la difficulté de certains passages. C'est donc dans la recherche d'un équilibre, tout subjectif, entre ces deux pôles que s'est constitué cet ouvrage. Nous avons essayé d'aborder de nombreux problèmes et algorithmes de résolution, en nous efforçant chaque fois de les contenir dans un chapitre de quelques dizaines de pages. Des notes de fin de chapitre invitent le lecteur à poursuivre son exploration, à enrichir ses connaissances, le long de pistes que nous avons voulu variées.

Table des Matières

Les chapitres et sections marqués du signe « ⊖ » ne doivent pas être vus dans le cadre du cours. Les chapitres et sections marqués du signe « ▲ » sont inachevés, en travaux.

Il reste toujours au fond de moi une part de mon expérience
qui n'est pas transmissible.
Jean-Christophe Lafaille et Benoît Heimermann [344].

Partie I

Cadre
Outils théoriques
Concepts algorithmiques

1 Introduction

Quand on me contredit, on éveille mon attention, mais non ma colère : je m'avance vers celui qui me contredit, qui m'instruit. La cause de la vérité devrait être la cause commune de l'un et de l'autre.

Montaigne (1572-1592). Essais, III, 8 [393].

*Selon la méthode cartésienne, pour rendre raison d'un phénomène complexe, il faut le décomposer rationnellement en éléments plus simples, par là même plus faciles à appréhender, et ainsi de suite, jusqu'à ce qu'on parvienne aux éléments fondamentaux : c'est l'*analyse. *Puis, partant de ces éléments, on remonte l'ensemble de la machine, en prenant soin de ne faire aucun « saut », afin d'être toujours à même d'expliquer l'opération qui suit par celles qui précèdent : c'est la* synthèse.

Jean-Marc Mandosio (2010). Présentation de la *Grammaire Générale et Raisonnée* d'Antoine Arnauld et Claude Lancelot, 1660 [374].

Ideally, mathematics should be seen as a thought process, rather than just as a mass of facts to be learned and remembered, which is so often the common view. [...] *It's the excitement of discovering new properties and relationships—ones having the intellectual beauty that only mathematics seems able to bring—that keeps me going. I never get tired of it. This process builds its own momentum. New flashes of insight stimulate curiosity more and more.*

R.T. Rockafellar sur le site Wikimization.

1.1 Définition d'un problème d'optimisation

1.1.1 Un cadre très général

Dans cet ouvrage, nous nous intéresserons à l'étude et à la résolution des problèmes qui s'énoncent de la manière suivante :

« Trouver $x_* \in X$ tel que, pour tout $x \in X$, on ait $f(x_*) \leqslant f(x)$ ».

Dans cet énoncé, X est un ensemble et f est une application définie sur X à valeurs dans la *droite achevée* $\overline{\mathbb{R}} := \mathbb{R} \cup \{-\infty, +\infty\}$. Il s'agit donc de trouver un point x_* de l'ensemble X qui donne à f sa plus petite valeur sur X. C'est ce que l'on appelle un *problème d'optimisation*. On notera également ce problème comme suit :

$$(P_X) \quad \left\{ \begin{array}{l} \inf\ f(x) \\ x \in X \end{array} \right.$$

ou encore

$$\inf_{x \in X}\ f(x) \qquad \text{ou} \qquad \inf\{f(x) : x \in X\}.$$

L'*optimisation* est la discipline qui étudie ces problèmes. Elle traite des questions d'existence et d'unicité de solution de ce problème, de l'établissement de ses conditions d'optimalité, de sa dualisation, *etc.* Par ailleurs, une grande partie de cette discipline, et de cet ouvrage, est consacrée aux méthodes numériques qui ont été conçues pour résoudre les problèmes d'optimisation.

1.1.2 Vocabulaire

L'optimisation a son propre vocabulaire, dont nous allons dévoiler maintenant les premières bribes. On dit que X est l'*ensemble admissible* du problème et un point de X est dit *admissible*. Ces deux notions sont surtout pertinentes lorsque X est une partie d'un autre ensemble $\mathbb{E}$ (souvent un espace vectoriel réel), si bien que tout point de $\mathbb{E}$ n'est pas nécessairement admissible. Lorsque X est non vide, on dit que le problème est *réalisable*. La fonction f est appelée *critère*, *fonction-coût* ou *fonction-objectif* du problème. On appelle *valeur optimale* de (P_X) la borne inférieure

$$\mathrm{val}(P_X) := \inf\{f(x) : x \in X\}$$

des valeurs prises par f sur X. On dit que le problème (P_X) est *borné* si sa valeur optimale ne vaut pas $-\infty$. Dans le cas contraire, on dit qu'il *n'*est *pas borné* ou qu'il est *non borné*. On a alors

$$\inf_{x \in X} f(x) = -\infty,$$

ce qui se produit s'il existe une suite $\{x_k\} \subseteq X$ (éventuellement *stationnaire*, c'est-à-dire avec tous les x_k égaux pour k grand) telle que $f(x_k) \to -\infty$. Par ailleurs

$$\inf_{x \in X} f(x) = +\infty,$$

si $f(x) = +\infty$ pour tout $x \in X$. Il en sera donc ainsi si $X = \varnothing$ (l'ensemble vide). On a donc

$$\inf_{x \in \varnothing} f(x) = +\infty \qquad \text{et} \qquad \sup_{x \in \varnothing} f(x) = -\infty. \tag{1.1}$$

Ayant défini un problème d'optimisation, il faut maintenant préciser ce qu'en est une solution. On dit qu'un point x_* est une *solution* ou un *minimum* ou encore un *minimiseur* du problème (P_X) si

$$x_* \in X \qquad \text{et} \qquad \forall x \in X,\ f(x_*) \leqslant f(x). \tag{1.2}$$

Il faut donc *deux* conditions : que x_* soit admissible et qu'il donne à f une valeur qui n'excède pas (strictement) celle donnée à f par tout autre point admissible. On dit aussi qu'un tel x_* est solution/minimum/minimiseur *global* de (P_X) pour distinguer cette notion des autres qui vont suivre. On note indifféremment par

$$\mathrm{Sol}(P_X) \qquad \text{ou} \qquad \arg\min_{x\in X} f(x)$$

l'ensemble des solutions de (P_X).

Remarque 1.1 Lorsque le problème (P_X) a une solution, on écrit

$$\min_{x\in X} f(x),$$

donc avec l'opérateur 'min' plutôt que 'inf'.

Lorsque X est inclus dans un espace topologique $\mathbb{E}$, on peut définir la notion plus faible de *minimum local* de (P_X). Il s'agit d'un point x_* tel qu'il existe un voisinage V de x_* dans $\mathbb{E}$ tel que

$$x_* \in X \qquad \text{et} \qquad \forall x \in X \cap V,\ f(x_*) \leqslant f(x).$$

Une solution globale est aussi une solution locale (on prend $V = \mathbb{E}$). On parlera de solution ou de minimum global ou local *strict* si $f(x_*) < f(x)$, pour tout $x \in X \setminus \{x_*\}$ ou pour tout $x \in (X \cap V) \setminus \{x_*\}$, respectivement.

Il est important de pouvoir prendre en compte des problèmes d'optimisation dans lesquels le critère f peut prendre des valeurs infinies, $-\infty$ ou $+\infty$, parce que ces fonctions sont parfois générées par des procédures qui ne leur assurent pas nécessairement que des valeurs finies (c'est le cas de la dualité au chapitre 13, par exemple). Le *domaine effectif* (ou simplement *domaine*) de f est l'ensemble des points de X où elle ne prend pas la valeur $+\infty$ (mais elle peut y prendre la valeur $-\infty$, pour une raison qui sera vue au chapitre 3 sur les fonctions convexes). On le note

$$\mathrm{dom}\, f := \{x \in X : f(x) < +\infty\}.$$

Il est clair que les problèmes

$$\inf_{x\in X} f(x) \qquad \text{et} \qquad \inf_{x\in \mathrm{dom}\, f} f(x) \tag{1.3}$$

ont les mêmes valeurs optimales et les mêmes solutions. Si $\mathrm{dom}\, f = \varnothing$, les valeurs optimales sont $+\infty$ (à gauche parce que $f(x) = +\infty$ pour tout $x \in X$, à droite parce que $\mathrm{dom}\, f = \varnothing$ et que l'on a adopté la convention (1.1) qui s'avère donc essentielle ici) ; si $\mathrm{dom}\, f \neq \varnothing$, alors on ne modifie pas le problème de gauche en excluant de son ensemble admissible les points où f prend la valeur $+\infty$, comme on le fait à droite. L'équivalence entre les problèmes de (1.3) sera souvent utilisée.

1.1.3 Restrictions

> *In our opinion, the main fact, which should be known to any person dealing with optimization methods, is that in general* optimization problems are unsolvable. *This statement, which is usually missing in standard optimization courses, is very important for an understanding of optimization theory and its development in the past and in the future.*
>
> Y. Nesterov [413].

Présenté comme ci-dessus, le problème (P_X) peut être très général, mais les méthodes théoriques et algorithmiques étudiées dans ce manuel ne seront efficaces que sur un petit sous-ensemble de ces problèmes, qui contient toutefois beaucoup de ceux qui se posent en pratique, mais en écarte aussi beaucoup d'autres. Les restrictions présentes dans (P_X) ou que nous nous imposerons, faute de pouvoir tout faire, sont les suivantes.

- L'ensemble d'arrivée de f est un espace vectoriel de dimension un, ce qui veut dire que l'on ne cherche à minimiser qu'un seul critère. Lorsque l'espace d'arrivée est de dimension supérieure, on parle d'*optimisation multicritère*. Nous n'aborderons pas ces problèmes dans cet ouvrage, bien qu'il soit fait allusion à la notion d'optimalité au sens de Pareto à l'exercice 3.14.
- Même si cela n'apparaît pas dans la formulation générale de (P_X), on éliminera également de nos préoccupations une autre classe importante de problèmes, ceux pour lesquels les variables sont entières : X est une partie de $\mathbb{N}^n$. Ces problèmes d'*optimisation en nombres entiers* ou *combinatoire* sont d'une autre nature que ceux qui peuvent être résolus par les algorithmes que nous étudierons (pour une introduction à ces problèmes, voir par exemple [429]). Ces derniers auront besoin d'une certaine régularité des données. Il faudra une topologie sur X et un critère f au moins continu, si possible différentiable (éventuellement dans un sens généralisé). Cette restriction à des classes de fonctions particulières permet aussi d'échapper au verdict étonnant et fâcheux, selon lequel tous les algorithmes sont équivalents, si on moyenne leur performance sur l'ensemble des fonctions [550 ; 1997], affirmation qui doit d'ailleurs être nuancée [23 ; 2007].
- Dans le même ordre d'idée, les algorithmes que nous étudierons ne seront efficaces que pour trouver des *minima locaux*. Trouver un minimum global d'une fonction qui a beaucoup de minima locaux s'apparente en effet souvent à un problème combinatoire (par exemple lorsque l'ensemble des minima locaux est discret), lequel a été éliminé de nos préoccupations ci-dessus. Les algorithmes locaux, c'est-à-dire ceux trouvant des minima locaux, sont toutefois utiles, car ils sont souvent très efficaces et sont d'ailleurs parfois utilisés dans certaine méthode d'optimisation globale. On peut en fait souvent montrer que plus les fonctions à minimiser sont régulières et plus rapide sera la convergence *locale* des itérés générés par un algorithme sachant utiliser cette régularité de manière idoine.
- Quand il sera question d'algorithmes, nous travaillerons toujours *en dimension finie*, c'est-à-dire que l'ensemble admissible X sera une partie d'un espace vectoriel de dimension finie sur $\mathbb{R}$ (par exemple, l'espace vectoriel $\mathbb{R}^n$ des n-uplets

$(x_1, \ldots, x_n)$ ou l'espace vectoriel $\mathcal{S}^n$ des matrices réelles d'ordre n symétriques). Les composantes de x peuvent alors être vues comme des paramètres servant à rendre optimal un système. En pratique, les problèmes de dimension infinie se rencontrent fréquemment, par exemple lorsqu'il s'agit de déterminer une trajectoire optimale ou une forme optimale. Il s'agit alors de déterminer une fonction plutôt qu'un vecteur. Lorsqu'on veut résoudre ces problèmes, il est nécessaire de passer par une *phase de discrétisation* qui, en utilisant une technique adéquate, construit un problème approché en dimension finie qui pourra être résolu sur ordinateur par les algorithmes vus dans cet ouvrage.

1.2 Existence de solution

Si l'ensemble admissible X de (P_X) est non vide, que ce problème soit borné ou non, il existe ce que l'on appelle une *suite minimisante*. C'est une suite $\{x_k\}$ vérifiant les propriétés suivantes :

$$x_k \in X \text{ et } f(x_k) \text{ converge vers } \mathrm{val}(P_X).$$

Il suffit en effet de se donner une suite de réels $\varepsilon_k \downarrow 0$ (qui converge vers zéro par des valeurs strictement positives) et d'observer que, par définition de la borne inférieure, on peut trouver un point $x_k \in X$ tel que $\mathrm{val}(P_X) \leqslant f(x_k) \leqslant \mathrm{val}(P_X) + \varepsilon_k$. On peut même supposer que la suite $\{f(x_k)\}$ est décroissante et, lorsque f est $\mathcal{C}^{1,1}$, que $f'(x_k) \to 0$ (voir le lemme 6.14).

Il faut se garder de confondre la notion d'existence de solution, existence de x_* vérifiant (1.2), et celle de l'existence d'une borne inférieure $\mathrm{val}(P_X)$ finie. Par exemple, si f est la fonction définie sur $X = \mathbb{R}$ par $f(x) = e^x$, le problème (P_X) n'a pas de solution alors que sa borne inférieure est nulle.

La suite de cette section est formée de variations autour du théorème de Weierstrass.

Théorème 1.2 (Weierstrass, existence d'un minimum) *Si X est un compact non vide et si $f : X \to \overline{\mathbb{R}}$ est semi-continue inférieurement, alors (P_X) a au moins une solution.*

Démonstration. Soit $\{x_k\}$ une suite minimisante : $x_k \in X$ et $f(x_k) \to \mathrm{val}(P_X)$. Comme X est compact, on peut en extraire une sous-suite, encore notée $\{x_k\}$, convergente, disons vers $\bar{x} \in X$. Par le caractère s.c.i. de f, on a $f(\bar{x}) \leqslant \liminf f(x_k) = \mathrm{val}(P_X)$. Dès lors $\bar{x}$ est solution de (P_X). □

Comme $\inf f = -\sup(-f)$ (identité rappelée à la proposition 1.5 ci-dessous), on déduit de ce résultat qu'une fonction semi-continue supérieurement atteint sa borne supérieure sur un compact. Une fonction continue étant à la fois semi-continue inférieurement et semi-continue supérieurement, elle atteint ses bornes inférieure et supérieure sur un compact.

En dimension finie un ensemble est compact s'il est fermé et borné. La propriété de compacité est plus difficile à obtenir en dimension infinie, mais le théorème 1.2

est si important que l'on a été amené à affaiblir la topologie des espaces normés de manière à avoir plus de compacts, tout en gardant suffisamment de fonctions s.c.i. (voir [79 ; 1983]).

Supposons que X soit donné par des contraintes fonctionnelles d'égalité et d'inégalité au sens large, c'est-à-dire qu'il est de la forme :

$$X = \{x \in \mathbb{E} : c_E(x) = 0,\ c_I(x) \leqslant 0\},$$

où $\mathbb{E}$ est une espace topologique et $c_E : X \to \mathbb{R}^{m_E}$ et $c_I : X \to \mathbb{R}^{m_I}$ sont deux applications (m_E et m_I sont deux entiers). L'inégalité $c_I(x) \leqslant 0$ signifie que toutes les composantes de $c_I(x) \in \mathbb{R}^{m_I}$ doivent être négatives. Alors, X est fermé si c_E et c_I sont continues. On peut en effet écrire

$$X = c_E^{-1}(\{0\}) \bigcap c_I^{-1}(\mathbb{R}_-^{m_I}),$$

où $c_E^{-1}(\{0\})$ et $c_I^{-1}(\mathbb{R}_-^{m_I})$ sont fermés comme images réciproques par des applications continues des fermées $\{0\}$ et $\mathbb{R}_-^{m_I}$ de $\mathbb{R}^{m_E}$ et $\mathbb{R}^{m_I}$ respectivement.

L'hypothèse « X compact » est souvent restrictive, en particulier, elle n'a pas lieu pour les problèmes sans contrainte. Dans le corollaire suivant, on montre que, *en dimension finie* (le résultat est faux en dimension infinie), on peut remplacer dans l'énoncé du théorème de Weierstrass, l'hypothèse « X compact » par « X fermé et f coercive ».

Définition 1.3 (fonction coercive) Soit $\mathbb{E}$ un espace vectoriel normé. Une fonction $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ est dite *coercive* sur une partie non bornée X de $\mathbb{E}$ si

$$\lim_{\substack{x \in X \\ \|x\| \to \infty}} f(x) = +\infty \tag{1.4}$$

ou de manière plus précise

$$\forall\, \nu \in \mathbb{R}, \quad \exists\, \rho \geqslant 0 : \quad (x \in X \text{ et } \|x\| \geqslant \rho) \quad \Longrightarrow \quad f(x) \geqslant \nu. \tag{1.5}$$

Si l'on ne spécifie pas la partie X, il est sous-entendu que $X = \mathbb{E}$. □

Insistons bien sur le fait que, lorsque $X \neq \mathbb{E}$, la coercivité sur X est plus faible que le fait de demander que f tende vers l'infini à l'infini (c'est-à-dire pour $\|x\| \to \infty$). Ici on demande que cela ne soit vrai que pour des $x \in X$. Par ailleurs, l'exercice 1.3 propose une expression équivalente de la coercivité, à savoir que les intersections avec X des ensembles de sous-niveau de f sont bornées :

$$\forall\, \nu \in \mathbb{R}, \qquad \{x \in X : f(x) \leqslant \nu\} \text{ est borné.}$$

L'expression de la coercivité d'une forme bilinéaire est examinée à l'exercice 1.4.

Corollaire 1.4 *Soient X est une partie fermée non vide d'un espace vectoriel de dimension finie et $f : X \to \overline{\mathbb{R}}$ est une fonction semi-continue inférieurement et coercive. Alors (P_X) a au moins une solution.*

Démonstration. Soient[1] $x_0 \in X$ (non vide) et

$$X_0 := \{x \in X : f(x) \leqslant f(x_0)\}.$$

Cet ensemble est non vide et compact (il est fermé parce que f est semi-continue inférieurement sur X, borné grâce à (1.4) et est une partie d'un espace vectoriel de dimension finie). Alors, d'après le théorème, le problème

$$\begin{cases} \min f(x) \\ x \in X_0, \end{cases}$$

a une solution x_*. Celle-ci est clairement solution de (P_X), puisque $\forall x \in X \setminus X_0$, on a $f(x) \geqslant f(x_0) \geqslant f(x_*)$. □

Les techniques de démonstration d'existence de solutions de problèmes sont nombreuses. Passons en revue celles qui concernent les problèmes d'optimisation et les systèmes d'équations non linéaires et qui seront abordées dans cet ouvrage.

- Les résultats d'existence de solutions de problèmes d'optimisation présentés ci-dessus sont de *nature topologique* et sont fondés sur le comportement de f à l'infini (pour clarifier ce point, il suffit de remplacer f par $f + \mathcal{I}_X$, où $\mathcal{I}_X$ est la fonction indicatrice de l'ensemble X ou de se rappeler l'hypothèse de coercivité utilisé dans le corollaire 1.4). Cette approche sera systématisée pour les problèmes convexes par l'utilisation de la fonction asymptotique (section 3.3.4), ce qui conduira au résultat d'existence de la proposition 3.28 (voir son point (ii)). Elle s'utilise aussi pour les problèmes non convexes [26], mais nous n'aborderons pas ce sujet ici. On peut rattacher les résultats d'existence de solution d'un problème d'optimisation linéaire (proposition 2.19) ou quadratique (théorème **??**) à cette théorie asymptotique, mais cela demande un peu de gymnastique intellectuelle.
- Une autre possibilité est l'*approche analytique*, fondée sur les conditions d'optimalité qui seront établies au chapitre 4 : si l'on peut montrer l'existence d'un point stationnaire (c'est-à-dire une solution des conditions d'optimalité) par une méthode appropriée (pour les problèmes quadratiques sans contrainte d'inégalité, il s'agit d'un simple système linéaire) et si le problème d'optimisation est convexe, alors ce point stationnaire en est une solution.
- Une troisième approche nous viendra de de l'*analyse convexe* (chapitres 2 et 3) et de la *dualité* (chapitre 13). Elle consiste à montrer que le problème d'optimisation considéré est le dual d'un autre problème (section 13.1.1) dont la fonction valeur

[1] Il faudrait écrire *Soit* au singulier [264 ; §§ 901(d) et 1045(c)], de la même manière que l'on écrit *vive les vacances* et pas *vivent les vacances* [264 ; §§ 901(e) et 1045(c)]. Nous continuerons pourtant d'écrire avec obstination *soit un objet* et *soient deux objets*, maintenant ainsi une tradition qui ne semble plus se perpétuer que chez les mathématiciens.

(définition 4.48) est sous différentiable en zéro (section 3.6). Cette technique sera par exemple utilisée pour établir le théorème 13.17.

- Le lemme de Farkas (proposition 2.40) et les théorèmes de l'alternatives (exercice 2.36) qui en découlent permettent d'assurer l'existence d'un point satisfaisant des contraintes affines ; voir la discution autour de (2.39). Lorsque des conditions de qualification sont satisfaites, ce lemme permet d'assurer l'existence de multiplicateurs optimaux (section 4.4), qui sont parfois solutions d'un problème d'optimisation dual (chapitre 13).
- Enfin pour montrer l'existence d'un zéro d'un système d'équations non linéaires, nous verrons un résultat (le théorème 9.3 de Kantorovitch) qui est apparenté aux théorèmes d'*existence de point fixe*.

1.3 Problèmes d'optimisation équivalents

Un problème d'optimisation peut se formuler de différentes manières. Certaines formulations permettent de mieux comprendre le problème, d'autres se prêtent à une résolution numérique plus efficace. Les codes d'optimisation tentent d'accepter des formulations les plus générales possibles de manière à pouvoir résoudre le plus grand nombre de problèmes avec l'algorithme implémenté. Par ailleurs, pour de multiples raisons (simplification, mise en évidence de la structure, convention, *etc*), l'étude des algorithmes se fait sur des formulations particulières qui doivent toutefois être suffisamment générales pour pouvoir représenter tous les problèmes d'une classe donnée. La question de savoir si deux problèmes sont équivalents ou si une formulation particulière est représentative d'une classe donnée de problèmes se pose donc souvent. Cette notion d'*équivalence entre problèmes* n'a pas de définition précise, mais elle doit certainement signifier que les solutions d'une formulation peuvent se déduire aisément des solutions de l'autre et que les valeurs optimales des deux formulations ont un lien bien défini entre elles. L'équivalence entre deux problèmes d'optimisation est parfois subtile (voir le chapitre 13 sur la dualité), mais on peut dès à présent donner quelques règles générales élémentaires.

Sachant qu'un problème accepte souvent plusieurs formulations, il est naturel (dans un manuel d'optimisation bien sûr) de se demander s'il n'en existe pas une meilleure que les autres. Cela dépend du critère que l'on se donne, de l'objectif que l'on se fixe. Si l'on s'intéresse à l'analyse du problème, les formulations les plus simples et faisant apparaître au mieux la structure seront préférables. Si l'on s'intéresse à la résolution numérique, il peut être utile de savoir que beaucoup de numériciens pensent qu'il existe une espèce de *loi de conservation des ennuis*, selon laquelle certaines difficultés essentielles ne peuvent pas être supprimées en changeant de formulation (pour autant que celle considérée au départ ne soit pas farfelue), comme la combinatoire, le mauvais conditionnement, la difficulté liée aux inégalités, *etc*. Nous y ferons souvent allusion (déjà dans l'exercice 1.6 de ce chapitre).

Cet ouvrage traite essentiellement de problèmes de minimisation, en particulier parce que les *problèmes de maximisation* leur sont équivalents, dans un sens que nous allons préciser. Ceci implique qu'il suffit d'étudier une seule des deux classes de problèmes. Le choix de la minimisation s'impose alors par le fait qu'il est naturel de minimiser les fonctions convexes et que ces dernières sont bien étudiées en analyse

convexe (il n'y a pas d'analyse concave, car la notion d'ensemble concave n'est pas un bon concept). Cet argument est repris dans le chapitre suivant et résumé par la chaîne d'implications (2.1).

Proposition 1.5 (maximisation) *Soient X un ensemble et $f : X \to \overline{\mathbb{R}}$ une application. Alors les problèmes*

$$\inf_{x\in X} f(x) \qquad et \qquad \sup_{x\in X} \big(-f(x)\big)$$

ont les mêmes solutions et des valeurs optimales qui s'opposent :

$$\inf_{x\in X} f(x) = -\sup_{x\in X} \big(-f(x)\big). \tag{1.6}$$

Démonstration. Quel que soit $x \in X$, on a $\inf f \leqslant f(x)$ et $-f(x) \leqslant \sup(-f)$, donc $-\inf f \geqslant -f(x)$ et $f(x) \geqslant -\sup(-f)$. On en déduit que $-\inf f \geqslant \sup(-f)$ et $\inf f \geqslant -\sup(-f)$, d'où l'égalité (1.6).

D'après ce qui précède, $\bar{x}$ est solution de $\inf f$ si, et seulement si, $f(\bar{x}) = \inf f$ ou $-f(\bar{x}) = \sup(-f)$; donc si, et seulement si, $\bar{x}$ est solution de $\sup(-f)$. □

Venons-en maintenant aux questions liées à la *minimisation emboîtée*. Si X est une réunion d'ensembles, est-il équivalent de minimiser le critère sur chacun de ces ensembles et de minimiser les valeurs ainsi obtenues ? La réponse est affirmative, même s'il s'agit d'une collection non dénombrable d'ensembles, ayant éventuellement des points communs, mais il faut bien comprendre ce que cela veut dire (la remarque 1.7 ci-dessous va le préciser).

Proposition 1.6 (minimisation emboîtée I) *Soient $\{X_i\}_{i\in I}$ une famille quelconque d'ensembles pouvant avoir des points en commun, $X = \cup_{i\in I} X_i$ leur union et $f : X \to \overline{\mathbb{R}}$ une application. Alors*

$$\inf_{x\in X} f(x) = \inf_{i\in I} \left(\inf_{x\in X_i} f(x) \right). \tag{1.7}$$

De plus, x_* est solution du problème de gauche dans (1.7), avec i_* tel que $x_* \in X_{i_*}$, si, et seulement si, i_* est solution du problème de droite dans (1.7) et x_* est solution du problème $\inf_{x\in X_{i_*}} f(x)$.

Remarque 1.7 Il faut comprendre l'expression $\inf_{i\in I} (\inf_{x\in X_i} f(x))$ dans (1.7) comme le problème de minimisation en $i \in I$ de la fonction φ définie par

$$\varphi(i) := \inf_{x\in X_i} f(x). \tag{1.8}$$

Le problème de minimisation dans (1.8) est, quant à lui, appelé le *problème interne* associé à $i \in I$. □

Démonstration. Pour tout $i \in I$, on a $X_i \subseteq X$ et donc $\inf_{x\in X} f(x) \leqslant \inf_{x\in X_i} f(x)$. Comme le membre de gauche ne dépend pas de i, on a $\inf_{x\in X} f(x) \leqslant \inf_{i\in I} \inf_{x\in X_i} f(x)$. Inversement, pour tout $x_0 \in X$, il existe un $i_0 \in I$ tel que $x \in X_{i_0}$. Donc $f(x_0) \geqslant \inf_{x\in X_{i_0}} f(x)$ et forcément $f(x_0) \geqslant \inf_{i\in I} \inf_{x\in X_i} f(x)$. Cette dernière inégalité est vraie quel que soit $x_0 \in X$, qui n'apparaît que dans le membre de gauche, si bien que $\inf_{x\in X} f(x) \geqslant \inf_{i\in I} \inf_{x\in X_i} f(x)$. L'identité (1.7) est démontrée.

Par ailleurs, si $x_* \in X_{i_*}$ est solution du problème de gauche dans (1.7), on a $f(x_*) \leqslant f(x)$ pour tout $x \in X$ et donc certainement pour tout $x \in X_{i_*}$, si bien que x_* est solution du problème interne associé à i_* et $f(x_*) = \varphi(i_*)$, où φ est définie par (1.8). On a aussi $f(x_*) \leqslant f(x)$ pour tout $x \in X_i$, donc $\varphi(i_*) \leqslant \varphi(i)$ si bien que i_* est solution du problème de droite dans (1.7). Inversement, on a successivement

$$\begin{aligned}
f(x_*) &= \inf_{x\in X_{i_*}} f(x) \quad [x_* \text{ est solution du problème interne } i_*] \\
&= \varphi(i_*) \quad [\text{définition de } \varphi] \\
&= \inf_{i\in I} \varphi(i) \quad [i_* \text{ solution du problème de droite dans (1.7)}] \\
&= \inf_{i\in I} \left(\inf_{x\in X_i} f(x) \right) \quad [\text{définition de } \varphi] \\
&= \inf_{x\in X} f(x) \quad [\text{par (1.7)}].
\end{aligned}$$

Donc x_* est solution du problème de gauche dans (1.7). □

Voici deux corollaires bien utiles de la proposition 1.6.

Corollaire 1.8 (minimisation emboîtée II) *Soient X et Y deux ensembles et $f : X \times Y \to \overline{\mathbb{R}}$ une application. Alors*

$$\inf_{(x,y)\in X\times Y} f(x,y) = \inf_{x\in X} \left(\inf_{y\in Y} f(x,y) \right) = \inf_{y\in Y} \left(\inf_{x\in X} f(x,y) \right). \tag{1.9}$$

De plus, (x_*, y_*) est solution du problème de gauche dans (1.9) si, et seulement si, x_* est solution du problème du milieu dans (1.9) et y_* est solution du problème interne $\inf_{y\in Y} f(x_*, y)$ ou encore, si, et seulement si, y_* est solution du problème de droite dans (1.9) et x_* est solution du problème interne $\inf_{x\in X} f(x, y_*)$.

Démonstration. Il suffit d'écrire $X \times Y = \cup_{x\in X}(\{x\} \times Y) = \cup_{y\in Y}(X \times \{y\})$ et d'appliquer la proposition 1.6. □

Remarque 1.9 Le problème de droite dans (1.9) ne veut pas dire que pour minimiser $f(x, y)$, il suffit de minimiser $y \mapsto f(x_0, y)$, pour un $x_0 \in X$ arbitraire, dont la solution serait $\bar{y}$ (si elle existe !), et ensuite de minimiser $x \mapsto f(x, \bar{y})$. Il signifie que minimiser $(x, y) \mapsto f(x, y)$ équivaut à minimiser $x \mapsto \varphi(x)$, où $\varphi(x) := \inf_{y\in Y} f(x, y)$. Pour chaque x, il y a donc un problème de minimisation à résoudre pour déterminer $\varphi(x)$.

En outre, l'identité (1.9) nous apprend que l'on peut inverser l'ordre dans lequel sont pris deux minimisations successives (ou deux maximisations successives) sans

modifier la valeur optimale. Il en va tout autrement si une minimisation est suivie d'une maximisation (ou inversement), comme le montrera la section 13.1 sur la dualité min-max. □

Corollaire 1.10 (minimisation emboîtée III) *Soient U et V deux ensembles, X une partie de $U \times V$ et $f : X \to \overline{\mathbb{R}}$. Alors*

$$\inf_{x\in X} f(x) = \inf_{u\in U} \left(\inf_{v\in X_u} f(u,v) \right) = \inf_{v\in V} \left(\inf_{u\in X^v} f(u,v) \right), \tag{1.10}$$

où

$$X_u := \{v \in V : (u,v) \in X\} \qquad \text{et} \qquad X^v := \{u \in U : (u,v) \in X\}.$$

De plus, $x_* = (u_*, v_*)$ est solution du problème de gauche dans (1.10) si, et seulement si, u_* est solution du problème du milieu dans (1.10) et v_* est solution du problème interne $\inf_{v\in X_{u_*}} f(u_*, v)$ ou encore, si, et seulement si, v_* est solution du problème de droite dans (1.10) et u_* est solution du problème interne $\inf_{u\in X^{v_*}} f(u, v_*)$.

Démonstration. On définit $\tilde{f} : U \times V \to \overline{\mathbb{R}}$ par

$$\tilde{f}(x) = \begin{cases} f(x) & \text{si } x \in X \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases}$$

et on applique le corollaire 1.8 à $\tilde{f}$. □

Certains algorithmes s'étudient sur des problèmes dont le critère est linéaire (voir, par exemple, le chapitre **??** sur les points intérieurs). Il n'y a pas de restriction dans ce choix si le problème admet déjà des contraintes non linéaires, car on peut toujours *faire passer un terme du critère en contrainte* par l'équivalence mise en évidence dans la proposition suivante.

Proposition 1.11 (passage d'un terme du critère en contrainte) *Soient X un ensemble et f, $g : X \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ deux fonctions. Alors*

$$\inf_{x\in X} f(x) + g(x) = \inf_{\substack{(x,\gamma)\in X\times\mathbb{R} \\ g(x)\leqslant\gamma}} f(x) + \gamma. \tag{1.11}$$

De plus, si x_* est solution du problème de gauche dans (1.11) et si $g(x_*)$ est fini, alors $(x_*, g(x_*))$ est solution du problème de droite. Inversement, si (x_*, γ_*) est solution du problème de droite dans (1.11), alors x_* est solution du problème de gauche et $\gamma_* = g(x_*)$.

Si $f = 0$, le problème de droite dans (1.11) consiste de trouver le couple (x, γ) dans l'*épigraphe* de g, qui est l'ensemble

$$\operatorname{epi} g := \{(x,\gamma) \in X \times \mathbb{R} : g(x) \leqslant \gamma\},$$

avec l'ordonnée γ la plus petite possible.

DÉMONSTRATION. En appliquant le corollaire 1.10, on obtient l'égalité en (1.11) :

$$\inf_{\substack{(x,\gamma)\in X\times\mathbb{R}\\ g(x)\leqslant\gamma}} f(x)+\gamma = \inf_{x\in X}\left(\inf_{\substack{\gamma\in\mathbb{R}\\ g(x)\leqslant\gamma}} f(x)+\gamma\right) = \inf_{x\in X} f(x)+g(x). \tag{1.12}$$

Soit $x_*\in X$ une solution du problème de gauche dans (1.11) telle que $\gamma_* := g(x_*)$ soit fini. Alors $(x_*,\gamma_*)\in \operatorname{epi} g$ (admissibilité pour le problème de droite). De plus, pour tout $(x,\gamma)\in\operatorname{epi} g$, on a $f(x_*)+\gamma_* = f(x_*)+g(x_*) \leqslant f(x)+g(x)$ [car x_* est solution du problème de gauche] $\leqslant f(x)+\gamma$. Donc (x_*,γ_*) est solution du problème de droite.

Inversement, soit (x_*,γ_*) une solution du problème de droite dans (1.11), c'est-à-dire du problème de gauche dans (1.12). D'après le corollaire 1.10, x_* est solution du problème du milieu dans (1.12) (c'est-à-dire solution du problème de gauche dans (1.11)) et γ_* est solution du problème interne avec $x=x_*$ (c'est-à-dire $\gamma_* = g(x_*)$). □

1.4 Classification des problèmes d'optimisation et algorithmique associée

Il est rare qu'il y ait un unique algorithme pour résoudre un problème particulier. Le choix de l'algorithme le mieux adapté nécessite un savoir et une expérience que ces notes vont tenter de forger. La première question à se poser concerne la détermination de la classe de problèmes à laquelle appartient celui que l'on cherche à résoudre. On regroupe les problèmes d'optimisation en fonction de leur structure et c'est bien sûr celle-ci que doivent mettre à profit les algorithmes. La classification ci-dessous suit celle que nous adopterons pour donner les conditions conditions d'optimalité au chapitre 4.

Il ne s'agit pas ici de donner les détails sur toutes les structures de problèmes que l'on peut rencontrer, d'autant moins que certains aspects ne sont pas nécessairement compréhensibles à ce stade de l'ouvrage, mais de donner un premier aperçu de l'optimisation différentiable, en renvoyant aux chapitres ou sections appropriés, si le sujet est effectivement traité dans ce livre. En chemin, nous dirons quelques nots sur les principaux algorithmes utilisés pour résoudre chaque classe de problèmes.

Avant d'établir une classification des problèmes d'optimisation, faisons quelques remarques sur le calcul des dérivées des fonctions définissant le problème que l'on veut résoudre, de manière à éclairer la discussion qui suivra. Bien que systématique, ce calcul est souvent une tâche pénible et coûteuse, tant en investissement humain (pour écrire le code qui les calcule) qu'en temps de calcul (pour l'exécution du code ainsi écrit). Il est bien de savoir dès à présent, qu'il existe des outils informatiques permettant de générer du code calculant les dérivées (section 5.5) et que celui-ci évalue la dérivée m-ième $f^{(m)}(x)$, $m\geqslant 1$, en un point x donné, en un temps de l'ordre $O(T(f(x))^{m-1})$, où $T(f(x))$ est le temps de calcul de $f(x)$; en particulier un gradient

(dérivées premières) se calcule en un temps du même ordre que celui requis par le calcul de $f(x)$ (section 5.5.3). La raison pour laquelle on s'intéresse à ces dérivées vient de la règle empirique suivante.

> *Plus un algorithme d'optimisation est à même d'utiliser judicieusement un ordre élevé de dérivée des fonctions définissant un problème, plus il peut trouver la solution en peu d'itérations et plus celle-ci peut être calculée avec précision.*

Il n'y a pas de définition précise d'une *itération*. Ce concept dépend en particulier de l'algorithme considéré. À ce niveau de discussion, on peut toutefois voir une itération comme l'ensemble des opérations permettant de passer d'un *itéré* x_k, qui est un point approchant une solution x_*, au suivant (jusqu'ici c'est une tautologie) et pendant lesquelles les fonctions définissant le problème ne sont évaluées qu'une seule fois (ce n'est maintenant plus une tautologie, mais cette définition n'est pas toujours valable). L'observation ci-dessus doit être mise en perspective en notant que

- il est rarement simple de mettre au point un algorithme qui utilise « judicieusement » les dérivées d'ordre $\geqslant 3$;
- chaque itération prend en général plus de temps si l'on calcule des dérivées d'ordre élevé (temps de calcul pris par l'algorithme et le simulateur), si bien qu'un compromis doit être réalisé entre le temps utilisé pour calculer les dérivées et l'accélération de la convergence ;
- il est extrêmement rare de calculer les dérivées d'ordre $\geqslant 3$, car des dérivées secondes bien utilisées (chapitres 9 et 14) permettent d'obtenir une convergence quadratique (section 5.1.1), ce qui implique une convergence locale très rapide (de 5 à 10 itérations), quel que soit le nombre de variables.

1.4.1 Problèmes sans contrainte

Ce sont les problèmes les plus simples à résoudre, ce qui ne veut pas dire qu'ils ne présentent pas de difficulté. Ils sont de la forme

$$\inf_{x\in\mathbb{R}^n} f(x) \tag{1.13}$$

où $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ est une fonction à valeurs finies, qui peut ou non être différentiable ou convexe et dont on peut/veut ou non calculer les dérivées. Les conditions d'optimalité de ce problème sont données au point 2 du corollaire 3.55 (lorsque f est convexe) et à la section 4.2 (lorsque f n'est pas convexe).

Problèmes quadratiques

Le critère s'écrit ici

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

où $g \in \mathbb{R}^n$ et H est une matrice d'ordre n symétrique (la forme quadratique $x \mapsto x^\mathsf{T} H x$ ne voit que la partie symétrique d'une matrice carrée H). Ce problème a une solution si, et seulement si, $H \succcurlyeq 0$ (semi-définie positivité) et $g \in \mathcal{R}(H)$ (exercice 4.6). Il est alors équivalent à la résolution du système linéaire

$$Hx = -g.$$

On se ramène ainsi aux techniques numériques de l'algèbre linéaire, qui s'inspirent d'ailleurs parfois elles-mêmes de celles de l'optimisation. L'algorithme itératif emblématique de résolution de ces problèmes est l'*algorithme du gradient conjugué*, étudié à la section 8.2. Des techniques de factorisation de H peuvent aussi être utilisées.

Problèmes de moindres-carrés

On parle de problèmes de moindres-carrés si le critère est de la forme

$$f(x) = \frac{1}{2}\|F(x)\|_2^2,$$

où $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ est appelé *résidu*. Des disciplines aux noms variés, telles que l'*identification de paramètres* ou la *calibration de modèles*, conduisent à des problèmes de cette forme. On dit que le problème est *sous-déterminé* si $m < n$ et qu'il est *sur-déterminé* si $m > n$. On se ramène aussi souvent à de telles fonctions lorsque $m = n$ et que l'on cherche à *globaliser* l'algorithme de Newton pour trouver un zéro de F (section 9.3). Ces problèmes et l'algorithmique associée sont étudiés aux chapitre 17.

Lorsque F est affine ($F(x) = Ax - b$, A étant $m \times n$ et $b \in \mathbb{R}^m$), on parle de problèmes de moindres-carrés *linéaires* (section 17.1). C'est un cas particulier de problème quadratique dans lequel la hessienne est de la forme $A^\mathsf{T}A$. On montre que ce problème a toujours une solution (proposition 17.1). Les méthodes de résolution itératives et directes adaptées à cette structure sont décrites à la section 17.1.3.

Si F est non linéaire, on parle de problèmes de moindres-carrés *non linéaires* (section 17.3). Le fait que l'on puisse tirer parti de la structure de f dépend ici essentiellement de la possibilité de calculer à un coût raisonnable la jacobienne $J(x) := F'(x)$ du résidu ; c'est parfois le cas pour les problèmes de grande taille [147]. On dispose alors avec $J(x)^\mathsf{T}J(x)$ d'une approximation de la hessienne $\nabla^2 f(x)$, ne requérant que le calcul de dérivées premières et permettant d'accélérer notablement la convergence.

Problèmes non structurés

Minimiser une fonction f sans structure particulière, peut se faire par des techniques utilisant les dérivées premières (chapitre 10) ou secondes (chapitre 9). La convergence de ces méthodes se fonde sur celle de l'algorithme du gradient (section 7.1), même si celui-ci est trop lent et ne peut donc être recommandé.

1.4.2 Problèmes avec contraintes d'égalité ▲

Un problème avec contraintes d'égalité s'écrit

$$\begin{cases} \inf_x \ f(x) \\ c(x) = 0, \end{cases} \tag{1.14}$$

où $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ et $c : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ (en général $m \leqslant n$). Dans les cas réguliers, on cherche donc à minimiser f sur la variété $\{x \in \mathbb{R}^n : c(x) = 0\}$. La présence de contraintes d'égalité dans (1.14) rend bien sûr ce problème plus difficile à résoudre que le problème sans contrainte (1.13), mais pas de manière dramatique. Les techniques sont plus compliquées, mais restent dans le champ de l'analyse.

Problèmes quadratiques ▲

Dans ce problème le critère est quadratique et les contraintes sont linéaires :

$$\begin{cases} \inf_x \ g^\mathsf{T} x + \frac{1}{2} x^\mathsf{T} H x \\ Ax = b, \end{cases} \tag{1.15}$$

où $g \in \mathbb{R}^n$, $H \in \mathcal{S}^n$, A est $m \times n$ et $b \in \mathbb{R}^m$.

Problèmes avec contraintes linéaires ▲

Problèmes de commande optimale

Du point de vue de l'optimisation, on parle de *problème de commande optimale* lorsque le vecteur x peut être partitionné en deux groupes de variables $x = (y, u)$, avec $y \in \mathbb{R}^m$ est appelé *variable détat* et $u \in \mathbb{R}^{n-m}$ est appelé *variable de commande*, de telle sorte que

$$B_x := \frac{\partial c}{\partial y}(x) \text{ est inversible}$$

en tout point x d'intérêt. Par le théorème des fonctions implicites (théorème C.14), l'équation $c(y, u) = 0$, appelée alors *équation d'état*, permet de représenter (au moins conceptuellement) l'état comme une fonction de la commande

$$y = y(u),$$

de telle sorte que $c(y(u), u) = 0$ pour tout u d'intérêt. Cette représentation prend en compte la contrainte, si bien que (1.14) se ramène à un probléme sans contrainte

$$\inf_u \Big(\varphi(u) := f(y(u), u) \Big).$$

On peut calculer gradient et hessienne de φ par la technique de l'état adjoint (section 5.4).

Problèmes non structurés ▲

Comme pour les problèmes sans contrainte, l'algorithme de référence est l'algorithme de Newton (portant parfois le nom de SQP, chapitre 14).

1.4.3 Problèmes avec contraintes d'égalité et d'inégalité ▲

L'introduction de constraintes d'inégalité apporte une difficulté supplémentaire importante. Parallèle entre inégalités et non différentiabilité.

Problèmes linéaires ▲

Ils tiennent leur nom du fait que les données sont linéaires, mais la présence des inéaglité les rendent en fait non linéaires.

Problèmes quadratiques ▲

Les problèmes convexes sont polynomiaux, les autres sont NP-ardus.

Problèmes non structurés ▲

SQP ou PI.

1.4.4 Problèmes avec contraintes abstraites ▲

Problèmes semi-définis positifs

Problèmes coniques

1.5 Exemples de problèmes d'optimisation ▲

Les problèmes d'optimisation interviennent dans la modélisation de nombreux problèmes rencontrés par l'ingénieur, le physicien, le chercheur. On peut même dire que la connaissance des techniques d'optimisation permet de formaliser des problèmes au moyen des concepts de l'optimisation et par là d'en faciliter la résolution. Dans cette section, nous présentons quelques exemples de problèmes d'optimisation qui, nous l'espérons, pourront servir de motivation à notre étude.

1.5.1 Prévision météorologique

1.5.2 Conception de verres ophtalmiques progressifs

1.5.3 Commande optimale d'un engin sous-marin tracté

Notes

Auslender et Teboulle [26 ; 2003] dérivent des résultats d'existence de solution de problèmes d'optimisation (convexes ou non) en utilisant une notion de fonction asymptotique qui étend celle que nous verrons pour les fonctions convexes au chapitre 3. Ils énoncent en particulier des conditions nécessaires et suffisantes d'existence de solution pour des fonctions propres et s.c.i. [26 ; théorème 3.4.1], bien que celles-ci ne soient pas toujours très simples à utiliser. On peut aussi s'intéresser à des résultats d'existence de solution généraux sur des espaces de Banach ou des espaces métriques complets [79, 560].

Malgré l'étendue du corpus de l'optimisation numérique, on peut trouver des synthèses plus ou moins courtes et détaillées donnant une vue d'ensemble de la discipline ; mentionnons [252, 221]. On en apprendra davantage dans les ouvrages généraux d'optimisation numérique, que nous citons par ordre chronologique : le livre de Fiacco et McCormick [192 ; 1968] a connu une renaissance au moment de l'émergence des méthodes de points intérieurs (chapitres **??**, 16 et **??**) ; Ortega et Rheinboldt [420 ; 1970] ont écrit un ouvrage très classique qui se concentre sur les méthodes itératives de résolution de systèmes d'équations non linéaires, en ayant toutefois une section consacrée à l'optimisation sans contrainte ; Gill, Murray et Wright [233 ; 1981] ; Ciarlet [113 ; 1982] ; McCormick [384 ; 1983] ; Fletcher [197 ; 1987] ; Culioli [134 ; 1994] ;

Nazareth [411 ; 1994] ; Bertsekas [46 ; 1995] ; Kelley [325 ; 1995] ; Gauvin [217 ; 1995] ; Hiriart-Urruty [293 ; 1996] dont l'ouvrage est davantage commenté au chapitre 3 ; Polak [435 ; 1997] ; Kelley [326 ; 1999] ; Conn, Gould et Toint [124 ; 2000] sur les régions de confiance ; Biegler et coll. [50 ; 2003] présentent une série de travaux sur l'optimisation de systèmes gouvernés par des équations aux dérivées partielles ; Boyd et Vandenberghe [75 ; 2004] donnent une introduction bien imagée et très abordable de l'optimisation convexe avec de nombreuses applications intéressantes, sans entrer dans la démonstration des résultats les plus fins ; Nesterov [413 ; 2004] ; Nocedal et Wright [418 ; 2006] ; Bonnans, Gilbert, Lemaréchal et Sagastizábal [66 ; 2006] sur l'optimisation sans contrainte, l'optimisation non différentiable, la programmation quadratique successive et les points intérieurs ; Ito et Kunisch [306 ; 2008] présentent la théorie et les algorithmes de l'optimisation en dimension infinie, Bertsekas [48 ; 2015].

Voici pour terminer cette introduction quelques sites de la Toile qu'il pourra être intéressant de visiter. Les sites

http://www-fp.mcs.anl.gov/otc/Guide/SoftwareGuide et
http://plato.asu.edu/guide.html

proposent des guides de codes d'optimisation. Le site de l'Inria

http://www-rocq.inria.fr/estime/modulopt/index.html

contient quelques codes spécialisés qui peuvent s'avérer utiles pour résoudre certains problèmes difficiles ou de très grande taille. À l'adresse

http://plato.la.asu.edu/bench.html,

on trouvera un répertoire de bancs d'essai (collection de problèmes-tests) pour les codes d'optimisation. Sur cette question, l'environnement Libopt qui propose une plate-forme permettant de coupler des solveurs a différentes collections de problèmes-tests pourra s'avérer utile :

http://www-rocq.inria.fr/estime/modulopt/libopt/libopt.html.

En optimisation non linéaire, signalons les collections de problèmes-tests CUTEST et COPS :

http://ccpforge.cse.rl.ac.uk/gf/project/cutest/wiki,
http://www-unix.mcs.anl.gov/~more/cops.

Pour d'autres codes d'analyse numérique et de mathématiques en général, on pourra consulter :

http://gams.nist.gov,
http://gams.nist.gov/serve.cgi,
http://www.netlib.org.

Exercices

1.1. *Inclusion et adhérence d'ensembles admissibles.*

1) Soit X_0 une partie non vide d'un ensemble X et $f : X \to \mathbb{R}$ une fonction. Alors
$$\inf_{x\in X} f(x) \leqslant \inf_{x_0\in X_0} f(x_0).$$
2) Soient X une partie non vide d'un espace topologique et $f : \bar{X} \to \mathbb{R}$ une application continue. Alors
$$\inf_{x\in \bar{X}} f(x) = \inf_{x\in X} f(x).$$

1.2. *Minimisation et maximisation d'une somme de fonctions.* Soient X un ensemble et f et $g : X \to \mathbb{R}$ deux applications. Montrez que
(i) $\inf_{x\in X} f(x) + \inf_{x\in X} g(x) \leqslant \inf_{x\in X}(f(x) + g(x))$,
(ii) $\sup_{x\in X} f(x) + \sup_{x\in X} g(x) \geqslant \sup_{x\in X}(f(x) + g(x))$.

1.3. *Deux notions de coercivité équivalentes.* Soient $\mathbb{E}$ un espace vectoriel normé, X une partie de $\mathbb{E}$ et $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ une fonction. Montrez que les propriétés suivantes sont équivalentes :
(i) f est *coercive* (au sens de la définition 1.3),
(ii) $\forall\, \nu \in \mathbb{R}$, l'ensemble $\{x \in X : f(x) \leqslant \nu\}$ est borné.

1.4. *Coercivité d'une forme bilinéaire.* Soient $\mathbb{E}$ un espace vectoriel normé et $a : \mathbb{E}\times\mathbb{E} \to \mathbb{R}$ une forme bilinéaire. Montrez que a est *coercive* si, et seulement si,
$$\exists\, \alpha > 0, \quad \forall\, x \in \mathbb{E} : \qquad a(x, x) \geqslant \alpha\|x\|^2. \tag{1.16}$$

1.5. *Optimisation globale par l'optimisation linéaire sur l'espace des mesures* [348]. Soient X une partie mesurable d'un espace vectoriel $\mathbb{E}$, $\mathcal{M}(X)$ l'ensemble des mesures sur X et $f : X \to \mathbb{R}$ une fonction. Alors l'infimum de f sur X est donné par la valeur optimale d'un problème d'optimisation linéaire sur $\mathcal{M}(X)$, à savoir
$$\inf_{x\in X} f(x) = \inf_{\substack{\mu\in\mathcal{M}(X)\\ \mu(X)=1\\ \mu\geqslant 0}} \int_X f \,\mathrm{d}\mu. \tag{1.17}$$

Remarque. On transforme ainsi le problème potentiellement non convexe de gauche (a priori difficile à résoudre numériquement) en un problème, celui de droite, à la structure très simple (il est linéaire) mais de dimension infinie.

1.6. *Problèmes d'optimisation équivalents.* Soient X un ensemble et $f_i : X \to \mathbb{R}$ des applications (pour i dans un ensemble d'indices quelconque I). Montrez que les problèmes ci-dessous ont les mêmes solutions $x_* \in X$:
$$\min_{x\in X} \sup_{i\in I} f_i(x) \qquad \text{et} \qquad \begin{cases} \min \alpha \\ f_i(x) \leqslant \alpha, \quad \forall i \in I \\ x \in X, \quad \alpha \in \mathbb{R}. \end{cases}$$

Remarque. Lorsque les f_i sont différentiables, on a remplacé le problème à gauche, qui est en général non différentiable mais n'a pas de contrainte fonctionnelle, par le problème à droite, qui est différentiable mais présente des contraintes fonctionnelles d'inégalité. On a remplacé la difficulté liée à la non-différentiabilité par celle liée à la présence de contraintes d'inégalité. C'est un exemple où la *loi de conservation des ennuis* se manifeste.

1.7. *Récritures différentiables.* Récrire sous une forme différentiable les problèmes d'optimisation suivants dans lesquels $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ et $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ sont des fonctions différentiables, X est une partie de $\mathbb{R}^n$ (définie par des fonctions différentiables) et une non-différentiabilité est présente du fait de l'utilisation des normes ℓ_1, notée $\|\cdot\|_1$, ou ℓ_∞, notée $\|\cdot\|_\infty$:

1) $\inf_x \{f(x) + \|F(x)\|_1 : x \in X\}$,
2) $\inf_x \{f(x) + \|F(x)\|_\infty : x \in X\}$.

2 Ensembles convexes

Convexity is a large subject which can hardly be addressed here, but much of the impetus for its growth in recent decades has come from applications in optimization. [...] *In fact the great watershed in optimization isn't between linearity and nonlinearity, but convexity and nonconvexity. Even for problems that aren't themselves of convex type, convexity may enter, for instance, in setting up subproblems as part of an iterative numerical scheme.*

R.T. Rockafellar [471 ; 1993].

We now take for granted that convex analysis is a good subject with worthwhile ideas, yet it was not always that way. There was actually a lot of resistance to it in the early days, from individuals who preferred a geometric presentation to one targeting concepts of analysis. Even on the practical plane, it's fair to say that little respect was paid to convex analysis in numerical optimization until around 1990, say.

R.T. Rockafellar sur le site Wikimization.

Les chapitres 2 et 3 présentent les éléments d'analyse convexe qui nous seront utiles pour étudier les problèmes d'optimisation et les algorithmes qui les résolvent. Le chapitre 2 s'intéresse aux ensembles convexes ; le chapitre 3 aux fonctions convexes. L'*analyse convexe* est une théorie située entre l'algèbre linéaire et l'analyse non linéaire, dans laquelle les objets étudiés, ensembles et fonctions, bien que non linéaires, sont contraints de vérifier une condition particulière qui leur confère des propriétés remarquables. C'est une théorie assez récente ; certains voient la naissance de sa version « moderne », celle renforçant le rôle de l'analyse, dans l'invention du sous-différentiel (section 3.6), de l'application proximale (section 3.7.1) et de l'inf-convolution (section 3.4.4) dans les années 1962-63 [119].

Cette théorie et ses concepts interviennent en optimisation pour de nombreuses raisons. Par exemple, l'écriture des conditions d'optimalité passe par le linéarisé de l'ensemble admissible, qui est un cône ; un objet qui n'appartient pas à l'algèbre linéaire mais à l'analyse convexe. Autre exemple : dans les problèmes d'optimisation convexe (c'est-à-dire avec un critère convexe et un ensemble admissible convexe), tous les points stationnaires sont des minima globaux, ce qui simplifie singulièrement le

problème[1]. Si l'analyse convexe joue un rôle prépondérant en optimisation, la phrase de R.T. Rockafellar donnée en épigraphe parlant de ligne de partage des eaux (*watershed*), nous semble devoir être relativisée ; on sait en effet qu'il existe des problèmes d'optimisation convexe qui sont NP-ardus (l'optimisation copositive [409, 61]) et donc aujourd'hui très difficiles à résoudre lorsque leur dimension est grande.

L'analyse convexe est une théorie très riche et d'une évidente élégance. C'est donc avec regret que nous avons cherché à en dire le moins possible, en ne développant que les concepts et les propriétés qui sont nécessaires à l'étude des quelques problèmes d'optimisation et méthodes de résolution que nous verrons dans cet ouvrage. Le lecteur intéressé pourra approfondir ses connaissances en s'immergeant dans les ouvrages spécialisés cités dans les notes à la fin du chapitre 3. Nous espérons toutefois que l'étude de ces deux chapitres apportera au lecteur une aisance suffisante dans cet univers merveilleux. Si la théorie est parfois difficile, elle contient aussi beaucoup de résultats simples à démontrer pourvu que l'on maîtrise la technique ; leur démonstration est alors proposée en exercice. Mais l'analyse convexe a aussi des affirmations simples à énoncer, qui semblent très naturelles, mais que l'on ne sait pas démontrer. On y prendra garde !

Le fait que l'*Analyse convexe* existe en tant que discipline des mathématiques, et pas l'*Analyse concave*, tient au fait que l'on définit aisément la notion d'ensemble convexe, alors que celle d'*ensemble concave* est moins naturelle, voire pratiquement inexistante. On définit alors les fonctions convexes comme celles ayant un épigraphe convexe (les fonctions concaves ont, elles, un *hypographe* convexe...). Il est normal de minimiser les fonctions convexes, pas de les maximiser, si bien que l'optimisation s'intéressera tout naturellement à la minimisation de fonctions et pas à leur maximisation. La chaîne logique des concepts est donc la suivante :

$$\text{ensemble convexe} \quad \longrightarrow \quad \text{fonction convexe} \quad \longrightarrow \quad \text{minimisation.} \tag{2.1}$$

Mais, on l'a vu (proposition 1.5), les problèmes de maximisation se ramènent aisément à des problèmes de minimisation.

Dans ce chapitre nous introduisons la notion d'ensemble convexe, donnons quelques exemples d'ensembles convexes (en particulier une description assez précise des polyèdres convexes), démontrons leurs principales propriétés (géométriques et topologiques) et décrivons quelques opérations sur les ensembles convexes (projection, séparation, prise du dual). En chemin, nous serons amenés à démontrer un résultat d'existence de solution pour les problèmes d'optimisation linéaire (proposition 2.19) qui nous sera aussi utile au chapitre 15.

Comme c'est le cas dans tout cet ouvrage, l'espace vectoriel sur lequel on travaille, noté $\mathbb{E}$, est supposé défini sur le *corps des réels* $\mathbb{R}$ et *de dimension finie* ; cela ne sera pas toujours précisé dans l'énoncé des résultats. Il n'y a alors pas de restriction à supposer qu'il est euclidien, c'est-à-dire muni d'un produit scalaire que l'on notera $\langle \cdot, \cdot \rangle$.

[1] Les problèmes d'optimisation à données polynomiales présentent aussi des propriétés remarquables, qui contraignent les possibilités d'une autre manière, mais c'est alors la géométrie algébrique plutôt que l'analyse convexe qui y joue un rôle clé. Nous n'aborderons pas ce domaine qui connaît un essor important depuis le début du XXIe siècle [349, 57, 350].

2.1 Définition et premières propriétés

Soient $\mathbb{E}$ un espace vectoriel de dimension finie sur $\mathbb{R}$ et x, $y \in \mathbb{E}$. On appelle *segment* de $\mathbb{E}$, un ensemble noté et défini comme suit

$$[x, y] := \{(1-t)x + ty : t \in [0, 1]\}.$$

Lorsque $x \neq y$, on définit les segments $[x, y[$, $]x, y]$ et $]x, y[$, en remplaçant dans la formule ci-dessus, l'intervalle $[0, 1]$ respectivement par les intervalles $[0, 1[$, $]0, 1]$ et $]0, 1[$. Lorsque $x = y$, les segments $[x, y[$, $]x, y]$ et $]x, y[$ sont vides, par définition.

On dit qu'une partie C de $\mathbb{E}$ est *convexe* si pour tout x, $y \in C$, le segment $[x, y]$ est contenu dans C. On dit aussi que C est « un convexe ». La figure 2.1 illustre cette

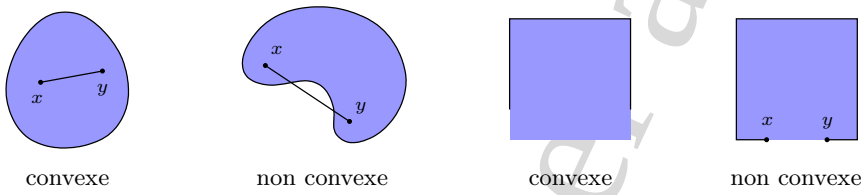


Fig. 2.1. Définition d'un ensemble convexe

notion. L'ensemble de gauche est convexe car il contient tous les segments $[x, y]$ avec des points x et y lui appartenant. Le second ne l'est pas car une partie du segment $[x, y]$ qui y est représenté n'est pas dans l'ensemble. Le cas des deux carrés à droite est plus délicat car la question se joue sur la frontière (la partie de celle-ci appartenant à l'ensemble est marquée d'un trait continu). Le carré de gauche est convexe, bien qu'il ne contienne pas toute sa frontière. Celui de droite ne l'est pas, car le segment $]x, y[$ ne lui appartient pas, alors que x et y sont supposés appartenir à l'ensemble. Cet exemple du carré n'est pas anodin, mais est destiné à faire prendre conscience au lecteur du fait que la validité d'une propriété (comme la convexité, la semi-continuité d'une fonction, sa sous-différentiabilité, *etc*) dépend souvent de ce qui se passe sur la frontière d'un ensemble ; on devra donc toujours traiter avec soin et précision ce qui peut apparaître comme un détail au premier abord.

Exemples et propriétés immédiates

Ci-dessous, $\mathbb{E}$, $\mathbb{E}_1$, $\mathbb{E}_2$ et $\mathbb{F}$ sont des espaces vectoriels. Les énoncés se démontrent tous sans difficulté.

1) La partie de $\mathbb{R}^n$ définie par $\mathbb{R}^n_+ := \{x \in \mathbb{R}^n : x \geqslant 0\}$ est un convexe appelé *orthant positif*. La notation $x \geqslant 0$ veut dire que $x_i \geqslant 0$ pour tout indice $i \in [1 : n]$.
2) La somme (de Minkowski) $C_1 + C_2 := \{x_1 + x_2 : x_1 \in C_1,\ x_2 \in C_2\}$ de deux convexes C_1 et C_2 de $\mathbb{E}$ est un convexe. Le produit $\alpha C := \{\alpha x : x \in C\}$ d'un scalaire $\alpha \in \mathbb{R}$ par un convexe C est un convexe (voir aussi le point 1 de l'exercice 2.1).
3) Si $\{C_i\}_{i \in I}$ est une famille quelconque de convexes de $\mathbb{E}$, alors leur intersection $\cap_{i \in I} C_i$ est un convexe (mais pas leur union !).

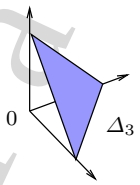
4) Soit $A : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ une application *linéaire*. L'image directe $A(C)$ (resp. l'image réciproque $A^{-1}(C)$) d'un convexe C de $\mathbb{E}$ (resp. de $\mathbb{F}$) par A est un convexe.

5) Soient $C_1 \subseteq \mathbb{E}_1$ et $C_2 \subseteq \mathbb{E}_2$. Alors $C_1 \times C_2$ est convexe dans $\mathbb{E}_1 \times \mathbb{E}_2$ si, et seulement si, C_1 et C_2 sont convexes.

6) On appelle *polyèdre convexe* de $\mathbb{E}$ un ensemble de la forme $\{x \in \mathbb{E} : Ax \leqslant b\}$, où $A : \mathbb{E} \to \mathbb{R}^m$ est une application linéaire, $b \in \mathbb{R}^m$ et l'inégalité $Ax \leqslant b$ se comprend composante par composante : $(Ax)_i \leqslant b_i$, pour tout $i \in [1\,{:}\,m]$. C'est donc l'intersection d'un nombre *fini* de demi-espaces. D'après ce qui précède, c'est un convexe.

7) On appelle *simplexe unité* de $\mathbb{R}^n$ l'ensemble défini par

$$\Delta_n := \left\{x \in \mathbb{R}^n : e^\mathsf{T} x = 1,\ x \geqslant 0\right\},$$



où $e = (1, \ldots, 1) \in \mathbb{R}^n$. C'est un convexe (intersection de deux convexes : un sous-espace affine et l'orthant positif).

8) On note $\mathcal{S}^n$ l'espace vectoriel des matrices d'ordre n symétriques. Il est de dimension $n(n+1)/2$. Les ensembles

$$\mathcal{S}^n_+ := \{A \in \mathcal{S}^n : A \text{ est semi-définie positive}\}$$
$$\mathcal{S}^n_{++} := \{A \in \mathcal{S}^n : A \text{ est définie positive}\}$$

sont convexes. En effet, si A et $B \in \mathcal{S}^n_+$, alors pour tout $t \in [0,1]$ et tout vecteur $v \in \mathbb{R}^n$, on a $v^\mathsf{T}((1-t)A + tB)v = (1-t)v^\mathsf{T}Av + tv^\mathsf{T}Bv \geqslant 0$, ce qui montre que $(1-t)A + tB \in \mathcal{S}^n_+$. On raisonne de même pour $\mathcal{S}^n_{++}$.

9) Si $\mathcal{A}$ est un sous-espace affine de $\mathcal{S}^n$, alors

$$\mathcal{S}^n_+ \cap \mathcal{A}$$

est évidemment un ensemble convexe (intersection de deux convexes). Beaucoup d'ensembles convexes peuvent se ramener à une telle description, au prix de quelques transformations algébriques. Souvent, le sous-espace affine est vu comme le noyau translaté d'une application linéaire $L : \mathcal{S}^n \to \mathbb{R}^m$:

$$\mathcal{A} = \{X \in \mathcal{S}^n : L(X) = b\},$$

où b est fixé dans $\mathbb{R}^m$. On peut aussi voir $\mathcal{A}$ comme l'image d'une application affine $\mathbb{R}^m \to \mathcal{S}^n$:

$$\mathcal{A} = \{A_0 + \textstyle\sum_{i=1}^m \alpha_i A_i : \alpha \in \mathbb{R}^m\},$$

où les matrices A_i sont fixées dans $\mathcal{S}^n$. Dans le premier ou le second cas, $X \in \mathcal{S}^n_+ \cap \mathcal{A}$ si, et seulement si, X vérifie les conditions suivantes

$$L(X) = b,\quad X \succcurlyeq 0 \qquad \text{ou} \qquad X = A_0 + \sum_{i=1}^m \alpha_i A_i,\quad X \succcurlyeq 0.$$

C'est ce qu'on appelle des *inégalités matricielles linéaires* (IML en abrégé, on devrait dire affine plutôt que linéaire).

2.2 Aspects géométriques

En algèbre linéaire, il est naturel de considérer le plus petit sous-espace vectoriel contenant un ensemble donné P de $\mathbb{E}$, ainsi que de son enveloppe affine qui est le plus petit sous-espace affine contenant cet ensemble (section 2.2.1). L'analyse convexe associe à P de nouveaux ensembles : son enveloppe convexe qui est le plus petit convexe contenant P (section 2.2.2), son enveloppe convexe fermée qui est le plus petit convexe fermé contenant P (section 2.5.5), son enveloppe conique qui est le plus petit cône *convexe* contenant P (section 2.2.3) et, lorsque P est convexe, son cône asymptotique (section 2.2.4) et ses faces (section 2.2.5).

2.2.1 Enveloppe affine

Soit P une partie d'un espace vectoriel $\mathbb{E}$. L'intersection de sous-espaces affines étant un sous-espace affine (exercice A.8), on peut parler du plus petit sous-espace affine contenant P, qui est donc l'intersection de tous les sous-espaces affines de $\mathbb{E}$ contenant P. C'est ce que l'on appelle l'*enveloppe affine* de P. On la note

$$\operatorname{aff} P := \bigcap \{A : A \text{ est un sous-espace affine de } \mathbb{E} \text{ contenant } P\}.$$

On appelle *combinaison affine* de $\mathbb{E}$, un élément x de $\mathbb{E}$ de la forme

$$x = \sum_{i=1}^{m} t_i x_i,$$

où $m \in \mathbb{N}^*$, $t = (t_1, \ldots, t_m) \in \mathbb{R}^m$ vérifie $e^\mathsf{T} t = 1$ et les vecteurs $x_i \in \mathbb{E}$.

Proposition 2.1 1) *Un ensemble est un sous-espace affine si, et seulement si, il contient toutes les combinaisons affines de ses éléments.*
2) *Si $P \subseteq \mathbb{E}$, alors* aff P *est l'ensemble des combinaisons affines des éléments de P :*

$$\operatorname{aff} P = \left\{ \sum_{i=1}^{m} t_i x_i : m \in \mathbb{N}^*,\ t \in \mathbb{R}^m,\ e^\mathsf{T} t = 1,\ x_i \in P \right\}. \tag{2.2}$$

Démonstration. 1) Soit A un sous-espace affine. Presque par définition (voir l'exercice A.7), A contient les combinaisons affines formées de deux de ses éléments. On raisonne ensuite par récurrence en supposant qu'un sous-espace affine A contient les combinaisons affines formées de m de ses éléments, avec un certain $m \geqslant 2$. Soient alors $m+1$ éléments $x_i \in A$ et des $t_i \in \mathbb{R}$ vérifiant $\sum_{i=1}^{m+1} t_i = 1$. Il y a au moins un des $t_i \neq 1$. Supposons que ce soit t_1. On écrit :

$$\sum_{i=1}^{m+1} t_i x_i = t_1 x_1 + (1-t_1)\left(\sum_{i=2}^{m+1} \frac{t_i}{1-t_1} x_i\right).$$

Cet élément est dans A car les facteurs de t_1 et de $1-t_1$ sont dans A (par récurrence pour le second). Réciproquement, on savait déjà qu'un ensemble contenant les combinaisons formées de deux de ses éléments est un sous-espace affine.

2) Soit X l'ensemble à droite dans (2.2). On vérifie facilement que cet ensemble contient P (prendre $m = 1$) et est affine, donc $\operatorname{aff} P \subseteq X$. Inversement, X est contenu dans l'ensemble défini comme à droite dans (2.2), mais avec des x_i pris dans $\operatorname{aff} P$ plutôt que dans P. D'après la première partie de la proposition, ce dernier ensemble est $\operatorname{aff} P$. Donc $X \subseteq \operatorname{aff} P$. □

On dit que les vecteurs $x_0, x_1, \ldots, x_p$ de $\mathbb{E}$ sont *affinement indépendants* si $p = 0$ ou si l'une des conditions équivalentes suivantes est vérifiée :

- (A_1) $\sum_{i=0}^{p} \alpha_i x_i = 0$ et $\sum_{i=0}^{p} \alpha_i = 0 \implies$ tous les α_i sont nuls,
- (A_2) les vecteurs $\{x_i - x_0 : i \in [1:p]\}$ sont linéairement indépendants,
- (A_3) quel que soit $j \in [0:p]$, les vecteurs $\{x_i - x_j : i \in [0:p],\ i \neq j\}$ sont linéairement indépendants.

On parle parfois de la *dimension d'un ensemble convexe* C : c'est la dimension de son enveloppe affine $\operatorname{aff}(C)$. Si $\dim C = p$, C contient au moins et au plus $p+1$ vecteurs affinement indépendants.

2.2.2 Enveloppe convexe

Soit P une partie de $\mathbb{E}$. L'intersection de convexes étant convexe, on peut parler du plus petit convexe contenant P, qui est donc l'intersection de tous les convexes contenant P. C'est ce que l'on appelle l'*enveloppe convexe* de P. On la note

$$\operatorname{co} P := \bigcap \{C : C \text{ est un convexe contenant } P\}.$$

On appelle *combinaison convexe* de $\mathbb{E}$, un élément x de $\mathbb{E}$ de la forme

$$x = \sum_{i=1}^{m} t_i x_i,$$

où $m \in \mathbb{N}^*$, $t = (t_1, \ldots, t_m) \in \Delta_m$ (simplexe unité de $\mathbb{R}^m$) et les vecteurs $x_i \in \mathbb{E}$.

Proposition 2.2 1) *Un ensemble est convexe si, et seulement si, il contient toutes les combinaisons convexes de ses éléments.*

2) *Si $P \subseteq \mathbb{E}$, alors $\operatorname{co} P$ est l'ensemble des combinaisons convexes des éléments de P :*

$$\operatorname{co} P = \left\{\sum_{i=1}^{m} t_i x_i : m \in \mathbb{N}^*,\ t \in \Delta_m,\ x_i \in P\right\}. \tag{2.3}$$

Démonstration. 1) Soit C un convexe. Par définition, C contient les combinaisons convexes formées à partir de deux éléments de C ($m = 2$). On raisonne ensuite par récurrence en supposant que C contient les combinaisons convexes formées de m éléments de C ($m \geqslant 2$). Alors pour une combinaison convexe de $m+1$ éléments de C, on écrit (on peut supposer que $t_1 \neq 1$, sinon le résultat est évident) :

$$\sum_{i=1}^{m+1} t_i x_i = t_1 x_1 + (1-t_1) \left(\sum_{i=2}^{m+1} \frac{t_i}{1-t_1} x_i \right).$$

Cet élément est dans C car les facteurs de t_1 et de $1-t_1$ sont dans C (par récurrence pour le second). Réciproquement, si C contient toutes les combinaisons convexes de ses éléments, il contient les combinaisons convexes formées de deux éléments. Donc C est convexe.

2) Il est facile de voir que l'ensemble des combinaisons convexes des éléments de P est un convexe. Il contient donc $\operatorname{co} P$ qui est le plus petit convexe contenant P. Inversement, par la première partie, $\operatorname{co} P$ étant un convexe, il contient toutes les combinaisons convexes des éléments de $\operatorname{co} P$ donc de P. □

À droite dans (2.3), on ne peut pas se contenter de prendre $m = 2$. Par exemple, si P est formé des trois sommets d'un triangle non dégénéré, cet ensemble serait alors la frontière du triangle, qui n'est pas convexe. Cependant, si $P = C_1 \cup \cdots \cup C_m$ est l'union de m convexes C_i, $\operatorname{co} P$ est l'ensemble des combinaisons convexes de m points x_i, chacun des x_i étant pris dans un convexe C_i différent (voir l'exercice 2.4). Le théorème de Carathéodory ci-dessous s'inscrit dans le même esprit, celui de limiter le nombre de termes à prendre dans la somme de (2.3). Il affirme qu'en dimension n, il suffit de prendre $m = n+1$ dans (2.3). Ce résultat est utile pour passer à la limite dans des combinaisons convexes, comme le montre le corollaire qui suit.

Théorème 2.3 (Carathéodory [94 ; 1907]) *Soit P une partie d'un espace vectoriel $\mathbb{E}$ de dimension n. Alors tout élément de $\operatorname{co} P$ peut s'écrire comme une combinaison convexe de $n+1$ éléments de P.*

Démonstration. Supposons que $x \in \operatorname{co} P$ s'écrive comme combinaison convexe de $m > n+1$ éléments x_i de P : $x = \sum_{i=1}^{m} t_i x_i$, avec $t := (t_1, \ldots, t_m) \in \Delta_m$. Il suffit de montrer que l'on peut écrire x comme combinaison convexe de $m-1$ des x_i. On peut supposer que tous les $t_i > 0$ (sinon le travail est fait).

En nombre $m > n+1$, les x_i sont affinement dépendants, si bien que l'on peut trouver $\alpha := (\alpha_1, \ldots, \alpha_m) \neq 0$, tel que

$$\sum_{i=1}^{m} \alpha_i x_i = 0 \quad \text{et} \quad \sum_{i=1}^{m} \alpha_i = 0.$$

Comme $\alpha \neq 0$, il existe un indice k tel que $\alpha_k > 0$ (cet indice k sera mieux choisi par la suite). On peut donc écrire

$$x_k = - \sum_{\substack{1 \leqslant i \leqslant m \\ i \neq k}} \frac{\alpha_i}{\alpha_k} x_i \quad \text{et} \quad x = \sum_{\substack{1 \leqslant i \leqslant m \\ i \neq k}} \left(t_i - t_k \frac{\alpha_i}{\alpha_k} \right) x_i.$$

On voit que $\sum_{1\leqslant i\leqslant m,\, i\neq k}(t_i - t_k\alpha_i/\alpha_k) = 1$, si bien que le résultat sera démontré si $t_i - t_k\alpha_i/\alpha_k \geqslant 0$ pour tout $i \neq k$. Ceci s'écrit encore (on se rappelle que les t_i et α_k sont > 0) :

$$\frac{\alpha_k}{t_k} \geqslant \frac{\alpha_i}{t_i}, \quad \text{pour tout } i \neq k.$$

Cette condition spécifie comment choisir l'indice $k \in \arg\max\{\alpha_i/t_i : 1 \leqslant i \leqslant m\}$, qui fournit bien un $\alpha_k > 0$. □

Corollaire 2.4 *L'enveloppe convexe d'une partie compacte d'un espace vectoriel de dimension finie est compacte.*

Démonstration. Il est clair que $\operatorname{co} P$ est borné (on utilise la proposition 2.2) ; il reste donc à montrer qu'il est fermé. Soit $\{x_k\} \subseteq \operatorname{co} P$, avec $x_k \to x$ et montrons que $x \in \operatorname{co} P$. D'après le théorème de Carathéodory,

$$x_k = \sum_{i=1}^{n+1} t_{k,i}\, x_{k,i}, \tag{2.4}$$

avec $(t_{k,1}, \ldots, t_{k,n+1}) \in \Delta_{n+1}$ et $x_{k,i} \in P$. Comme Δ_{n+1} et P sont compacts, on peut extraire de $\{t_{k,i}\}_k$ et de $\{x_{k,i}\}_k$ des sous-suites convergentes, dont les limites sont dans Δ_{n+1} et P respectivement. En passant à la limite dans (2.4), on voit que $x \in \operatorname{co} P$. □

La démonstration de la proposition suivante est proposée à l'exercice 2.3.

Proposition 2.5 (calcul d'enveloppe convexe) *Soient $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ deux espaces vectoriels.*
1) *Si P et $Q \subseteq \mathbb{E}$, alors $\operatorname{co}(P+Q) = \operatorname{co} P + \operatorname{co} Q$.*
2) *Si $P \subseteq \mathbb{E}$ et $Q \subseteq \mathbb{F}$, alors $\operatorname{co}(P \times Q) = (\operatorname{co} P) \times (\operatorname{co} Q)$.*

2.2.3 Enveloppe conique

On note

$$\mathbb{R}_+ := \{t \in \mathbb{R} : t \geqslant 0\} \qquad \text{et} \qquad \mathbb{R}_{++} := \{t \in \mathbb{R} : t > 0\}.$$

On dit qu'une partie K d'un espace vectoriel $\mathbb{E}$ est un *cône* si $\mathbb{R}_{++}K \subseteq K$, c'est-à-dire si $tx \in K$ chaque fois que $t > 0$ et $x \in K$. On dit qu'un cône K est

- *saillant* si $K \cap (-K) \subseteq \{0\}$, ce qui revient à dire qu'il ne contient pas de droite (sous-espace vectoriel de dimension 1),
- *pointé* si $0 \in K$ (et *épointé* dans le cas contraire).

On a pris soin de ne pas imposer qu'un cône contienne l'origine (on ne demande pas que $\mathbb{R}_+K \subseteq K$), de manière à pouvoir parler de cônes ouverts, tels que $\mathcal{S}^n_{++}$.

Soit P une partie de $\mathbb{E}$. L'intersection de cônes convexes étant un cône convexe, on peut parler du plus petit cône convexe contenant P, qui est donc l'intersection de tous les cônes convexes contenant P. C'est ce que l'on appelle l'*enveloppe conique* de P (on devrait dire son *enveloppe conique convexe*). On la note

$$\operatorname{cone} P := \bigcap \{K : K \text{ est un cône convexe contenant } P\}.$$

On appelle *combinaison conique* de $\mathbb{E}$, un élément x de $\mathbb{E}$ de la forme

$$x = \sum_{i=1}^{m} t_i x_i,$$

où $m \in \mathbb{N}^*$, les $t_i \in \mathbb{R}$ avec $t_i \geqslant 0$ et les vecteurs $x_i \in \mathbb{E}$. La démonstration de la proposition suivante est proposée à l'exercice 2.7.

Proposition 2.6 1) *Un ensemble est un cône convexe si, et seulement si, il contient toutes les combinaisons coniques de ses éléments.*
2) *Si $P \subseteq \mathbb{E}$, alors* cone P *est l'ensemble des combinaisons coniques des éléments de P :*

$$\operatorname{cone} P = \left\{ \sum_{i=1}^{m} t_i x_i : m \in \mathbb{N}^*,\ t_i \in \mathbb{R} \text{ avec } t_i \geqslant 0,\ x_i \in P \right\}. \tag{2.5}$$

2.2.4 Cône asymptotique ⊖

Soit C un ensemble *convexe fermé non vide* d'un espace vectoriel $\mathbb{E}$ de dimension finie. Le *cône asymptotique* de C est l'ensemble défini par

$$C^\infty := \{d \in \mathbb{E} : C + \mathbb{R}_+ d \subseteq C\} = \{d \in \mathbb{E} : C + d \subseteq C\}.$$

Un élément de C^∞ est appelé une *direction asymptotique*[2]. De façon imagée et à une translation près, le cône asymptotique est l'apparence que prend C lorsqu'on le voit d'infiniment loin. Il apparaît alors comme un cône, réduit éventuellement à zéro (si, et seulement si, il est borné ; c'est ce que nous allons montrer).

La proposition 2.7 ci-dessous donne dans son point (i) une autre expression du cône asymptotique, qui sert parfois à étendre ce concept à des ensembles C non convexes [26], et montre dans son point (ii) que le cône asymptotique peut aussi s'écrire

[2] Certains auteurs [462 ; page 61] préfèrent utiliser les appellations *cône de récession* (alors noté 0^+C, en évitant le signe ∞) et *direction de récession* à *cône asymptotique* et *direction asymptotique*, parce que la notion n'a pas de rapport direct avec celle d'asymptote. Le qualificatif *asymptotique* est en réalité utilisé ici comme dans les locutions *comportement asymptotique* et *développement asymptotique*, comme un substitut de l'expression « *à l'infini* ».

$$C^\infty(x) := \{d \in \mathbb{E} : x + \mathbb{R}_+ d \subseteq C\} = \bigcap_{t>0} \frac{C-x}{t},$$

quel que soit le point x choisi dans C (le caractère fermé de C est essentiel pour avoir cette propriété). Dans l'expression ci-dessus, $(C-x)/t = \{(y-x)/t : y \in C\}$.

Proposition 2.7 (autres expressions du cône asymptotique) *Soit C un ensemble convexe fermé non vide. Alors C^∞ est un cône convexe fermé contenant zéro. De plus*
(i) $C^\infty = \{d \in \mathbb{E} :$ *il existe* $\{x_k\} \subseteq C$ *et* $\{t_k\} \to \infty$ *tels que* $x_k/t_k \to d\}$,
(ii) $C^\infty = C^\infty(x)$, *quel que soit* $x \in C$.

Démonstration. Pour tout $t > 0$, $(C-x)/t$ est un convexe fermé. Il en est donc de même de $C^\infty(x)$ et donc de $C^\infty = \cap_{x\in C} C^\infty(x)$. D'autre part, il est clair que C^∞ est un cône ($d \in C^\infty$ et $t > 0$ impliquent que $td \in C^\infty$) et qu'il contient zéro.

Désignons par K l'ensemble dans le membre de droite de (i). Soit $x \in C$. Pour démontrer (i) et (ii), il suffit de montrer que $C^\infty(x) = K$.

Soit $d \in C^\infty(x)$. Avec $\{t_k\} \to \infty$ et $x_k = x + t_k d$, on a $x_k \in C$ et $x_k/t_k \to d$. Donc $d \in K$. Inversement, soient $\{x_k\} \subseteq C$ et $\{t_k\} \to \infty$ tels que $x_k/t_k \to d$. Fixons $t > 0$. Dès que $t_k \geqslant t$,

$$x + \frac{t}{t_k}(x_k - x) \in C$$

et ce point converge vers $x + td \in C$ (fermé). Donc $d \in C^\infty(x)$. □

Si C n'est pas fermé, $C^\infty(x)$ peut dépendre de x. Par exemple, si $C = \{x \in \mathbb{R}^2 : x > 0\} \cup \{(0,0)\}$, $C^\infty(x)$ est l'orthant positif si $x \neq 0$, mais $C^\infty(0) = C$.

D'après le point (i) de la proposition précédente, $C^\infty \subseteq \operatorname{adh}(\mathbb{R}_+ C)$, mais on n'a pas l'égalité en général. Par exemple si $C = \{1\} \subseteq \mathbb{R}$, $C^\infty = \{0\}$ alors que $\operatorname{adh} \mathbb{R}_+ C = \mathbb{R}_+$.

Le corollaire suivant exprime à sa manière qu'un ensemble convexe fermé est borné si, et seulement si, il ne contient pas de *demi-droite*, c'est-à-dire d'ensemble de la forme $\{x + td : t \geqslant 0\}$, où x et $d \in \mathbb{E} \setminus \{0\}$.

Corollaire 2.8 (cône asymptotique d'un convexe borné) *Soit C un ensemble convexe fermé non vide. Alors C est borné si, et seulement si, $C^\infty = \{0\}$.*

Démonstration. D'après la proposition 2.7 (i), si C est borné, $C^\infty = \{0\}$. Inversement, si C n'est pas borné, il existe une suite de points $\{x_k\} \subseteq C$ telle que $t_k := \|x_k\| \to \infty$ et $x_k/\|x_k\| \to d \neq 0$. D'après la proposition 2.7 (i), $d \in C^\infty$. □

D'autres propriétés du cône asymptotique sont données dans la proposition ci-dessous, dont la démonstration est proposée à l'exercice 2.8 ; pour d'autres propriétés, voir les exercices 2.18 et 2.19 (cas d'un polyèdre convexe).

Proposition 2.9 (calcul de cône asymptotique)
1) (cône) *K est une cône convexe fermé si, et seulement si, $K^\infty = K$.*
2) (inclusion) *Si C_1 et C_2 sont deux convexes fermés non vides, on a*

$$C_1 \subseteq C_2 \qquad \Longrightarrow \qquad C_1^\infty \subseteq C_2^\infty.$$

3) (intersection) *Si $\{C_i\}_{i\in I}$ est une famille quelconque d'ensembles convexes fermés, d'intersection non vide, on a*

$$(\cap_{i\in I} C_i)^\infty = \cap_{i\in I} C_i^\infty. \tag{2.6}$$

4) (produit) *Si C_1 (resp. C_2) est un convexe fermé non vide d'un espace vectoriel $\mathbb{E}_1$ (resp. $\mathbb{E}_2$), alors $C_1 \times C_2$ est un convexe fermé non vide de $\mathbb{E}_1 \times \mathbb{E}_2$ et*

$$(C_1 \times C_2)^\infty = C_1^\infty \times C_2^\infty.$$

5) (préimage linéaire) *Soient $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ deux espaces vectoriels de dimension finie, $A : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ une application linéaire et C un convexe fermé non vide de $\mathbb{F}$ tel que $\mathcal{R}(A) \cap C \neq \varnothing$. Alors l'image réciproque $A^{-1}(C)$ de C par A est un convexe fermé de $\mathbb{E}$ et*

$$[A^{-1}(C)]^\infty = A^{-1}(C^\infty).$$

6) (image linéaire) *Soient $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ deux espaces vectoriels de dimension finie, $A : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ une application linéaire et C un convexe fermé non vide de $\mathbb{E}$. Alors $A(C)$ est convexe et*

$$\operatorname{adh}(A(C^\infty)) \subseteq (\operatorname{adh} A(C))^\infty.$$

Si, de plus, $\mathcal{N}(A) \cap C^\infty$ est un sous-espace vectoriel, alors $A(C)$ est fermé et

$$A(C^\infty) = A(C)^\infty. \tag{2.7}$$

2.2.5 Faces et points extrêmes ⊖

Définitions 2.10 (face, arête) Soit C un convexe. On dit que $F \subseteq C$ est une *face* de C si F est convexe et si tout segment $[x, y]$ de C tel que $]x, y[$ intersecte F est entièrement dans F. On dit qu'une face de C est *propre* si elle est différente de C. Une face de C dont l'enveloppe affine est de dimension un est appelée une *arête*. □

Une partie convexe F d'un convexe C sera donc une face de C si l'on peut écrire

$$\forall\, x, y \in C, \quad \forall\, t \in]0, 1[: \quad (1-t)x + ty \in F \quad \Longrightarrow \quad x, y \in F. \tag{2.8}$$

On peut aussi ne considérer que le cas $t = \frac{1}{2}$:

$$\forall\, x, y \in C : \quad \frac{1}{2}(x+y) \in F \quad \Longrightarrow \quad x, y \in F. \tag{2.9}$$

Une intersection quelconque de faces étant une face, on peut parler de la plus petite face de C contenant une partie $A \subseteq C$, que l'on appelle la *face engendrée* par A. C'est donc l'intersection de toutes les faces de C contenant A. On la note

$$F(A) := \bigcap \{F : F \text{ est une face de } C \text{ contenant } A\}.$$

On notera $F(x)$ la face engendrée par le singleton $\{x\} \subseteq C$.

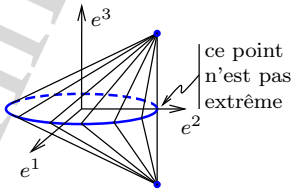
Définition 2.11 (point extrême) Un *point extrême* d'un convexe C est une face de C réduite à un seul point. L'ensemble des points extrêmes de C est noté

$$\operatorname{ext}(C). \qquad \square$$

Un point extrême est donc caractérisé par le fait qu'il ne peut pas s'écrire comme la demi-somme de deux points *distincts* de C ou encore par le fait que $C \setminus \{x\}$ est encore convexe.

Nécessairement $\operatorname{ext}(C) \subseteq \partial C$ (la frontière de C). Par ailleurs, l'ensemble des points extrêmes n'est pas nécessairement un fermé comme le montre l'exemple suivant :

$$\begin{aligned} P &:= \{x \in \mathbb{R}^3 : x_1^2 + x_2^2 = 1,\ x_3 = 0\} \\ &\quad \cup \{(0,1,1)\} \cup \{(0,1,-1)\}, \\ C &:= \operatorname{co} P. \end{aligned}$$



En effet, $\operatorname{ext}(C) = P \setminus \{(0,1,0)\}$, qui n'est pas fermé.

2.3 Aspects topologiques ⊖

Soit P une partie d'un espace vectoriel $\mathbb{E}$. En analyse convexe, on rencontre souvent des ensembles convexes dont l'intérieur dans $\mathbb{E}$ est vide : c'est le cas des faces d'un polyèdre convexe (celles différentes du polyèdre lui-même). Il est donc utile d'introduire la notion d'*intérieur relatif* d'un ensemble P (non nécessairement convexe), qui est son intérieur dans son enveloppe affine $\operatorname{aff} P$, munie de la topologie induite de celle de $\mathbb{E}$. On le note[3] $P^{\ominus}$ ou $\operatorname{intr} P$. On a

$$P^{\ominus} \equiv \operatorname{intr} P = \{x \in P : \text{il existe } r > 0 \text{ tel que } (B(x,r) \cap \operatorname{aff} P) \subseteq P\}.$$

On dit qu'une partie P de $\mathbb{E}$ est un *ouvert relatif* de $\mathbb{E}$ ou est *relativement ouverte* dans $\mathbb{E}$ si $P^{\ominus} = P$.

[3] La notation $P^{\ominus}$ nous est propre. Elle est formée du symbole $^{\circ}$ qui rappelle qu'il s'agit d'un intérieur (dans la notation française) et de $^{-}$ qui évoque l'enveloppe affine (plate) dans lequel celui-ci est pris. La notation anglo-saxonne est $\operatorname{ri} P$, mais « ri » (*relative interior*) n'est pas très évocateur en français, si bien que nous avons préféré $\operatorname{intr} P$ comme expression littérale.

La *frontière relative* d'un ensemble $P \subseteq \mathbb{E}$ est l'ensemble des points de son adhérence $\overline{P}$ qui ne sont pas dans son intérieur relatif $P^{\ominus}$. On la note

$$\partial_{\mathrm{rel}} P = \overline{P} \setminus P^{\ominus}, \tag{2.10}$$

où $\overline{P}$ désigne l'adhérence de P (dans $\mathbb{E}$ ou $\operatorname{aff} P$; c'est la même chose, car $\operatorname{aff} P$ est un fermé ; il n'y a donc pas de notion d'adhérence relative).

Si P est réduit à un point, $\operatorname{aff} P = P$ et donc $P^{\ominus} = P$, puis $\partial_{\mathrm{rel}} P = \varnothing$. Par ailleurs, on gardera à l'esprit que l'opération $(\cdot)^{\ominus}$ ne préserve pas l'inclusion, même pour des ensembles convexes :

$$C_1,\, C_2 \text{ convexes et } C_1 \subseteq C_2 \qquad \not\Longrightarrow \qquad C_1^{\ominus} \subseteq C_2^{\ominus}.$$

Par exemple, $C_1 := \{0\} \subseteq C_2 := [0,1] \subseteq \mathbb{R}$, mais $C_1^{\ominus} = \{0\} \not\subseteq C_2^{\ominus} =]0,1[$. Toutefois, pour des parties P_1 et P_2 ayant la même enveloppe affine, on a bien sûr :

$$\left.\begin{array}{r} P_1 \subseteq P_2 \\ \operatorname{aff} P_1 = \operatorname{aff} P_2 \end{array}\right\} \quad \Longrightarrow \quad P_1^{\ominus} \subseteq P_2^{\ominus}. \tag{2.11}$$

Proposition 2.12 (intérieur relatif non vide) *Soit C un convexe non vide. Alors son intérieur relatif $C^{\ominus}$ est non vide et* $\operatorname{aff} C^{\ominus} = \operatorname{aff} C$.

Démonstration. Soit $n := \dim(\operatorname{aff} C)$. On peut supposer que $n \geqslant 1$, car le résultat est évident pour $n = 0$ (C est un singleton). On peut trouver $n+1$ points x_0, x_1, …, x_n de C qui sont affinement indépendants. Alors tout point $x \in \operatorname{aff} C$ peut s'écrire

$$x = x_0 + \sum_{i=1}^{n} \alpha_i (x_i - x_0),$$

avec des coefficients α_1, …, $\alpha_n \in \mathbb{R}$ déterminés de manière unique. L'application

$$\varphi : \alpha = (\alpha_1, \ldots, \alpha_n) \mapsto x = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i x_i, \quad \text{avec } \alpha_0 := 1 - \textstyle\sum_{i=1}^{n} \alpha_i$$

est un homéomorphisme de $\mathbb{R}^n \to \operatorname{aff} C$. Dès lors, l'image par φ de l'ouvert

$$\Omega_n := \left\{ \alpha \in \mathbb{R}^n : \sum_{i=1}^{n} \alpha_i < 1,\ \alpha_i > 0 \text{ pour tout } i \right\}$$

est un ouvert dans $\operatorname{aff} C$. Il suffit maintenant de constater que l'ouvert $\varphi(\Omega_n)$ de $\operatorname{aff} C$ est inclus dans C (car $\varphi(\alpha)$ est une combinaison convexe des points x_0, …, x_n de C lorsque $\alpha \in \Omega_n$), pour conclure que l'intérieur relatif de C est non vide.

Les incllusions $\varphi(\Omega_n) \subseteq C^{\ominus} \subseteq C$ conduisent à $\operatorname{aff} \varphi(\Omega_n) \subseteq \operatorname{aff} C^{\ominus} \subseteq \operatorname{aff} C$. On obtient alors $\operatorname{aff} \varphi(\Omega_n) = \operatorname{aff} C^{\ominus}$ en notant que $\operatorname{aff} \varphi(\Omega_n) = \operatorname{aff} C$ parce que $\varphi(\Omega_n)$ est un ouvert dans $\operatorname{aff} C$. □

Le lemme suivant est souvent utile pour traiter des questions d'intériorité relative des ensembles convexes.

Lemme 2.13 (critères d'intériorité relative) *Soit C un convexe non vide. Alors*

$$x \in C^{\oplus} \text{ et } y \in \overline{C} \quad \Longrightarrow \quad [x, y[\subseteq C^{\oplus}.$$

Dès lors, pour un point $x \in \mathbb{E}$, on a

$$x \in C^{\oplus} \quad \Longleftrightarrow \quad \forall\, x_0 \in C,\ \exists\, t > 1 : \quad (1-t)x_0 + tx \in C. \tag{2.12}$$

Démonstration. Considérons la première partie lorsque $x \neq y$ (sinon $[x, y[= \varnothing$ et il n'y a rien à démontrer). On peut aussi supposer que $\operatorname{aff} C = \mathbb{E}$. Soient $t \in [0, 1[$ et B la boule-unité ouverte. Il faut montrer que $z_t = (1-t)x + ty \in C^{\oplus}$ ou que $z_t + \varepsilon B \in C$ pour un $\varepsilon > 0$ assez petit. Comme $y \in \overline{C}$, quel que soit $\varepsilon > 0$, $y \in C + \varepsilon B$. Alors

$$\begin{aligned} z_t + \varepsilon B &= (1-t)x + ty + \varepsilon B \\ &\subseteq (1-t)x + t(C + \varepsilon B) + \varepsilon B \qquad [y \in C + \varepsilon B] \\ &= tC + (1-t)\left(x + \frac{1+t}{1-t}\,\varepsilon B\right) \\ &\subseteq tC + (1-t)C \qquad [\text{pour } \varepsilon > 0 \text{ assez petit}] \\ &= C \qquad [C \text{ convexe}]. \end{aligned} \tag{2.13}$$

En (2.13), on a utilisé le fait que $x \in C^{\oplus}$.

Venons-en à la démonstration de (2.12). Si $x \in C^{\oplus}$, il existe un $\varepsilon > 0$ tel que $B(x, \varepsilon) \cap \operatorname{aff} C \subseteq C$. Alors, pour un $t > 1$ proche de 1, $z := (1-t)y + tx \in B(x, \varepsilon)$, quel que soit $y \in \mathbb{E}$. Comme $z \in \operatorname{aff} C$ lorsque $y \in \operatorname{aff} C$, on en déduit que $z \in C$.

Réciproquement, comme C est non vide, il en est de même de $C^{\oplus}$ et on peut choisir $y \in C^{\oplus}$. De deux choses l'une. Soit $y = x$, auquel cas $x \in C^{\oplus}$ et c'est terminé. Soit $y \neq x$. Dans ce cas, par hypothèse, il existe un $t > 1$ tel que $z := (1-t)y + tx \in C$. Alors $x \in [y, z[$, si bien que par la première partie du lemme, $x \in C^{\oplus}$. □

Nous avons écrit la résultat précédent comme une équivalence facilement mémorisable. En réalité, la preuve a montré que l'on avait en fait les implications plus fortes suivantes :

$$\begin{aligned} x \in C^{\oplus} \quad &\Longrightarrow \quad \forall\, x_0 \in \operatorname{aff} C,\ \exists\, t > 1 : \quad (1-t)x_0 + tx \in C, \\ x \in C^{\oplus} \quad &\Longleftarrow \quad \exists\, x_0 \in C^{\oplus},\ \exists\, t > 1 : \quad (1-t)x_0 + tx \in C. \end{aligned} \tag{2.14}$$

Parfois, on ne connait pas $C^{\oplus}$, mais on cherche à le spécifier ; dans ce cas, l'implication droite-gauche du critère (2.12) est plus utile que (2.14).

On pourra s'entraîner à utiliser ce lemme en démontrant le corollaire suivant et en faisant les exercices 2.10 et 2.11 (ceux-ci utilisent la proposition 2.15 qui est également fondamentale).

On dit que x est un *point absorbant* de C si pour tout $d \in \mathbb{E}$, il existe un $t > 0$ tel que $x + td \in C$. La troisième propriété ci-dessous fait le lien avec le cône des directions admissibles.

Corollaire 2.14 (convexe avec point absorbant) *Soit C un convexe non vide d'un espace vectoriel $\mathbb{E}$. Alors les propriétés suivantes sont équivalentes :*
(i) $x \in C^\circ$,
(ii) x *est un point absorbant de* C,
(iii) $\mathbb{E} = \mathbb{R}_+(C - x)$.

Proposition 2.15 *Soit C un convexe non vide d'un espace vectoriel $\mathbb{E}$. Alors*
1) *son intérieur relatif $C^\ominus$ est convexe,*
2) *son adhérence $\overline{C}$ est un convexe non vide et* $\operatorname{aff}\overline{C} = \operatorname{aff} C$.
3) $\overline{C^\ominus} = \overline{C}$ *et* $(\overline{C})^\ominus = C^\ominus$.
4) *Les ensembles $C^\ominus$, C et $\overline{C}$ ont la même enveloppe affine, le même intérieur relatif, la même adhérence et la même frontière relative.*

Démonstration. 1) Si $x, y \in C^\ominus$, $[x, y] \subseteq C^\ominus$ d'après le lemme 2.13 ; donc $C^\ominus$ est convexe.

2) Soient x, $y \in \overline{C}$ et $t \in [0, 1]$; il faut montrer que $(1-t)x + ty \in \overline{C}$. Il existe alors des suites $\{x_k\} \to x$ et $\{y_k\} \to y$ avec x_k et $y_k \in C$. Le point $(1-t)x_k + ty_k \in C$ (par convexité de C) et converge vers $(1-t)x + ty$, qui appartient donc à $\overline{C}$.

Certainement $\operatorname{aff} C \subseteq \operatorname{aff}\overline{C}$ (car $C \subseteq \overline{C}$). Réciproquement, $\overline{C} \subseteq \operatorname{aff} C$ (car $\operatorname{aff} C$ est un fermé contenant C), donc $\operatorname{aff}\overline{C} \subseteq \operatorname{aff} C$.

La démonstration des autres propriétés est proposée à l'exercice 2.11. □

On trouvera à l'exercice 2.11 d'autres informations sur la topologie des ensembles convexes, qui sont déduites des résultats ci-dessus. Voici pour terminer cette section quelques règles de calcul d'intérieurs relatifs et d'adhérences. Ces règles sont fondamentales. En particulier, les conditions pour avoir l'égalité joueront un rôle essentiel en optimisation convexe où elles prennent le nom de *conditions de qualification*, lesquels permettent d'écrirent des conditions d'optimalité de problèmes d'optimisation (chapitre 4).

Proposition 2.16 (calcul d'intérieurs relatifs et d'adhérences) *Soient $\mathbb{E}$, $\mathbb{E}_1$, $\mathbb{E}_2$ et $\mathbb{F}$ des espaces vectoriels et $A : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ une application linéaire.*
1) (produit) *Si $C_1 \subseteq \mathbb{E}_1$ et $C_2 \subseteq \mathbb{E}_2$ sont deux convexes, alors*

$$(C_1 \times C_2)^\ominus = C_1^\ominus \times C_2^\ominus \qquad \text{et} \qquad \overline{C_1 \times C_2} = \overline{C_1} \times \overline{C_2}.$$

2) (intersection) *Si $(C_i)_{i\in I}$ est une famille de convexes de $\mathbb{E}$ telle que $\cap_{i\in I} C_i^\ominus \neq \varnothing$, alors*

$$(\cap_{i\in I} C_i)^\ominus \subseteq \cap_{i\in I} C_i^\ominus \qquad \text{et} \qquad \overline{\cap_{i\in I} C_i} = \cap_{i\in I} \overline{C_i}, \tag{2.15}$$

avec égalité à gauche si I est fini.
3) (image linéaire) *Si $C \subseteq \mathbb{E}$ est convexe, alors*

$$(A(C))^{\mathring{}} = A(C^{\mathring{}}) \qquad et \qquad \overline{A(C)} \supseteq A(\overline{C}), \tag{2.16}$$

avec égalité à droite si $A(\overline{C})$ est fermé.

4) (préimage linéaire) *Si $C \subseteq \mathbb{F}$ est convexe et si l'image réciproque $A^{-1}(C^{\mathring{}}) \neq \varnothing$, alors*

$$(A^{-1}(C))^{\mathring{}} = A^{-1}(C^{\mathring{}}) \qquad et \qquad \overline{A^{-1}(C)} = A^{-1}(\overline{C}).$$

5) (multiplication) *Si $C \subseteq \mathbb{E}$ est convexe et $\alpha \in \mathbb{R}$, alors*

$$(\alpha\, C)^{\mathring{}} = \alpha\, C^{\mathring{}} \qquad et \qquad \overline{\alpha\, C} = \alpha\, \overline{C}.$$

6) (somme) *Si $C_1 \subseteq \mathbb{E}$ et $C_2 \subseteq \mathbb{E}$ sont deux convexes, alors*

$$(C_1 + C_2)^{\mathring{}} = C_1^{\mathring{}} + C_2^{\mathring{}} \qquad et \qquad \overline{C_1 + C_2} \supseteq \overline{C_1} + \overline{C_2},$$

avec égalité à droite si $\overline{C_1} + \overline{C_2}$ est fermé.

Démonstration. Nous utiliserons les résultats énoncés à l'exercice 2.11.

1) La proposition 2.1 montre que $\operatorname{aff}(C_1 \times C_2) = (\operatorname{aff} C_1) \times (\operatorname{aff} C_2)$. Par définition de l'intérieur relatif et de la topologie produit, $(x_1, x_2) \in (C_1 \times C_2)^{\mathring{}}$ si, et seulement si, il existe des ouverts $\theta_i \in \mathbb{E}_i$ contenant x_i $(i = 1, 2)$, tels que

$$\begin{aligned} C_1 \times C_2 &\supseteq (\theta_1 \times \theta_2) \cap \operatorname{aff}(C_1 \times C_2) \\ &= (\theta_1 \times \theta_2) \cap (\operatorname{aff} C_1 \times \operatorname{aff} C_2) \\ &= (\theta_1 \cap \operatorname{aff} C_1) \times (\theta_2 \cap \operatorname{aff} C_2). \end{aligned}$$

Ceci revient à dire que $(\theta_i \cap \operatorname{aff} C_i) \subseteq C_i$ ou encore que $x_i \in C_i^{\mathring{}}$. La relation $\operatorname{adh}(C_1 \times C_2) = (\operatorname{adh} C_1) \times (\operatorname{adh} C_2)$ est vraie, même si les C_i ne sont pas convexes.

2) Soit $x \in \cap_{i\in I}\overline{C_i}$. Comme il existe un $x_0 \in \cap_{i\in I} C_i^{\mathring{}}$, $x_t := (1-t)x_0 + tx \in C_i^{\mathring{}}$, pour tout $t \in [0,1[$ et tout $i \in I$ (lemme 2.13). Alors $x_t \in \cap_{i\in I} C_i^{\mathring{}}$ pour tout $t \in [0,1[$. À la limite en $t \uparrow 1$, on trouve que $x = x_1$ est dans l'adhérence de $\cap_{i\in I} C_i^{\mathring{}}$. Enfin, puisqu'une intersection de fermés est fermée, on trouve finalement

$$\cap_{i\in I}\overline{C_i} \subseteq \overline{\cap_{i\in I} C_i^{\mathring{}}} \subseteq \overline{\cap_{i\in I} C_i} \subseteq \cap_{i\in I}\overline{C_i}.$$

On a donc égalité partout, ce qui démontre l'identité sur les adhérences. On en déduit aussi que $\cap_{i\in I} C_i^{\mathring{}}$ et $\cap_{i\in I} C_i$ ont la même adhérence et donc le même intérieur relatif (point 4 de l'exercice 2.11), ce qui conduit à l'inclusion sur les intérieurs relatifs :

$$(\cap_{i\in I} C_i)^{\mathring{}} = (\cap_{i\in I} C_i^{\mathring{}})^{\mathring{}} \subseteq \cap_{i\in I} C_i^{\mathring{}}.$$

Supposons à présent que I est fini et que $x \in \cap_{i\in I} C_i^{\mathring{}}$. Soit $y \in \cap_{i\in I} C_i^{\mathring{}}$. Pour tout $i \in I$, on peut trouver un $t_i > 1$ tel que $y_{t_i} = (1-t)y + tx \in C_i$. Comme I est fini, il existe un $t > 1$ tel que $y_t \in \cap_{i\in I} C_i$. Ceci montre que $x \in (\cap_{i\in I} C_i)^{\mathring{}}$ (lemme 2.13).

3) L'inclusion $\overline{A(C)} \supseteq A(\overline{C})$ découle de la continuité de A et a lieu même sans la convexité de C et sans la linéarité de A. De même pour le cas où il y a égalité. Pour démontrer l'identité sur les intérieurs relatifs, on observe d'abord que

$$\overline{A(C^\ominus)} \supseteq A(\overline{C^\ominus}) = A(\overline{C}) \supseteq A(C) \supseteq A(C^\ominus).$$

On en déduit que $A(C)$ et $A(C^\ominus)$ ont la même adhérence, si bien qu'ils ont aussi le même intérieur relatif (exercice 2.11) : $(A(C))^\ominus = (A(C^\ominus))^\ominus \subseteq A(C^\ominus)$. Pour montrer l'inclusion inverse, on utilise le lemme 2.13. Soient $y \in A(C^\ominus)$ et $y_0 \in (A(C))^\ominus \subseteq A(C)$. Alors il existe $x \in C^\ominus$ et $x_0 \in C$ tels que $y = Ax$ et $y_0 = Ax_0$. Il existe aussi un $t > 1$ tel que $(1-t)x_0 + tx \in C$. En appliquant A : $(1-t)y_0 + ty \in A(C)$. On en déduit que $y \in (A(C))^\ominus$.

4) On introduit deux ensembles dans $\mathbb{E} \times \mathbb{F}$:

$$X := \mathbb{E} \times C \qquad \text{et} \qquad L := \{(x, Ax) : x \in \mathbb{E}\}.$$

Par hypothèse, il existe un $x \in \mathbb{E}$ tel que $Ax \in C^\ominus$. Comme $X^\ominus = \mathbb{E} \times C^\ominus$, ceci s'écrit $X^\ominus \cap L \neq \varnothing$. On note aussi $\mathrm{P}_\mathbb{E} : \mathbb{E} \times \mathbb{F} \to \mathbb{E} : (x, y) \mapsto x$ le projecteur sur $\mathbb{E}$. Observons que

$$\begin{aligned} A^{-1}(C) &= \{x \in \mathbb{E} : Ax \in C\} = \mathrm{P}_\mathbb{E}(X \cap L) \\ A^{-1}(C^\ominus) &= \{x \in \mathbb{E} : Ax \in C^\ominus\} = \mathrm{P}_\mathbb{E}((\mathbb{E} \times C^\ominus) \cap L) = \mathrm{P}_\mathbb{E}((X \cap L)^\ominus) \\ A^{-1}(\overline{C}) &= \{x \in \mathbb{E} : Ax \in \overline{C}\} = \mathrm{P}_\mathbb{E}((\mathbb{E} \times \overline{C}) \cap L) = \mathrm{P}_\mathbb{E}(\overline{X \cap L}). \end{aligned}$$

Comme $\mathrm{P}_\mathbb{E}$ est une application linéaire, on en déduit que $(A^{-1}(C))^\ominus = A^{-1}(C^\ominus)$ et que $\mathrm{adh}(A^{-1}(C)) \supseteq A^{-1}(\mathrm{adh}\, C)$. L'égalité a lieu dans la dernière relation, car $\mathrm{adh}(A^{-1}(C)) \subseteq A^{-1}(\mathrm{adh}\, C)$, par continuité de A.

5) Les identités sont claires si $\alpha = 0$. Si $\alpha \neq 0$, l'application $x \mapsto \alpha x$ est linéaire bijective et les identités sont des conséquences du point 3 (pour l'adhérence on utilise $\alpha\, \overline{C} \supseteq \alpha\, \overline{C}$ et $\alpha\, \overline{C} = \alpha\, \overline{(\alpha\, C)/\alpha} \supseteq \overline{\alpha\, C}$).

6) On applique le point 3 avec $C = C_1 \times C_2 \subseteq \mathbb{E}^2$ et $A : \mathbb{E}^2 \to \mathbb{E}$ définie par $A(x_1, x_2) = x_1 + x_2$; puis le point 1. □

Les identités de la proposition 2.16 sont fondamentales et les hypothèses qu'elles requièrent se retrouveront sous des formes diverses dans d'autres résultats d'analyse convexe. Pour s'imprégner des raisons de leur présence, voici quelques contre-exemples, tous très simples.

- Point 2. L'identité de gauche est fausse pour les ensembles $[0, 1]$ et $[1, 2]$ dans $\mathbb{R}$: on trouve $\{1\} \not\subseteq \varnothing$. Elle n'a pas lieu avec égalité pour la collection infinie d'intervalles $C_i = [0, 1+1/i]$ avec i entier non nul : on a $(\cap_i C_i)^\ominus = [0, 1]^\ominus =]0, 1[$, tandis que $\cap_i C_i^\ominus =]0, 1]$. L'identité de droite est fausse pour les ensembles $]0, 1[$ et $]1, 2[$ dans $\mathbb{R}$: on trouve $\varnothing \neq \{1\}$.
- Point 3. L'exercice 2.21 donne un exemple d'image de cône convexe fermé par une application linéaire, qui n'est pas fermée. On peut donc ne pas avoir égalité à droite. Cependant on a toujours

$$\overline{A(C)} = \overline{A(\overline{C})}. \tag{2.17}$$

- Point 4. On considère l'application linéaire $A : \mathbb{R} \to \mathbb{R} : x \mapsto 0$. L'identité de gauche n'a pas lieu si $C = [0, 1]$: on trouve $(A^{-1}(C))^\ominus = \mathbb{R}$ et $A^{-1}(C^\ominus) = \varnothing$. Celle de droite n'a pas lieu si $C =]0, 1]$: on trouve $\mathrm{adh}\, A^{-1}(C) = \varnothing$ tandis que $A^{-1}(\mathrm{adh}\, C) = \mathbb{R}$.

- Point 6. La somme des convexes fermés $C_1 = \mathbb{R}_+ \times \{0\} \subseteq \mathbb{R}^2$ et $C_2 = \{(x_1, x_2) : x_2 \geqslant \exp(x_1)\} \subseteq \mathbb{R}^2$ est l'ensemble $\mathbb{R} \times \mathbb{R}_{++}$, qui n'est pas un fermé.

Il ne faut pas manquer de contempler la beauté de l'identité $(C_1+C_2)^\circ = C_1^\circ + C_2^\circ$ (point 6), qui n'a plus lieu si l'on remplace les intérieurs *relatifs* par des intérieurs (par exemple dans le cas où $C_1 = [0,1] \times \{0\} \subseteq \mathbb{R}^2$ et $C_2 = \{0\} \times [0,1] \subseteq \mathbb{R}^2$). Cette sympathique relation devrait contribuer à convaincre de l'utilité du concept d'intériorité relative.

2.4 Polyèdre convexe

2.4.1 Représentations primale et duale

On rappelle qu'un *polyèdre convexe* d'un espace vectoriel $\mathbb{E}$ est un ensemble P de la forme

$$P = \{x \in \mathbb{E} : Ax \leqslant b\}, \tag{2.18}$$

où $A : \mathbb{E} \to \mathbb{R}^m$ est une application linéaire ($m \in \mathbb{N}$; si $m = 0$, $P = \mathbb{E}$), $b \in \mathbb{R}^m$ et l'inégalité $Ax \leqslant b$ se lit composante par composante dans $\mathbb{R}^m$: $(Ax)_i \leqslant b_i$, pour tout $i \in [1\,:m]$. Si l'ensemble se présente avec des égalités linéaires $Cx = d$, on pourra se ramener à la forme (2.18) en les remplaçant par deux inégalités opposées $Cx \leqslant d$ et $-Cx \leqslant -d$. Géométriquement, un polyèdre convexe est donc l'intersection d'un nombre *fini* de demi-espaces de $\mathbb{E}$.

Un *polytope* est un polyèdre convexe borné.

Si $\mathbb{E}$ est de dimensions finie, il n'y a pas de restriction à supposer que $\mathbb{E} = \mathbb{R}^n$ et que A est une matrice $m \times n$ (il suffit de se donner une base de $\mathbb{E}$). Par ailleurs, dans certaines circonstances (par exemple en optimisation linéaire, voir le chapitre 15), il est avantageux de représenter un polyèdre de $\mathbb{R}^n$ sous la forme dite *standard* suivante :

$$P = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b,\ x \geqslant 0\}. \tag{2.19}$$

Il n'y a aucune perte de généralité dans cette représentation. Tout polyèdre de la forme (2.18) se représente sous la forme (2.19) en introduisant des *variables d'écart* $s \in \mathbb{R}^m$ et en décomposant $x = u - v$, avec $u, v \in \mathbb{R}^n_+$:

$$\{(u,v,s) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m : (A\ -A\ I)(u^\mathsf{T}\ v^\mathsf{T}\ s^\mathsf{T})^\mathsf{T} = b,\ (u,v,s) \geqslant 0\}.$$

Il faut toutefois noter qu'il faut alors travailler dans un espace de dimension plus grande. D'autre part, un polyèdre de la forme (2.19) s'écrit comme en (2.18) en remplaçant $Ax = b$ par les deux inégalités $Ax \leqslant b$ et $-Ax \leqslant -b$.

Les représentations (2.18) et (2.19) d'un polyèdre sont dites *duales*, car elles font intervenir des applications linéaires (éléments du dual de $\mathbb{E}$). Dans la *représentation primale* d'un polyèdre convexe, on écrit celui-ci comme une somme de combinaisons convexe et conique d'éléments de $\mathbb{E}$. Si on se donne $x^1, \ldots, x^p \in \mathbb{E}$ et $y^1, \ldots, y^q \in \mathbb{E}$ (on peut prendre les $y^j = 0$), l'ensemble

$$P = \mathrm{co}\{x^1, \ldots, x^p\} + \mathrm{cone}\{y^1, \ldots, y^q\} \tag{2.20}$$

est un polyèdre convexe. C'est ce qu'affirme la proposition 2.22, que nous ne démontrerons qu'à la fin de cette section. Le choix de la représentation dépendra du type de résultat que l'on veut obtenir (voir les exercices 2.18 et 2.19).

Des caractérisations primale et duale de la bornitude ou de la réduction à un point d'un polyèdre décrit par (2.18) sont données à la section 2.5.6.

2.4.2 Image linéaire

Cette section s'intéresse à la description de l'image d'un polyèdre convexe par une application linéaire. Nous allons montrer que si le polyèdre convexe est écrit sous forme duale (2.18), son image par une application linéaire est également un un polyèdre convexe écrit sous forme duale (2.18). Cette affirmation serait plus simple à démontrer si l'on savait déjà qu'un ensemble de la forme (2.20) avec des $x^1, \dots, x^p \in \mathbb{E}$ et des $y^1, \dots, y^q \in \mathbb{E}$, est un polyèdre convexe (cette démonstration est proposée à l'exercice 2.19), mais nous utiliserons précisément le résultat de la proposition 2.17 ci-dessous pour établir ce fait !

La démonstration que nous proposons repose sur l'*élimination de Fourier* [204 ; 1827] : trouver $x \in \mathbb{R}^n$ tel que

$$Ax \leqslant b. \tag{2.21}$$

Elle s'apparente à l'*élimination gaussienne* dans le sens où à chaque étape elle transforme le système d'inégalités affines courant en un système d'inégalités affines *équivalent*, mais avec une inconnue de moins. Cependant, contrairement à l'élimination gaussienne, qui, à chaque étape, *enlève* une équation, l'élimination de Fourier *ajoute* de nombreuses inégalités, si bien que cette dernière n'est guère exploitable en pratique car le nombre d'opérations, peut croître très rapidement au cours des éliminations.

Voyons comment la méthode de Fourier élimine x_n ; elle procède de la même manière pour les autres variables. On note a_{ij} l'élément (i, j) de A. Le vecteur $x = (x_1, \dots, x_n)$ est solution du système d'inégalités (2.21) si, et seulement si,

- pour tout i_1 tel que $a_{i_1 n} > 0$, on a $x_n \leqslant \dfrac{1}{a_{i_1 n}} \left(b_{i_1} - \displaystyle\sum_{j=1}^{n-1} a_{i_1 j} x_j \right)$,
- pour tout i_2 tel que $a_{i_2 n} < 0$, on a $x_n \geqslant \dfrac{1}{a_{i_2 n}} \left(b_{i_2} - \displaystyle\sum_{j=1}^{n-1} a_{i_2 j} x_j \right)$,
- pour tout i_3 tel que $a_{i_3 n} = 0$, on a $0 \leqslant b_{i_3} - \displaystyle\sum_{j=1}^{n-1} a_{i_3 j} x_j$.

On peut à présent éliminer x_n : x est solution de (2.21) si, et seulement si, pour tout i_1 tel que $a_{i_1 n} > 0$, pour tout i_2 tel que $a_{i_2 n} < 0$ et pour tout i_3 tel que $a_{i_3 n} = 0$, $\tilde{x} := (x_1, \dots, x_{n-1})$ vérifie

$$\frac{1}{a_{i_2 n}}\left(b_{i_2}-\sum_{j=1}^{n-1} a_{i_2 j}x_j\right) \leqslant \frac{1}{a_{i_1 n}}\left(b_{i_1}-\sum_{j=1}^{n-1} a_{i_1 j}x_j\right) \tag{2.22a}$$

$$0 \leqslant b_{i_3}-\sum_{j=1}^{n-1} a_{i_3 j}x_j. \tag{2.22b}$$

et x_n est choisi dans l'intervalle défini par le jeu d'inégalités dans (2.22a) (la borne inférieure de l'intervalle est le maximum des quantités à gauche des inégalités pour les i_2 tels que $a_{i_2 n} < 0$ et la borne droite de l'intervalle est le minimum des quantités à droite des inégalités pour les i_1 tels que $a_{i_1 n} > 0$; la borne gauche est bien inférieure à la borne droite, car le premier jeu d'inégalités dans (2.22a) doit être vérifié pour tous les indices i_1 et i_2 désignés précédemment). On obtient ainsi un nouveau système d'inégalités affines ne portant plus que sur $\tilde{x}$. On peut ensuite éliminer x_{n-1} jusqu'à x_2, pour finalement obtenir un dernier jeu d'inégalités ne portant que sur x_1. Le nombre d'inégalités croît rapidement puisqu'après la première élimination, on peut en avoir jusqu'à $(\lfloor m/2 \rfloor)^2$, après la seconde jusqu'à $(\lfloor (\lfloor m/2 \rfloor)^2/2 \rfloor)^2$, *etc.*

L'opération permettant de passer de x vérifiant (2.21) à $\tilde{x}$ vérifiant (2.22a) est une projection cartésienne, puisque $\tilde{x} = (x_1, \ldots, x_{n-1})$ vérifie (2.22a) si, et seulement si, il existe un x_n tel que $x = (x_1, \ldots, x_{n-1}, x_n)$ vérifie (2.21). Dès lors, si l'on introduit le projecteur

$$\Phi_n : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^{n-1} : (x_1, \ldots, x_n) \mapsto (x_1, \ldots, x_{n-1}),$$

l'ensemble défini par le jeu d'inégalités (2.22a) n'est autre que $\Phi_n(P)$, où P est le polyèdre convexe défini par le jeu d'inégalités (2.21). On vient donc de démontrer que $\Phi_n(P)$ est un polyèdre convexe. La proposition suivante utilise ce fait pour aller un peu plus loin.

Proposition 2.17 (image d'un polyèdre convexe par une application linéaire) *Soient $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ deux espaces vectoriels, $T : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ une application linéaire et P un polyèdre convexe de $\mathbb{E}$. Alors $T(P)$ est un polyèdre convexe de $\mathbb{F}$.*

Démonstration. On peut supposer que $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ sont les espaces vectoriels $\mathbb{R}^n$ et $\mathbb{R}^p$. Nous donnons ci-dessous une démonstration dans le cas où P est de la forme $\{x \in \mathbb{R}^n : Ax \leqslant b\}$, avec une matrice A de type $m \times n$ et $b \in \mathbb{R}^m$. Le fait que le résultat est aussi valable pour des polyèdres convexes sous représentation primale (2.20) sera une conséquence de la proposition 2.22, qui n'utilisera que le résultat démontré ci-dessous.

Observons d'abord que le projecteur $\Pi_{p,p+n} : (y, x) \in \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^n \mapsto y \in \mathbb{R}^p$ peut s'écrire

$$\Pi_{p,p+n} = \Phi_{p+1} \circ \cdots \circ \Phi_{p+n}.$$

où les Φ_k réalisent l'élimination de Fourier de la k-ième variable. Ensuite, il suffit d'observer que

$$\begin{aligned} T(P) &= \{Tx : Ax \leqslant b\} \\ &= \{y : y = Tx \text{ et } Ax \leqslant b\} \\ &= \Pi_{p,p+n}\{(y, x) : y = Tx \text{ et } Ax \leqslant b\} \\ &= (\Phi_{p+1} \circ \cdots \circ \Phi_{p+n})\{(y, x) : y = Tx \text{ et } Ax \leqslant b\}. \end{aligned}$$

Comme l'ensemble $\{(y,x) : y = Tx \text{ et } Ax \leqslant b\}$ est un polyèdre convexe et comme chaque élimination de Fourier transforme un polyèdre convexe en un autre, on voit que $T(P)$ est un polyèdre convexe. □

Remarque 2.18 La proposition précédente a un corollaire que nous utiliserons quelque fois : pour une matrice A et des vecteurs x de dimensions appropriées,

$$\{Ax : x \geqslant 0\} \text{ est un cône convexe fermé.} \tag{2.23}$$

Le fait que ce soit un cône convexe peut se vérifier facilement en utilisant les définitions. Le caractère fermé résulte du fait que l'orthant positif est un polyèdre convexe ; donc, par la proposition précédente, il en est de même de $\{Ax : x \geqslant 0\}$ qui, comme polyèdre convexe, est fermé. On notera, qu'en général, l'image par une application linéaire d'un cône convexe fermé quelconque n'est pas nécessairement fermée (exercice 2.21). D'autre part, il faut se garder de confondre (2.23) avec le fait, trivial lui, que l'ensemble $\{x : Ax \geqslant 0\}$ est un cône convexe fermé non vide (il est fermé parce qu'il est l'image réciproque de l'orthant positif par l'application continue A). L'affirmation (2.23) peut se voir avec un point de vue plus géométrique : l'enveloppe conique d'un nombre *fini* de vecteurs (les colonnes de A) est un fermé. De ce point de vue, la seconde partie de la proposition 2.22 est un peu plus riche. □

2.4.3 Optimisation linéaire

Voici une conséquence importante de la proposition 2.17.

Proposition 2.19 (existence de solution d'un problème d'optimisation linéaire) *Soient $\mathbb{E}$ un espace euclidien, $c \in \mathbb{E}$ et P un polyèdre convexe non vide de $\mathbb{E}$. Alors, le problème $\inf\{\langle c, x\rangle : x \in P\}$ a une solution si l'infimum est fini.*

Démonstration. Soit $\{x_k\} \subseteq P$ (non vide, par hypothèse) une suite minimisante, vérifiant donc

$$\langle c, x_k\rangle \to \alpha := \inf\{\langle c, x\rangle : x \in P\},$$

qui est fini (par hypothèse). On peut supposer que P est écrit sous la forme standard (2.19). On introduit l'application linéaire

$$T : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R} \times \mathbb{R}^m : x \mapsto (\langle c, x\rangle, Ax).$$

Alors Tx_k est dans le cône convexe $T(\mathbb{R}^n_+)$, qui par (2.23) est fermé, et

$$Tx_k \to (\alpha, b).$$

Donc $(\alpha, b) \in T(\mathbb{R}^n_+)$, c'est-à-dire qu'il existe un $\bar{x} \geqslant 0$ tel que

$$(\alpha, b) = T\bar{x} = (\langle c, \bar{x}\rangle, A\bar{x}).$$

On voit que ce $\bar{x}$ est solution du problème d'optimisation considéré. □

2.4.4 Faces et sommets

On rappelle qu'une arête d'un convexe est une face de dimension 1 et qu'un point extrême est une face de dimension 0. Un point extrême d'un polyèdre convexe P est aussi appelé un *sommet*. On note $\text{ext}(P)$ l'ensemble des sommets de P. La figure 2.2 illustre les différents types de faces d'un polyèdre convexe dans $\mathbb{R}^2$.

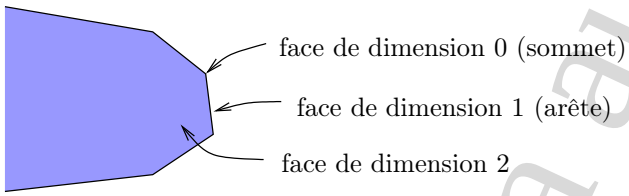


Fig. 2.2. Faces d'un polyèdre convexe

Si P est donné dans la représentation primale (2.20),

$$\text{ext}(P) \subseteq \{x^1, \ldots, x^p\},$$

sans que l'on ait nécessairement l'égalité (exercice 2.19). La représentation duale (2.19) fournit une description plus précise des sommets d'un polyèdre. Pour $x \in \mathbb{R}^n$, on note

$$I^+(x) := \{i : x_i > 0\} \quad \text{et} \quad I^0(x) := \{i : x_i = 0\}.$$

Proposition 2.20 (faces et sommets d'un polyèdre convexe) *Considérons un polyèdre P représenté par (2.19) et un point $x \in P$, dont on note $F(x)$ la face qu'il engendre. Alors*

$$\dim F(x) = \dim \mathcal{N}\left(A_{:I^+(x)}\right),$$

où $A_{:I^+(x)}$ est la matrice formée des colonnes A^j de A avec indices $j \in I^+(x)$. En particulier, $x \in P$ est un sommet de P si, et seulement si, les colonnes $\{A^j : x_j > 0\}$ de A sont linéairement indépendantes.

Démonstration. Simplifions les écritures en notant $B := I^+(x)$ et $N := I^0(x)$. On note alors $A_{:B}$ (resp. $A_{:N}$) la matrice extraite de A formée de ses colonnes avec indices dans B (resp. N). On fait de même pour les vecteurs de $\mathbb{R}^n$, si bien que $x_B > 0$ et $x_N = 0$. Le résultat découle des équivalences suivantes, dans lesquelles $k \geqslant 1$:

$\dim \mathcal{N}(A_{:B}) \geqslant k$,

$\iff$ on peut trouver des directions $d^1, \ldots, d^k$ linéairement indépendantes telles que, pour tout i, $Ad^i = 0$ et $d^i_N = 0$,

$\iff$ on peut trouver des directions $d^1, \ldots, d^k$ linéairement indépendantes telles que, pour tout $\alpha = (\alpha_1, \ldots, \alpha_k) \in \mathbb{R}^k$ voisin de zéro, on a $x + \sum_{i=1}^k \alpha_i d^i \in P$,

$\boxed{\Rightarrow}$ on a $A(x+\sum_i \alpha_i d^i) = b$, $(x+\sum_i \alpha_i d^i)_N = 0$ et $(x+\sum_i \alpha_i d^i)_B = x_B + \sum_i \alpha_i d^i_B \geqslant 0$ pour α petit (car $x_B > 0$),

$\boxed{\Leftarrow}$ en prenant $\alpha = (0,\dots,0,\alpha_i,0,\dots,0)$ avec $|\alpha_i|$ petit non nul, la relation $A(x+\sum_i \alpha_i d^i) = b$ implique que $Ad^i = 0$; d'autre part, la relation $(x+\sum_i \alpha_i d^i)_N \geqslant 0$ implique que $\alpha_i d^i_N \geqslant 0$ pour $|\alpha_i|$ petit, ou encore que $d^i_N = 0$,

$\iff \dim F(x) \geqslant k$.

On en déduit que $\dim \mathcal{N}(A_{:B}) = \dim F(x)$. □

Corollaire 2.21 *Un polyèdre non vide représenté par* (2.19) *a au plus* $\binom{n}{r}$ *sommets, où* r *est le rang de* A.

Démonstration. Soit

$$\mathcal{B} := \{B : A_{:B} \text{ est injective et } \mathcal{R}(A_{:B}) = \mathcal{R}(A)\}.$$

Observons que les $A_{:B}$ avec $B \in \mathcal{B}$ sont des sous-matrices extraites de A, de type $m \times r$, si bien que $|\mathcal{B}| \leqslant \binom{n}{r}$. D'autre part, si l'on introduit l'application $\varphi : \mathcal{B} \to \mathbb{R}^n$ qui à $B \in \mathcal{B}$ fait correspondre l'unique $x \in \mathbb{R}^n$ tel que $Ax = b$ et $x_i = 0$ pour $i \notin B$, on voit que tout sommet est de la forme $\varphi(B)$, avec $B \in \mathcal{B}$ (proposition 2.20 et théorème B.1 de la base incomplète). Le nombre de sommets est donc $\leqslant |\varphi(\mathcal{B})| \leqslant |\mathcal{B}| \leqslant \binom{n}{r}$. □

Le nombre de sommets d'un polyèdre convexe représenté sous forme standard peut augmenter exponentiellement avec n. Par exemple, le polyèdre convexe de $\mathbb{R}^{2n}$ écrit sous forme standard (on note e un vecteur dont toutes les composantes valent 1)

$$\{(x,y) \in \mathbb{R}^{2n} : x + y = e,\ x \geqslant 0,\ y \geqslant 0\} \text{ a } 2^n \text{ sommets.}$$

En effet, ce polyèdre P est une récriture sous forme standard du polyèdre $P_0 = \{x \in \mathbb{R}^n : 0 \leqslant x \leqslant e\}$. On voit facilement que (x,y) est un sommet de P si, et seulement si, x est un sommet de P_0 et $y = e - x$, si bien que P et P_0 ont le même nombre de sommets. Comme $P_0 = \frac{1}{2}(B_\infty + 1)$ est un translaté-contracté de la boule unité de $\mathbb{R}^n$ pour la norme ℓ_∞, il a 2^n sommets (exercice 2.15) ; il en est donc de même de P.

Un *cône polyédrique convexe* est un cône qui est aussi un polyèdre convexe. Comme polyèdre convexe, il peut s'écrire sous la forme standard (2.19) et pour que celui-ci soit un cône, il faut que $b = 0$ (prendre un point de la forme tx avec $t \downarrow 0$). Sous sa forme standard, un cône polyédrique convexe s'écrit donc comme suit :

$$K = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = 0,\ x \geqslant 0\}. \tag{2.24}$$

Ce cône est d'ailleurs le cône asymptotique du polyèdre convexe (2.19) : $K = P^\infty$ (exercice 2.18). Évidemment 0 est un sommet de K et on démontre facilement qu'il n'y en a pas d'autre. Quant aux arêtes de K, nécessairement de la forme $\mathbb{R}_+ x$ avec $x \neq 0$, elles sont repérées par le fait que $\dim \mathcal{N}(A_{:I^+(x)}) = 1$ (proposition 2.20).

2.4.5 Équivalence des représentations

Proposition 2.22 (résolution d'un polyèdre convexe) *Un polyèdre convexe P écrit sous la forme standard (2.19) peut aussi s'écrire*

$$P = \mathrm{co}\{x^1, \ldots, x^p\} + \mathrm{cone}\{y^1, \ldots, y^q\}, \tag{2.25}$$

où les vecteurs x^1, …, x^p ($p \geqslant 1$) sont les sommets de P et les demi-droites $\mathbb{R}_+ y^1$, …, $\mathbb{R}_+ y^q$ ($q \geqslant 1$) associées à des y^j non nuls sont les arêtes de P^∞ ; en particulier, un polyèdre convexe écrit sous la forme standard (2.19) a au moins un sommet. Inversement, tout ensemble de la forme (2.25) est un polyèdre convexe.

Démonstration. 1) Montrons qu'un polynôme convexe P écrit sous forme standard (2.19) peut s'écrire sous la forme (2.25).

[$\supseteq$] Soient des $x^i \in P$ (c'est-à-dire $Ax^i = b$ et $x^i \geqslant 0$), des $y^j \in P^\infty$ (c'est-à-dire $Ay^j = 0$ et $y^j \geqslant 0$), des $\alpha_i \geqslant 0$ vérifiant $\sum_i \alpha_i = 1$ et des $\beta_j \geqslant 0$. Alors $x = \sum_i \alpha_i x^i + \sum_j \beta_j y^j$ est clairement dans P (c'est-à-dire $Ax = b$ et $x \geqslant 0$).

[$\subseteq$] Commençons par montrer que $P \subseteq \mathrm{co}\{x^1, \ldots, x^p\} + P^\infty$, où les x^i sont les sommets de P, en nombre $p \geqslant 1$. Soit $x \in P$. On procède par récurrence sur $\dim \mathcal{N}(A_{:I^+(x)})$.

- Si $\dim \mathcal{N}(A_{:I^+(x)}) = 0$, x est un sommet (proposition 2.20) et le résultat est clairement démontré.
- Supposons que le résultat soit démontré pour les $x \in P$ tels que $\dim \mathcal{N}(A_{:I^+(x)}) = 0, \ldots, k-1$, avec $k \geqslant 1$, et démontrons le lorsque x vérifie $\dim \mathcal{N}(A_{:I^+(x)}) = k$. Comme $k \geqslant 1$, on peut trouver une direction d telle que

$$d \neq 0, \qquad d_{I^0(x)} = 0 \qquad \text{et} \qquad Ad = 0.$$

On envisage trois cas, selon le signe des composantes de d, illustrés à la figure 2.3.

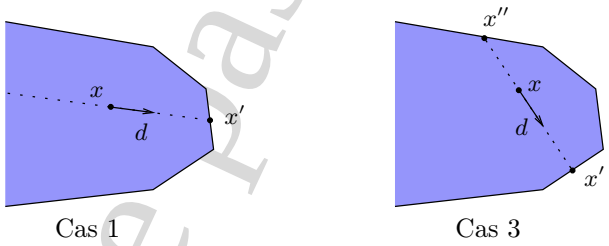


Fig. 2.3. Deux cas de la démonstration de la proposition 2.22

- Cas 1 : $d \leqslant 0$. Prenons le plus grand $\alpha' > 0$ tel que $x' := x + \alpha' d \geqslant 0$. Alors $x' \in P$ et $I^+(x') \subsetneqq I^+(x)$. Remarquons que

$$\mathcal{N}(A_{:I^+(x')}) \times 0_{I^+(x)\setminus I^+(x')} \subseteq \mathcal{N}(A_{I^+(x)})$$
$$d_{I^+(x)} \in \mathcal{N}(A_{:I^+(x)}), \text{ mais } d_{I^+(x)} \notin \mathcal{N}(A_{:I^+(x')}) \times 0_{I^+(x)\setminus I^+(x')}.$$

La dernière non-appartenance vient du fait que d a nécessairement une composante non nulle avec indice $i \in I^+(x) \setminus I^+(x')$ (un indice $i \in I^+(x)$ tel que $x'_i = 0$, alors que $x_i > 0$). Dès lors $\dim \mathcal{N}(A_{:I^+(x')}) = \dim \mathcal{N}(A_{:I^+(x')}) \times 0_{I^+(x)\setminus I^+(x')} \leqslant \dim \mathcal{N}(A_{:I^+(x)}) - 1$. Par récurrence, on a $x' \in \mathrm{co}\{x^1, \ldots, x^p\} + P^\infty$. Comme d'autre part, $-d \in P^\infty$, le résultat est démontré pour $x = x' + \alpha'(-d)$ qui est alors aussi dans $\mathrm{co}\{x^1, \ldots, x^p\} + P^\infty$.

- Cas 2 : $d \geqslant 0$. On s'y prend de la même manière, avec $\alpha'' > 0$ le plus grand possible tel que $x'' := x - \alpha'' d \geqslant 0$.
- Cas 3 : $d \not\leqslant 0$ et $d \not\geqslant 0$. On définit $x' := x + \alpha' d$ et $x'' := x - \alpha'' d$, avec $\alpha' > 0$ et $\alpha'' > 0$ les plus grands possibles tels que $x' \geqslant 0$ et $x'' \geqslant 0$. On a

$$x = \frac{\alpha''}{\alpha' + \alpha''} x' + \frac{\alpha'}{\alpha' + \alpha''} x''.$$

Comme ci-dessus, x' et $x'' \in \mathrm{co}\{x^1, \ldots, x^p\} + P^\infty$, et donc il en est de même de x qui est une combinaison convexe de x' et de x''.

Il reste à montrer que $P^\infty \subseteq \mathrm{cone}\{y^1, \ldots, y^q\}$, où les y^j non nuls engendrent les arêtes de P^∞. Ce résultat est clair si $P^\infty = \{0\}$. Dans le cas contraire, on considère le polyèdre convexe $P_1 := \{y : Ay = 0, e^\mathsf{T} y = 1, y \geqslant 0\}$, qui est obtenu en normalisant les éléments de P^∞ (e est un vecteur dont les éléments valent tous 1) et qui est non vide. Clairement $P_1^\infty = \{0\}$ et donc P_1 est borné (corollaire 2.8). Par ce que l'on vient de démontrer, $P_1 = \mathrm{co}\{y^1, \ldots, y^q\}$, où les y^j sont les sommets de P_1. Alors $P^\infty = \mathbb{R}_+ P_1 = \mathrm{cone}\{y^1, \ldots, y^q\}$. Il reste à montrer que les y^j engendrent les arêtes de P^∞ ou encore, d'après la proposition 2.20, que $\dim \mathcal{N}(A_{:I^+(y^j)}) = 1$. D'une part $\dim \mathcal{N}(A_{:I^+(y^j)}) \geqslant 1$ car $(y^j)_{I^+(y^j)}$ est non nul et dans $\mathcal{N}(A_{:I^+(y^j)})$ (du fait que $e^\mathsf{T} y^j = 1$ et $Ay^j = 0$). D'autre part, comme y^j est un sommet de P_1,

$$\mathcal{N}\begin{pmatrix} A_{:I^+(y^j)} \\ e^\mathsf{T}_{I^+(y^j)} \end{pmatrix} = \{0\}.$$

Ceci implique que $\dim \mathcal{N}(A_{:I^+(y^j)}) \leqslant 1$ (exercice B.2).

2) Montrons la réciproque. Un ensemble P de la forme (2.25) peut aussi s'écrire $T(Q)$, où

$$Q = \left\{ (\alpha, \beta) \in \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^q : \alpha \geqslant 0,\ \sum_{i=1}^p \alpha_i = 1,\ \beta \geqslant 0 \right\}$$

et $T : \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^q : (\alpha, \beta) \mapsto \sum_i^p \alpha_i x^i + \sum_j \beta_j y^j$. Clairement, l'ensemble Q est un polyèdre convexe (écrit sous forme standard) et T est une application linéaire. Par la proposition 2.17 (démontrée pour les polyèdres convexes écrits sous forme standard), $P = T(Q)$ est un polyèdre convexe. □

Le passage d'une représentation (primale ou duale) à l'autre est une opération difficile. Un algorithme a été proposé par Motzkin et al. [407] et redécouvert par Chernikova [106, 107, 108].

2.5 Opérations

2.5.1 Image linéaire ▲ ⊖

Soient $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ deux espaces vectoriels de dimension finie, $A : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ une application linéaire (on pourrait la prendre affine) et C un convexe *fermé* de $\mathbb{E}$. On cherche à savoir dans quelles conditions le convexe $A(C)$, image de C par A, est fermé. Un tel résultat joue un rôle dans la démonstration de l'existence de solution de problèmes d'optimisation convexes (on vient d'en voir un exemple avec la proposition 2.19).

Évidemment, si C est compact, $A(C)$ est compact comme image d'un compact par une application continue, donc fermé. Par conséquent, c'est le comportement asymptotique de C qui intervient dans le caractère non fermé éventuel de $A(C)$: on peut parfois trouver une suite $\{x_k\}$, non bornée, telle que Ax_k converge vers un élément qui n'est pas dans $A(C)$. C'est le cas, par exemple, lorsque $C = \{x \in \mathbb{R}^2 : x_1 x_2 \geqslant 1\}$ et $Ax = x_1$; on trouve que $A(C) = \mathbb{R}_{++}$, qui n'est pas fermé. Le fait que C soit un *cône* convexe fermé, n'apporte pas de garantie suffisante (exercice 2.21). Par ailleurs, on sait que $A(C)$ est fermé dans les situations suivantes :

- C est un polyèdre convexe (proposition 2.17),
- $\mathcal{N}(A) \cap C^\infty$ est un sous-espace vectoriel (point 6 de la proposition 2.9).

Ces deux situations sont loin de les couvrir toutes. Par exemple, aucune de ces hypothèses n'est vérifiée dans l'exemple élémentaire suivant : $C = \{x \in \mathbb{R}^2 : x_2 \geqslant x_1^2\}$ et $Ax = x_1$; on trouve que $A(C) = \mathbb{R}$ est fermé, alors que C n'est pas un polyèdre convexe et que $\mathcal{N}(A) \cap C^\infty = \{x \in \mathbb{R}^2 : x_1 = 0,\ x_2 \geqslant 0\}$ n'est pas un sous-espace vectoriel.

Cette question a beaucoup été étudiée. Une synthèse assez complète est présentée dans l'ouvrage d'Auslender et Teboulle [26], mais demande de long développements. Nous nous contenterons ici de couvrir les cas qui nous seront utiles dans la suite. De manière plus spécifique, nous allons généraliser la proposition 2.17 a des ensembles plus généraux que des polyèdres convexes, à savoir des ensembles de la forme $c^{-1}(0)$, où les composantes de c sont quadratiques convexes. Autrement dit C peut être une intersection finie d'ensembles de sous-niveau d'applications quadratiques convexes (pas seulement affines).

2.5.2 Projection

Soit $\mathbb{E}$ un espace vectoriel euclidien, dont le produit scalaire est noté $\langle \cdot, \cdot \rangle$ et la norme associée $\| \cdot \|$. On sait bien ce qu'est le projeté d'un point x de $\mathbb{E}$ sur un sous-espace vectoriel $\mathbb{F}$ de $\mathbb{E}$: c'est le point $\bar{x} \in \mathbb{F}$ tel que $x - \bar{x}$ est orthogonal à tout vecteur de $\mathbb{F}$; mais c'est aussi le point $\bar{x} \in \mathbb{F}$ le plus proche de x. Cette dernière caractérisation peut être utilisée pour définir le projeté d'un point sur certaines parties de $\mathbb{E}$ qui ne sont pas des sous-espaces vectoriels.

On appelle *projection orthogonale* sur une partie C de $\mathbb{E}$, l'opération qui à un point $x \in \mathbb{E}$ associe toute solution éventuelle des problèmes équivalents (ils ont les mêmes solutions) suivants :

$$\mathrm{d}_C(x) := \inf_{y \in C} \|y - x\| \qquad \text{et} \qquad \mathrm{e}_C(x) := \inf_{y \in C} \frac{1}{2}\|y - x\|^2. \tag{2.26}$$

La valeur optimale $\mathrm{d}_C(x)$ du premier problème est la *distance de x à C* et $\mathrm{e}_C(x) = \frac{1}{2}[\mathrm{d}_C(x)]^2$. Toute solution de ces problèmes est appelée *projeté* de x sur C. Clairement, x est le projeté de x si $x \in C$. La proposition 2.24 ci-dessous nous montrera que ces problèmes ont une solution et une seule si C est un convexe fermé non vide le résultat ne serait pas vrai pour une norme arbitraire, qui n'est pas associée à un produit scalaire ; le qualificatif *orthogonal* est là pour rappeler cette propriété de la norme utilisée dans la projection. On note alors $\mathrm{P}_C(x)$ cette solution et l'opérateur $\mathrm{P}_C : \mathbb{E} \to C$ est alors appelé le *projecteur orthogonal* sur C.

Donnons en premier lieu des propriétés qui caractérisent un projeté orthogonal. La première, (2.27a), est la plus souvent utilisée ; elle le sera déjà dans la démonstration du résultat d'existence et d'unicité de la proposition 2.24.

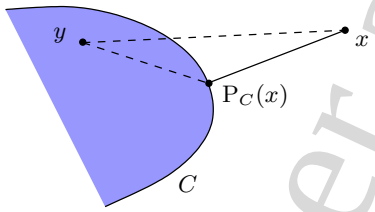


Fig. 2.4. Illustration de la proposition 2.23

Proposition 2.23 (caractérisation d'un projeté orthogonal) *Soit C un convexe non vide de $\mathbb{E}$. Un point $\bar{x} \in C$ est un projeté de $x \in \mathbb{E}$ sur C si, et seulement si, l'une des conditions équivalentes suivantes est vérifiée :*

$$\forall y \in C, \quad \langle y - \bar{x}, \bar{x} - x \rangle \geqslant 0, \tag{2.27a}$$
$$\forall y \in C, \quad \langle y - \bar{x}, y - x \rangle \geqslant 0, \tag{2.27b}$$
$$\forall y \in C, \quad \langle y - x, \bar{x} - x \rangle \geqslant \|\bar{x} - x\|^2. \tag{2.27c}$$

Démonstration. [$\bar{x}$ *est caractérisé par* (2.27a)] Soit $y \in C$. Par convexité de C, $z_t = \bar{x} + t(y - \bar{x}) \in C$ pour tout $t \in [0, 1]$. Comme $\bar{x}$ est solution de (2.26), on a

$$\|\bar{x} - x\|^2 \leqslant \|z_t - x\|^2 = \|\bar{x} - x\|^2 + 2t\langle \bar{x} - x, y - \bar{x} \rangle + t^2 \|y - \bar{x}\|^2.$$

Après retranchement de $\|\bar{x} - x\|^2$, division par $t > 0$ et passage à la limite lorsque $t \downarrow 0$, on obtient (2.27a). Inversement, en écrivant $y - x = (y - \bar{x}) + (\bar{x} - x)$ et en utilisant (2.27a), on obtient

$$\|y - x\|^2 = \|y - \bar{x}\|^2 + 2\langle y - \bar{x}, \bar{x} - x \rangle + \|\bar{x} - x\|^2 \geqslant \|\bar{x} - x\|^2.$$

Donc $\bar{x}$ est solution de (2.26).

[(2.27a) $\Leftrightarrow$ (2.27b)] Si (2.27a) est vérifiée, on a pour $y \in C$:

$$\langle y - \bar{x}, y - x \rangle = \|y - \bar{x}\|^2 + \langle y - \bar{x}, \bar{x} - x \rangle \geqslant 0,$$

c'est-à-dire (2.27b). Inversement, si $y \in C$ et $t \in]0,1]$, on a $z_t := \bar{x} + t(y-\bar{x}) \in C$. Donc, d'après (2.27b) :

$$\begin{aligned} 0 &\leqslant \langle z_t - \bar{x}, z_t - x\rangle \\ &= t\langle y-\bar{x}, (\bar{x}-x) + t(y-\bar{x})\rangle \\ &= t\langle y-\bar{x}, \bar{x}-x\rangle + t^2\|y-\bar{x}\|^2. \end{aligned}$$

En divisant par $t>0$, puis en faisant tendre t vers 0, on trouve (2.27a).

[(2.27a) $\Leftrightarrow$ (2.27c)] L'équivalence s'obtient en observant que $\langle y-x, \bar{x}-x\rangle = \langle y-\bar{x}, \bar{x}-x\rangle + \|\bar{x}-x\|^2$. □

Avec l'apport du chapitre 4, on comprendra que (2.27a) n'est autre que la condition nécessaire et suffisante d'optimalité (4.13). Ce point de vue permettrait de simplifier la démonstration.

Proposition 2.24 (existence et unicité du projeté orthogonal) *Soient C une partie convexe fermée non vide d'un espace euclidien $\mathbb{E}$ et x un point de $\mathbb{E}$. Alors il existe un unique élément $\bar{x} \in C$ tel que*

$$\forall y \in C, \quad \|\bar{x}-x\| \leqslant \|y-x\|.$$

Démonstration. Il s'agit de montrer que le problème (2.26) a une solution et une seule.

Existence : elle découle du corollaire 1.4 ; C est un fermé non vide et le critère de (2.26) est coercif.

Unicité : soient $\bar{x}_1$ et $\bar{x}_2$ deux projetés de x sur C ; par (2.27a), on a

$$\langle \bar{x}_2 - \bar{x}_1, \bar{x}_1 - x\rangle \geqslant 0 \quad \text{et} \quad \langle \bar{x}_1 - \bar{x}_2, \bar{x}_2 - x\rangle \geqslant 0\,;$$

en sommant ces deux inégalités, on trouve que $\bar{x}_1 = \bar{x}_2$. □

Proposition 2.25 (propriétés de la projection orthogonale) *La projection P_C sur un convexe fermé non vide C possède les propriétés suivantes :*

(i) $\forall\, x_1,\, x_2 \in \mathbb{E},\ \langle \mathrm{P}_C(x_2) - \mathrm{P}_C(x_1), x_2 - x_1\rangle \geqslant \|\mathrm{P}_C(x_2) - \mathrm{P}_C(x_1)\|^2$,

(ii) elle est donc monotone : $\forall\, x_1,\, x_2 \in \mathbb{E},\ \langle \mathrm{P}_C(x_2) - \mathrm{P}_C(x_1), x_2 - x_1\rangle \geqslant 0$,

(iii) elle est contractante : $\forall\, x_1,\, x_2 \in \mathbb{E},\ \|\mathrm{P}_C(x_1) - \mathrm{P}_C(x_2)\| \leqslant \|x_1 - x_2\|$.

Démonstration. D'après la caractérisation (2.27a) du projeté, on a

$$\begin{aligned} \langle \mathrm{P}_C(x_2) - \mathrm{P}_C(x_1), \mathrm{P}_C(x_1) - x_1\rangle &\geqslant 0, \\ \langle \mathrm{P}_C(x_1) - \mathrm{P}_C(x_2), \mathrm{P}_C(x_2) - x_2\rangle &\geqslant 0. \end{aligned}$$

En sommant ces inégalités, on trouve

$$\langle \mathrm{P}_C(x_2) - \mathrm{P}_C(x_1), x_2 - x_1 - (\mathrm{P}_C(x_2) - \mathrm{P}_C(x_1))\rangle \geqslant 0.$$

Par l'inégalité de Cauchy-Schwarz :

$$\|\mathrm{P}_C(x_2)-\mathrm{P}_C(x_1)\|^2 \leqslant \langle \mathrm{P}_C(x_2)-\mathrm{P}_C(x_1), x_2-x_1\rangle \leqslant \|\mathrm{P}_C(x_2)-\mathrm{P}_C(x_1)\|\,\|x_2-x_1\|.$$

On en déduit le résultat. □

Si la projection P_C est lipschitzienne (point (*iii*) de la proposition 2.25), elle n'est généralement pas différentiable. Elle a toutefois des dérivées directionnelles en un point de C, mais pas nécessairement en un point n'appartenant pas à C (voir Kruskal [339 ; 1969] pour un contre-exemple dans $\mathbb{R}^3$ et Shapiro [489 ; 1994] pour un contre-exemple simple dans $\mathbb{R}^2$).

2.5.3 Cône normal ⊖

Définition 2.26 Soient $\mathbb{E}$ un espace euclidien, dont le produit scalaire est noté $\langle\cdot,\cdot\rangle$, et $C \subseteq \mathbb{E}$ un ensemble convexe *fermé*. Le *cône normal* à C en un point $x \in C$ est l'ensemble noté et défini par

$$\mathrm{N}_x C \equiv \mathrm{N}_C(x) := \{\nu \in \mathbb{E} : \langle \nu, y-x\rangle \leqslant 0,\ \forall y \in C\}.$$

Par convention, $\mathrm{N}_C(x) = \varnothing$ si $x \notin C$. Les éléments de $\mathrm{N}_C(x)$ sont appelés des *normales* à C en x. □

Proposition 2.27 *Soient C un convexe fermé non vide d'un espace euclidien $\mathbb{E}$. Alors $\mathrm{N}_c C$ est un cône convexe fermé non vide.*

Démonstration. Le cône normal peut en effet s'écrire comme une intersection de demi-espaces (des convexes) fermés :

$$\mathrm{N}_x C = \bigcap_{y\in C} \{\nu \in \mathbb{E} : \langle \nu, y-x\rangle \leqslant 0\}.$$

□

Il est clair que l'orthogonal $\mathbb{E}_0^\perp$ du sous-espace vectoriel $\mathbb{E}_0$ parallèle à $\operatorname{aff} C$ est dans $\mathrm{N}_C(x)$; ce dernier contient donc un élément non nul si $\operatorname{aff} C \neq \mathbb{E}$. Par ailleurs, il est également clair que $0 \in \mathrm{N}_C(x) \cap \mathbb{E}_0$. La proposition suivante en dit un peu plus : si $x \in \partial_{\mathrm{rel}} C$, $\mathrm{N}_C(x) \cap \mathbb{E}_0$ n'est pas réduit à l'élément nul. Il y a une hypothèse implicite dans le fait que $\partial_{\mathrm{rel}} C \neq \varnothing$, à savoir que C n'est ni réduit à un point (auquel cas, C n'a pas de frontière et le cône normal en ce point est $\mathbb{E}$), ni $\mathbb{E}$ tout entier (auquel cas, le cône normal en tout point est réduit à $\{0\}$).

Proposition 2.28 (existence d'une normale non nulle) *Soient C un convexe fermé non vide d'un espace euclidien $\mathbb{E}$, $\mathbb{E}_0$ le sous-espace vectoriel parallèle à $\operatorname{aff} C$ et $x \in \partial_{\mathrm{rel}} C$. Alors $\mathrm{N}_C(x) \cap \mathbb{E}_0$ contient un élément non nul.*

DÉMONSTRATION. On peut supposer que $\operatorname{aff} C = \mathbb{E}$. Si x est sur la frontière de C, alors $C \neq \mathbb{E}$ et il existe une suite $\{x_k\}_{k\geqslant 1} \subseteq \mathbb{E} \setminus C$ qui converge vers x. Soit $y_k = \mathrm{P}_C(x_k)$. Comme $y_k \neq x_k$, on peut définir la vecteur unitaire $\nu_k := (x_k - y_k)/\|x_k - y_k\|$. Par caractérisation (2.27a) du projeté, on a

$$\forall\, y \in C : \quad \langle y - y_k, \nu_k\rangle \leqslant 0.$$

La suite $\{y_k\} \to x$, par la propriété de contraction de la projection (point (iii) de la proposition 2.25) : $\|y_k - x\| \leqslant \|x_k - x\| \to 0$. Par ailleurs, la suite $\{\nu_k\}$ étant bornée, on peut en extraire une sous-suite convergente, encore notée $\{\nu_k\} \to \nu$, avec ν de norme un. En passant à la limite dans l'inégalité ci-dessus, on obtient quel que soit $y \in C : \langle y - x, \nu\rangle \leqslant 0$. Ceci montre que ν est une normale non nulle. □

La démonstration des quelques règles de calcul de cônes normaux données ci-dessous est proposée à l'exercice 2.38 (la démonstration de l'égalité dans (2.28) est difficile à démontrer) et celle de la proposition 2.30 est proposée à l'exercice 2.39.

Proposition 2.29 (calcul de cône normal)
1) (intersection) *Si C_1 et C_2 sont deux ensembles convexes fermés et $x \in C_1 \cap C_2$, alors*
$$\mathrm{N}_x(C_1 \cap C_2) \supseteq \mathrm{N}_x C_1 + \mathrm{N}_x C_2, \tag{2.28}$$
avec égalité si $0 \in (C_1 - C_2)^\ominus$ ou si $C_1^\ominus \cap C_2^\ominus \neq \varnothing$.
2) (produit) *Si C_1 (resp. C_2) est un convexe fermé non vide d'un espace vectoriel $\mathbb{E}_1$ (resp. $\mathbb{E}_2$), alors $C_1 \times C_2 := \{(x_1, x_2) : x_1 \in C_1,\ x_2 \in C_2\}$ est un convexe fermé non vide de $\mathbb{E}_1 \times \mathbb{E}_2$ et en $(x_1, x_2) \in C_1 \times C_2$, on a*
$$\mathrm{N}_{(x_1,x_2)}(C_1 \times C_2) = \mathrm{N}_{x_1} C_1 \times \mathrm{N}_{x_2} C_2.$$

Proposition 2.30 (semi-continuité supérieure) *Soit $S := \{x \in \mathbb{E} : \|x\| = 1\}$ la sphère unité de $\mathbb{E}$ et $\mathrm{N}_C : \mathbb{E} \rightrightarrows \mathbb{E} : x \mapsto \mathrm{N}_C(x)$ la multifonction cône normal. Alors la multifonction $\mathrm{N}_C \cap S$ est semi-continue supérieurement.*

2.5.4 Séparation

Dans cette section, on suppose que l'espace vectoriel $\mathbb{E}$ est de dimension finie, muni d'un produit scalaire, noté $\langle\cdot,\cdot\rangle$.

Une notion essentielle d'analyse convexe est celle de la séparation des ensembles convexes. La séparation des deux convexes se fait géométriquement dans $\mathbb{E}$ en utilisant un *hyperplan affine* H, c'est-à-dire un ensemble de la forme

$$H := \{x \in \mathbb{E} : \langle \xi, x\rangle = t\},$$

où $\xi \in \mathbb{E}$ est *non nul* et $t \in \mathbb{R}$. On dit que cet hyperplan *sépare* deux convexes C_1 et C_2, ou que ceux-ci sont *séparables* par cet hyperplan, si l'on a

$$\forall x_1 \in C_1, \quad \forall x_2 \in C_2 \ : \quad \langle \xi, x_1 \rangle \leqslant t \leqslant \langle \xi, x_2 \rangle,$$

ce qui est équivalent à l'existence d'un vecteur ξ *non nul* dans $\mathbb{E}$ tel que

$$\sup_{x_1 \in C_1} \langle \xi, x_1 \rangle \leqslant \inf_{x_2 \in C_2} \langle \xi, x_2 \rangle. \tag{2.29}$$

On dit que cet hyperplan *sépare strictement* ces deux convexes, ou que ceux-ci sont *strictement séparables* par cet hyperplan, s'il existe deux scalaires t_1 et t_2 tels que $t_1 < t < t_2$ et

$$\forall x_1 \in C_1, \quad \forall x_2 \in C_2 \ : \quad \langle \xi, x_1 \rangle \leqslant t_1 < t_2 \leqslant \langle \xi, x_2 \rangle,$$

ce qui est équivalent à l'existence d'un vecteur ξ (nécessairement non nul) dans $\mathbb{E}$ tel que

$$\sup_{x_1 \in C_1} \langle \xi, x_1 \rangle < \inf_{x_2 \in C_2} \langle \xi, x_2 \rangle. \tag{2.30}$$

La figure 2.5 illustre ces notions de séparation. On y a utilisé le produit scalaire

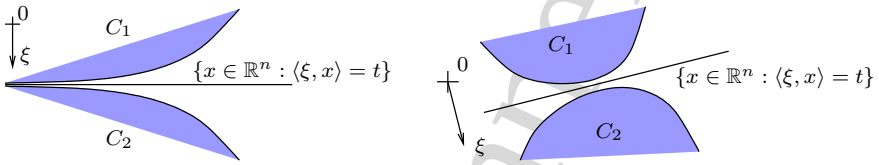


Fig. 2.5. séparation de deux convexes : non stricte à gauche et stricte à droite

euclidien sur $\mathbb{R}^2$. L'hyperplan $\{x \in \mathbb{R}^2 : \langle \xi, x \rangle = t\}$ sépare les convexes C_1 et C_2, non strictement à gauche et strictement à droite. Cet hyperplan est déterminé par un vecteur ξ qui lui est orthogonal et un scalaire t.

Nous donnons ci-dessous deux résultats de séparation. Le premier (théorème 2.31) énonce des conditions équivalentes à la séparation stricte en termes de $C_1 - C_2$ et de la distance de C_1 à C_2. Son corollaire 2.32 énonce un certain nombre de cas où cette séparation stricte peut être réalisée. Signalons le cas où les convexes disjoints sont l'un fermé et l'autre compact, qui est utilisé lorsqu'on veut montrer qu'un ensemble convexe fermé est inclus dans un autre ensemble convexe fermé (en raisonnant par l'absurde). Le second (théorème 2.33) exprime que l'on peut séparer (non strictement cette fois) deux ensembles convexes quelconques (en dimension finie).

Théorème 2.31 (séparation stricte de convexes) *Soient C_1 et C_2 deux convexes non vides d'un espace euclidien $\mathbb{E}$. Alors les propriétés suivantes sont équivalentes :*

(i) on peut séparer C_1 et C_2 strictement,
(ii) $0 \notin \operatorname{adh}(C_1 - C_2)$,
(iii) $\inf\{\|x_1 - x_2\| : x_1 \in C_1,\ x_2 \in C_2\} > 0$.

Démonstration. [$(i) \Rightarrow (ii)$] Il existe donc $\xi \in \mathbb{E}$ tel que l'on ait (2.30). Alors

$$0 < \inf_{\substack{x_1\in C_1\\ x_2\in C_2}} \langle \xi, x_1 - x_2\rangle = \inf_{x\in C_1-C_2} \langle \xi, x\rangle = \inf_{x\in \mathrm{adh}(C_1-C_2)} \langle \xi, x\rangle.$$

Donc $0 \notin \mathrm{adh}(C_1 - C_2)$.

$[(ii) \Rightarrow (iii)]$ Le problème dans (iii) s'écrit $\inf\{\|x\| : x \in C_1 - C_2\} = \inf\{\|x\| : x \in \mathrm{adh}(C_1 - C_2)\} > 0$ grâce à (ii).

$[(iii) \Rightarrow (i)]$ Comme le convexe fermé non vide $C := \mathrm{adh}(C_1 - C_2)$ ne contient pas zéro, le projeté ξ de zéro sur C est non nulle et, d'après (2.27a), vérifie pour tout $x \in C : 0 \leqslant \langle \xi, x - \xi\rangle$. Alors pour tout $x_i \in C_i$, $0 < \|\xi\|^2 \leqslant \langle \xi, x_1 - x_2\rangle$ ou encore

$$\forall x_1 \in C_1, \quad \forall x_2 \in C_2 \ : \quad \langle \xi, x_2\rangle + \|\xi\|^2 \leqslant \langle \xi, x_1\rangle.$$

On en déduit (i). □

Corollaire 2.32 (séparation stricte de convexes) *On peut séparer strictement deux convexes fermés non vides disjoints C_1 et C_2 d'un espace euclidien $\mathbb{E}$ dans chacune des situations suivantes :*
1) *$C_1 - C_2$ est fermé,*
2) *$C_1^\infty \cap C_2^\infty = \{0\}$,*
3) *C_1 ou C_2 est compact,*
4) *C_1 et C_2 sont polyédriques.*

Démonstration. 1) Il suffit d'utiliser l'implication $(ii) \Rightarrow (i)$ de la proposition 2.31, après avoir constaté que $0 \notin C_1 - C_2$, car C_1 et C_2 sont disjoints.

2) D'après le point 1, il suffit de montrer que $C := C_1 - C_2$ est fermé. Soit $x_k^1 - x_k^2 \to x$, avec $\{x_k^i\} \subseteq C_i$, $i = 1, 2$. Les suites $\{x_k^i\}$ sont bornées (en effet, si $\{x_k^1\}$ n'est pas bornée, alors, avec $t_k := \|x_k^1\|$, on aurait une sous-suite de x_k^1/t_k qui convergerait vers un $d \in C_1^\infty$ non nul et pour la même sous-suite $x_k^2/t_k \to d$; donc $d \in C_1^\infty \cap C_2^\infty = \{0\}$, ce qui contredirait le fait que $d \neq 0$). En extrayant des sous-suites convergentes des $\{x_k^i\}$, on voit que $x \in C$. Donc C est fermé.

3) Si C_1 est compact, $C_1^\infty = \{0\}$ (corollaire 2.8) et le résultat se déduit du point 2.

4) Si les C_i sont polyédriques, $C_1 - C_2$ est polyédrique (exercice 2.18 ou 2.19), donc fermé. On applique alors le point 1. □

On ne peut pas se libérer de la condition $C_1^\infty \cap C_2^\infty = \{0\}$ du point 2 du corollaire précédent sans en modifier la conclusion. Par exemple, les deux convexes fermés $C_1 = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : y \geqslant e^x\}$ et $C_2 = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : y \leqslant 0\}$ sont disjoints dans $\mathbb{R}^2$, mais ne peuvent pas être séparés strictement (observons que dans ce cas $C_1^\infty \cap C_2^\infty = \mathbb{R}_- \times \{0\}$).

Le point 3 du corollaire précédent s'utilise souvent pour montrer qu'un point x appartient à un convexe fermé non vide C. On raisonne par l'absurde en suppossant que ce n'est pas le cas. Alors $\{x\}$ et C sont deux convexes fermés disjoints, dont l'un est fermé et l'autre (le singleton $\{x\}$) est compact. On les sépare et on démontre que cela conduit à une contradiction. Cet argument est utilisé dans la démonstration des propositions 2.35 et 2.40.

Le point 3 du corollaire précédent reste vrai en dimension infinie. On peut l'obtenir à partir d'un résultat de prolongement d'application linéaire continue et c'est l'existence d'un projeté qui s'en déduit [79 ; 1983].

En dimension infinie, il y a un autre résultat permettant de séparer deux convexes, non strictement cette fois. Il faut pour cela que l'un des deux soit d'intérieur non vide. En dimension finie, cette hypothèse n'est pas nécessaire : on peut toujours séparer deux convexes quelconques disjoints par un hyperplan affine. C'est ce qu'affirme le théorème suivant.

Théorème 2.33 (séparation de convexes) *On peut séparer deux convexes non vides disjoints d'un espace euclidien.*

Démonstration. On considère $C := C_2 - C_1$, qui est convexe (car C_1 et C_2 sont convexes), non vide (car C_1 et C_2 sont non vides) et ne contient pas zéro (car C_1 et C_2 sont disjoints). Montrons que l'on peut trouver un vecteur non nul $\xi \in \mathbb{E}$ tel que

$$\forall\, (x_1, x_2) \in C_1 \times C_2 : \quad \langle x_2 - x_1, \xi \rangle \geqslant 0, \tag{2.31}$$

relation qui implique immédiatement que l'on peut séparer C_1 et C_2.

- Si $0 \notin \overline{C}$, on prend pour ξ le projeté de zéro sur C, qui vérifie par (2.27a) : $\langle (x_2 - x_1) - \xi, \xi - 0 \rangle \geqslant 0$, quels que soient $x_i \in C_i$. On en déduit (2.31).
- Dans le cas contraire, $0 \notin \overline{C} \setminus C \subseteq \partial_{\mathrm{rel}} C$ et on prend pour ξ l'opposé d'une normale non nulle à C en zéro (proposition 2.28), qui satisfait $\langle (x_2 - x_1) - 0, -\xi \rangle \leqslant 0$, quels que soient $x_i \in C_i$. On en déduit (2.31). □

2.5.5 Enveloppe convexe fermée

L'enveloppe convexe d'un ouvert relatif est un ouvert relatif (exercice 2.29) ; l'enveloppe convexe d'un compact est un compact (corollaire 2.4) ; mais l'enveloppe convexe d'un fermé n'est pas nécessairement fermée. C'est le cas par exemple de la partie fermée de $\mathbb{R}^2$ union de l'origine et de $\{x \in \mathbb{R}^2 : x_1 x_2 \geqslant 1\}$, dont l'enveloppe convexe $\{(0,0)\} \cup \{x \in \mathbb{R}^2 : x_1 > 0,\ x_2 > 0\}$ n'est pas fermée (voir la figure 2.6). La notion suivante a donc tout son sens.

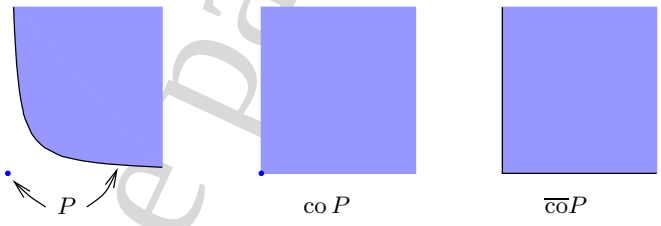


Fig. 2.6. Un ensemble P dont l'enveloppe convexe $\mathrm{co}\, P$ diffère de l'enveloppe convexe fermée $\overline{\mathrm{co}}P$

Soit P une partie de $\mathbb{E}$. L'intersection de convexes fermés étant un convexe fermé, on peut parler du plus petit convexe fermé contenant P, qui est donc l'intersection de

tous les convexes fermés contenant P. C'est ce que l'on appelle l'*enveloppe convexe fermée* de P. On la note

$$\overline{\mathrm{co}}P := \bigcap\{C : C \text{ est un convexe fermé contenant } P\}. \tag{2.32}$$

Évidemment, si C est un convexe fermé, $\overline{\mathrm{co}}C = C$. La proposition suivante donne, en particulier, une autre manière de définir l'enveloppe convexe fermée : c'est aussi l'adhérence de l'enveloppe convexe, mais nous avons préféré la définition (2.32) du fait de l'idée de minimalité qu'elle contient.

Proposition 2.34 *On a*

$$P_1 \subseteq P_2 \quad \Longrightarrow \quad \overline{\mathrm{co}}P_1 \subseteq \overline{\mathrm{co}}P_2,$$

$$P \subseteq \mathrm{co}\, P \subseteq \mathrm{co}\, \overline{P} \subseteq \overline{\mathrm{co}}P = \overline{\mathrm{co}}\overline{P} = \overline{\mathrm{co}\, P}.$$

Démonstration. 1) Évidemment, $P_1 \subseteq P_2 \subseteq \overline{\mathrm{co}}P_2$. Donc, $\overline{\mathrm{co}}P_2$ est un convexe fermé contenant P_1, si bien que $\overline{\mathrm{co}}P_1 \subseteq \overline{\mathrm{co}}P_2$.

2) Les deux premières inclusions sont claires. En notant que $\overline{P}$ est contenu dans tout convexe fermé contenant P, on a $\overline{P} \subseteq \overline{\mathrm{co}}P$ (par définition de $\overline{\mathrm{co}}P$) et donc aussi $\mathrm{co}\,\overline{P} \subseteq \overline{\mathrm{co}}P$ (car $\overline{\mathrm{co}}P$ est convexe). L'égalité $\overline{\mathrm{co}}P = \overline{\mathrm{co}}\overline{P}$ se déduit des observations suivantes : $P \subseteq \overline{P}$ implique $\overline{\mathrm{co}}P \subseteq \overline{\mathrm{co}}\overline{P}$ (première partie de la proposition) ; inversement $\overline{P} \subseteq \overline{\mathrm{co}}P$ ($\overline{\mathrm{co}}P$ est fermé), donc $\overline{\mathrm{co}}\overline{P} \subseteq \overline{\mathrm{co}}P$. Pour montrer $\overline{\mathrm{co}}P = \overline{\mathrm{co}\, P}$, on observe d'abord que $\overline{\mathrm{co}}P \subseteq \overline{\mathrm{co}\, P}$, parce que ce dernier ensemble est un convexe fermé contenant P (proposition 2.15). Inversement, $\mathrm{co}\, P \subseteq \overline{\mathrm{co}}P$ et comme ce dernier ensemble est fermé, on a $\overline{\mathrm{co}\, P} \subseteq \overline{\mathrm{co}}P$. □

Voici encore une autre manière de définir l'enveloppe convexe fermée. Un *demi-espace fermé* de $\mathbb{E}$ est un ensemble de la forme

$$H^-(\xi, \alpha) = \{x \in \mathbb{E} : \langle \xi, x\rangle \leqslant \alpha\}, \tag{2.33}$$

où $\xi \in \mathbb{E}$ n'est pas nul et $\alpha \in \mathbb{R}$. La proposition suivante exprime le fait qu'à droite dans (2.32), on peut ne sélectionner que les demi-espaces fermés.

Proposition 2.35 (description externe d'un convexe fermé) *L'enveloppe convexe fermée d'une partie $P \subseteq \mathbb{E}$ est l'intersection de tous les demi-espaces fermés contenant P.*

Démonstration. Soit C l'intersection de tous les demi-espaces fermés contenant P. Comme C est un convexe fermé, on a certainement $\overline{\mathrm{co}}(P) \subseteq C$. Inversement, si $x_0 \in C \setminus \overline{\mathrm{co}}(P)$, on peut séparer strictement le convexe compact $\{x_0\}$ et le convexe fermé $\overline{\mathrm{co}}(P)$ (point 3 du corollaire 2.32) : il existe $\xi \in \mathbb{E}$ et $\alpha \in \mathbb{R}$ tels que

$$\forall x \in \overline{\mathrm{co}}(P), \quad \langle \xi, x\rangle \leqslant \alpha < \langle \xi, x_0\rangle.$$

On en déduit deux conséquances contradictoires :

- par les inégalités de gauche, $P \subseteq H^-(\xi, \alpha)$, c.-à-d., $H^-(\xi, \alpha)$ est un demi-espace fermé contenant P ; alors $x_0 \in H^-(\xi, \alpha)$ (car x_0 est dans C et donc dans tous les demi-espaces fermés contenant P) ;
- par l'inégalité de droite, $x_0 \notin H^-(\xi, \alpha)$.

On a démontré que $C \subseteq \overline{\text{co}}(P)$. □

Corollaire 2.36 *Soit C un ensemble convexe. L'intersection de tous les demi-espaces fermés contenant C est $\overline{C}$.*

Corollaire 2.37 *C est un convexe fermé si, et seulement si, il est l'intersection de tous les demi-espaces fermés contenant C.*

2.5.6 Cône dual

Définition

Soient $\mathbb{E}$ un espace vectoriel euclidien, dont le produit scalaire est noté $\langle \cdot, \cdot \rangle$, et P une partie de $\mathbb{E}$. On appelle *cône dual* de P l'ensemble P^+ défini par

$$P^+ := \{x \in \mathbb{E} : \langle x, y \rangle \geqslant 0, \ \forall y \in P\}.$$

La notion de cône dual est illustrée à la figure 2.7, dans laquelle on a utilisé le produit

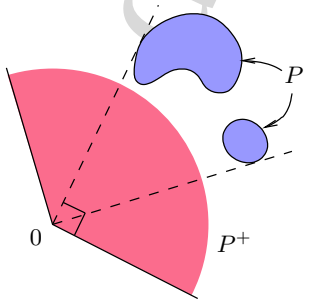


Fig. 2.7. Cône dual P^+ d'un ensemble P de $\mathbb{R}^2$ pour le produit scalaire euclidien (les demi-droites formant le bord du cône P^+ sont orthogonales aux demi-droites en trait discontinu qui délimitent le secteur angulaire contenant l'ensemble P)

scalaire euclidien de $\mathbb{R}^2$. Le *cône bidual* P^{++} de P est l'ensemble $(P^+)^+$, le dual du dual. On définit aussi le *cône dual négatif* P^- de P comme l'opposé de son cône dual, c'est-à-dire

$$P^- := \{d \in \mathbb{E} : \langle d, x \rangle \leqslant 0, \ \forall x \in P\} = -P^+.$$

Enfin, un cône K de $\mathbb{E}$ est dit *autodual* si $K^+ = K$; on en trouvera des exemples à l'exercice 2.32.

Proposition 2.38 (premières propriétés) *Soient $\mathbb{E}$ un espace euclidien, P, P_1 et P_2 des parties non vides de $\mathbb{E}$ et $(P_i)_{i\in I}$ une famille quelconque de parties P_i non vides de $\mathbb{E}$. Alors*

1) *P^+ est un cône convexe fermé non vide,*
2) *$P_1 \subseteq P_2 \Longrightarrow P_1^+ \supseteq P_2^+$ et $P_1^{++} \subseteq P_2^{++}$,*
3) *$P^+ = (\mathbb{R}_+P)^+$, $P^+ = (\operatorname{co} P)^+$, $P^+ = (\operatorname{adh} P)^+$,*
4) *$P^{++} = \overline{\operatorname{co}}(\mathbb{R}_+P)$, en particulier $P \subseteq P^{++}$,*
5) *$P^{++} = P$ si, et seulement si, P est un cône convexe fermé,*
6) *$(P_1 + P_2)^+ \supseteq P_1^+ \cap P_2^+$, avec égalité si $0 \in \operatorname{adh}(P_1) \cap \operatorname{adh}(P_2)$,*
7) *$(\cup_{i\in I} P_i)^+ = \cap_{i\in I} P_i^+$.*
8) *$(Q_1 \times Q_2)^+ \supseteq Q_1^+ \times Q_2^+$, si $\varnothing \neq Q_1 \subseteq \mathbb{E}_1$ et $\varnothing \neq Q_2 \subseteq \mathbb{E}_2$, $(\mathbb{E}_1, \langle\cdot,\cdot\rangle_1)$ et $(\mathbb{E}_2, \langle\cdot,\cdot\rangle_2)$ sont deux espaces euclidiens et $\mathbb{E}_1 \times \mathbb{E}_2$ est muni du produit scalaire $\langle (x_1,x_2),(y_1,y_2)\rangle = \langle x_1,y_1\rangle_1 + \langle x_2,y_2\rangle_2$, avec égalité si $0 \in \operatorname{adh}(Q_1) \cap \operatorname{adh}(Q_2)$.*

Démonstration. 1) P^+ est clairement non vide (il contient 0). D'autre part, on peut écrire P^+ comme une intersection de cônes convexes fermés :

$$P^+ = \bigcap_{y\in P} \{x \in \mathbb{E} : \langle x, y\rangle \geqslant 0\}.$$

2) Évident.

3) Par le point 2, $P^+ \supseteq (\operatorname{adh} P)^+$. Inversement, si $d \in P^+$ et $x \in \operatorname{adh} P$, il existe une suite $\{x_k\} \subseteq P$ telle que $x_k \to x$. En passant à la limite dans $\langle d, x_k\rangle \geqslant 0$, on trouve $\langle d, x\rangle \geqslant 0$. Donc $d \in (\operatorname{adh} P)^+$. Les autres identités se démontrent aisément.

4) D'après la proposition 2.35, $\overline{\operatorname{co}}(\mathbb{R}_+P)$ est l'intersection de tous les demi-espaces fermés $H^-(\xi,\alpha)$ contenant $\mathbb{R}_+P$. De par la structure de $\mathbb{R}_+P$, $H^-(\xi,\alpha) \supseteq \mathbb{R}_+P$ implique que $H^-(\xi,\alpha) \supseteq H^-(\xi,0) \supseteq \mathbb{R}_+P$, si bien que $\overline{\operatorname{co}}(\mathbb{R}_+P)$ est l'intersection de tous les demi-espaces $H^-(\xi,0) = \{-\xi\}^+$ contenant $\mathbb{R}_+P$ ou P. Mais $\{-\xi\}^+$ contient P revient à dire que $-\xi \in P^+$. Dès lors $\overline{\operatorname{co}}(\mathbb{R}_+P) = \cap_{-\xi\in P^+}\{-\xi\}^+ = \{x \in \mathbb{E} : \langle d, x\rangle \geqslant 0$, pour tout $d \in P^+\} = P^{++}$.

5) Conséquence directe du point 4.

6) [$\supseteq$] Soient $d \in P_1^+ \cap P_2^+$, $x_1 \in P_1$ et $x_2 \in P_2$. Alors $\langle d, x_1 + x_2\rangle \geqslant 0$, car les $\langle d, x_i\rangle \geqslant 0$. Donc $d \in (P_1 + P_2)^+$. [$\subseteq$] Soient $d \in (P_1 + P_2)^+$, $x \in P_1$ et $\{x_k'\} \subseteq P_2$ avec $x_k' \to 0$ (0 adhère à P_2). Alors $x + x_k' \in P_1 + P_2$ et donc $\langle d, x + x_k'\rangle \geqslant 0$. À la limite lorsque $k \to \infty$, on trouve $\langle d, x\rangle \geqslant 0$, ce qui montre que $d \in P_1^+$.

7) $d \in \cap_{i\in I} P_i^+ \iff \forall i \in I\colon d \in P_i^+ \iff \forall i \in I$, $\forall x \in P_i\colon \langle d, x\rangle \geqslant 0 \iff \forall x \in \cup_{i\in I} P_i\colon \langle d, x\rangle \geqslant 0 \iff d \in (\cup_{i\in I} P_i)^+$.

8) L'inclusion $\supseteq$ est immédiate. On a l'égalité lorsque $0 \in \overline{Q_1} \cap \overline{Q_2}$, car si $(d_1, d_2) \in \mathbb{E}_1 \times \mathbb{E}_2$ vérifie $\langle (d_1,d_2),(x_1,x_2)\rangle \geqslant 0$ pour tout $x_i \in \mathbb{E}_i$, on obtient $d_1 \in Q_1^+$ en prenant $\{x_2^k\}_k \subseteq Q_2$ avec $x_2^k \to 0$ (de même pour $d_2 \in Q_2^+$). □

La démonstration du corollaire suivant est proposée à l'exercice 2.33.

Corollaire 2.39 (dual d'une somme et d'une intersection de cônes)
1) *Si K_1 et K_2 sont des cônes non vides, alors*

$$(K_1 + K_2)^+ = K_1^+ \cap K_2^+.$$

2) *Si K_1 et K_2 sont des cônes convexes fermés non vides, alors*

$$(K_1 \cap K_2)^+ = \overline{K_1^+ + K_2^+}. \tag{2.34}$$

Le lemme de Farkas et ses conséquences

La notion de cône dual généralise celle de sous-espace vectoriel orthogonal, puisque si P est un sous-espace vectoriel, $P^+ = P^\perp$. On connaît bien la relation $\mathcal{N}(A^\mathsf{T})^\perp = \mathcal{R}(A)$, rappelée en (A.6), qui nous apprend ce qu'est le cône dual d'un ensemble défini par des équations linéaires homogènes. Une question naturelle est alors de se demander ce qu'est le cône dual d'un ensemble donné par des *inégalités* linéaires homogènes. La réponse à cette question sera un corollaire du résultat plus général suivant. Dans celui-ci, on note $A^* : \mathbb{F} \to \mathbb{E}$ l'application linéaire adjointe de l'application linéaire $A : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ et $A(K) := \{Ax : x \in K\}$ l'image du cône K par A. On notera que le cône K de la proposition ne doit pas être fermé.

Proposition 2.40 (Farkas généralisé) *Soient $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ deux espaces euclidiens, $A : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ une application linéaire et K un cône convexe non vide de $\mathbb{E}$. Alors*

$$\{y \in \mathbb{F} : A^*y \in K^+\}^+ = \overline{A(K)}. \tag{2.35}$$

Démonstration. On note $D := \{y \in \mathbb{F} : A^*y \in K^+\}$.

[$\supseteq$] Comme D^+ est fermé, il suffit de montrer que $A(K) \subseteq D^+$. Soit $x \in K$ et montrons que $Ax \in D^+$. Pour cela on prend $y \in D$ et on constate que

$$\langle Ax, y\rangle = \langle x, A^*y\rangle \geqslant 0,$$

car $x \in K$ et $A^*y \in K^+$.

[$\subseteq$ (par l'absurde)] Supposons qu'il existe un vecteur $b \in D^+ \setminus \overline{A(K)}$. On peut alors séparer strictement le convexe compact $\{b\}$ et le convexe fermé $\overline{A(K)}$ (point 3 du corollaire 2.32) : il existe $y_0 \in \mathbb{F}$ et $\alpha \in \mathbb{R}$, tels que

$$\forall x \in K \ : \quad \langle y_0, b\rangle < \alpha \leqslant \langle y_0, Ax\rangle. \tag{2.36}$$

Exploitons cela pour mettre en évidence une contradiction. En prenant $x \to 0$, on trouve

$$\langle y_0, b\rangle < 0. \tag{2.37}$$

Par ailleurs, on peut prendre x de la forme tx avec $t > 0$ et $x \in K$ dans (2.36). En divisant l'inégalité de droite par t et en passant à la limite lorsque $t \to \infty$, on trouve

$\langle y_0, Ax\rangle \geqslant 0$ ou $\langle A^*y_0, x\rangle \geqslant 0$ ou $A^*y_0 \in K^+$ (car x est arbitraire dans K). Dès lors $y_0 \in D$ et, comme $b \in D^+$, on obtient $\langle y_0, b\rangle \geqslant 0$, ce qui contredit (2.37). □

Comme un cône dual est fermé (point 1 de la proposition 2.38), on pourra ôter l'adhérence dans (2.35) si, et seulement si, $A(K)$ est fermé.

L'identité (2.35) peut s'interpréter géométriquement comme suit (voir la figure 2.8). Elle signifie qu'un vecteur $b \notin \overline{A(K)}$ si, et seulement si, $b \notin \{y \in \mathbb{F} : A^*y \in K^+\}^+$, ce qui revient à dire qu'il existe un vecteur $y_0 \in \mathbb{F}$ tel que $\langle y_0, b\rangle < 0$ et $A^*y_0 \in K^+$ (ou $\langle y_0, Ax\rangle \geqslant 0$ pour tout $x \in K$). Cette propriété exprime donc le fait que l'hyperplan $\{y \in \mathbb{F} : \langle y_0, y\rangle = \langle y_0, b\rangle/2\}$ sépare strictement le singleton $\{b\}$ de l'adhérence du cône $A(K)$. C'est d'ailleurs cet argument de séparation de ces ensembles qui a été utilisé dans la démonstration de la proposition 2.40.

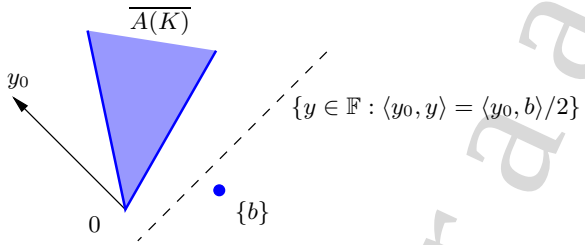


Fig. 2.8. Illustration du lemme de Farkas généralisé (proposition 2.40)

Observons que $\{y \in \mathbb{F} : A^*y \in K^+\} = (A^*)^{-1}(K^+)$ est l'image réciproque par l'application linéaire (continue) A^* du cône convexe fermé K^+ ; il s'agit donc d'un cône convexe fermé. D'après le point 5 de la proposition 2.38, il est égal à son bidual. Dès lors, par le lemme de Farkas généralisé :

$$\boxed{(A(K))^+ = \{y \in \mathbb{F} : A^*y \in K^+\},} \tag{2.38}$$

sans que l'on ait besoin de prendre d'adhérence à gauche (point 3 de la proposition 2.38).

L'identité (2.35) permet de donner une condition nécessaire pour que le système linéaire $Ax = b$ ait une solution x dans K. Il faut en effet que $b \in A(K) \subseteq \overline{A(K)}$ et donc que

$$\text{pour tout } y \text{ tel que } A^*y \in K^+ \text{ on ait } \langle y, b\rangle \geqslant 0. \tag{2.39}$$

Si $A(K)$ est fermé, cette condition sur A et b est aussi suffisante. Si $A(K)$ n'est pas fermé, on peut trouver des conditions nécessaires et suffisantes pour que $b \in A(K)$, qui renforcent (2.39), voir [347]. Lorsque K est l'orthant positif de $\mathbb{R}^n$, $A(K)$ est fermé (remarque 2.18) et le résultat, exprimé sous une forme différente, est alors connu sous le nom de *théorème de l'alternative*. Diverses variantes sont considérées à l'exercice 2.36.

Voici un corollaire de la proposition 2.40, plus proche de la contribution originale de Farkas.

Corollaire 2.41 (Farkas) *Soient A_1 et A_2 deux matrices ayant le même nombre de lignes. Alors*

$$\{y : A_1^{\mathsf{T}} y = 0,\ A_2^{\mathsf{T}} y \geqslant 0\}^+ = \{A_1 x_1 + A_2 x_2 : x_1 \text{ quelconque}, x_2 \geqslant 0\},$$

où $\{\cdot\}^+$ désigne le cône dual pour le produit scalaire euclidien.

Démonstration. Supposons que A_i $(i = 1, 2)$ soit de type $m \times n_i$. On applique la proposition 2.40 avec $\mathbb{E} = \mathbb{R}^{n_1} \times \mathbb{R}^{n_2}$, $\mathbb{F} = \mathbb{R}^m$, tous deux munis du produit scalaire euclidien, $A = (A_1\ A_2)$, $K = \mathbb{R}^{n_1} \times \mathbb{R}^{n_2}_+$. On calcule aisément

$$A^* = \begin{pmatrix} A_1^{\mathsf{T}} \\ A_2^{\mathsf{T}} \end{pmatrix} \qquad \text{et} \qquad K^+ = \{0\} \times \mathbb{R}^{n_2}_+.$$

La proposition 2.40 conduit alors au résultat puisque $\{A_1 x_1 + A_2 x_2 : x_2 \geqslant 0\} = \{A_1 x_1' - A_1 x_1'' + A_2 x_2 : x_1' \geqslant 0,\ x_1'' \geqslant 0,\ x_2 \geqslant 0\}$ est un fermé (remarque 2.18). □

Terminons cette section par d'autres propriétés des cônes duaux et quelques règles de calcul.

Corollaire 2.42 (polyédricité d'un cône dual) *Soit P un polyèdre convexe d'un espace euclidien $\mathbb{E}$. Alors P^+ est un polyèdre convexe.*

Démonstration. Par le point 3 de la proposition 2.38, $P^+ = K^+$, où $K = \operatorname{cone} P$. Par le point 4 de l'exercice 2.19, K est un cône polyédrique, qui est donc de la forme $K = \{x \in \mathbb{E} : Ax \geqslant 0\}$, où $A : \mathbb{E} \to \mathbb{R}^m$ est linéaire. Par la proposition 2.40, son dual s'écrit $K^+ = A^*(\mathbb{R}^m_+)$. Comme image par A^* du cône polyédrique $\mathbb{R}^m_+$, K^+ est un cône polyédrique (proposition 2.17). □

Lemme 2.43 (somme fermée de cônes duaux)
1) *$P_1^+ + \cdots + P_m^+$ est un polyèdre convexe (donc un fermé), si les P_i sont des polyèdres convexes,*
2) *$K_1^+ + \cdots + K_m^+$ est fermé, si les K_i sont des cônes convexes et si $K_1^\ominus \cap \cdots \cap K_m^\ominus \neq \varnothing$.*

Démonstration. 1) Si les P_i sont polyédriques, les P_i^+ sont aussi polyédriques (corollaire 2.42) et donc aussi leur somme $P_1^+ + \cdots + P_m^+$ (exercice 2.18 ou 2.19), qui est donc fermée.

2) Supposons à présent qu'il existe un point $\check{x} \in K_1^\ominus \cap \cdots \cap K_m^\ominus$ et que, pour $i \in [1\,{:}\,m]$, on ait des suites $\{d_k^i\} \subseteq K_i^+$ telles que $d_k^1 + \cdots + d_k^m \to d$. Il s'agit de montrer que $d \in K_1^+ + \cdots + K_m^+$.

On note P_i est le projecteur orthogonal sur le sous-espace vectoriel $\mathbb{E}_i := \operatorname{vect} K_i$ et $\mathrm{Q}_i := I - \mathrm{P}_i$ le projecteur orthogonal sur $\mathbb{E}_i^\perp$. Montrons d'abord que les suites

$\{\mathrm{P}_i\, d_k^i\}$ sont bornées. Par hypothèse, il existe un $\varepsilon > 0$ tel que $\bar{B}(\check{x}, \varepsilon) \cap (\operatorname{vect} K_i) \subseteq K_i$. Alors $\langle d_k^i, \check{x} - \varepsilon\, \mathrm{P}_i\, d_k^i / \|\mathrm{P}_i\, d_k^i\| \rangle \geqslant 0$, d'où l'on déduit que $\langle d_k^i, \check{x}\rangle \geqslant \varepsilon \|\mathrm{P}_i\, d_k^i\|$ et $\langle \sum_i d_k^i, \check{x}\rangle \geqslant \varepsilon \sum_i \|\mathrm{P}_i\, d_k^i\|$. Comme $\sum_i d_k^i \to d$, on voit que les $\{\mathrm{P}_i\, d_k^i\}$ sont bornées.

On peut alors trouver une sous-suite d'indices $\mathcal{K} \subseteq \mathbb{N}$ telle que chaque $\{\mathrm{P}_i\, d_k^i\}_{k\in\mathcal{K}}$ converge vers un $\bar{d}^i \in \mathbb{E}_i$. Comme pour tout $x \in K_i$, on a $0 \leqslant \langle d_k^i, x\rangle = \langle \mathrm{P}_i\, d_k^i, x\rangle \to \langle \bar{d}^i, x\rangle$, il vient que $\bar{d}^i \in K_i^+$.

On déduit de ce qui précède que $\{\sum_i \mathrm{Q}_i\, d_k^i\}_{k\in\mathcal{K}}$ converge vers $d - \sum_i \bar{d}^i$ dans le sous-espace vectoriel $\sum_i \mathbb{E}_i^\perp$, qui est un fermé. Dès lors $d - \sum_i \bar{d}^i \in \sum_i \mathbb{E}_i^\perp$ et on peut trouver des $\hat{d}^i \in \mathbb{E}_i^\perp$ tel que $d - \sum_i \bar{d}^i = \sum_i \hat{d}^i$. Observons maintenant que pour tout $x \in K_i$, on a $\langle \hat{d}_k^i, x\rangle = 0$.

On a donc montré que $\bar{d}^i + \hat{d}^i \in K_i^+$ et donc que $d = \sum_i (\bar{d}^i + \hat{d}^i) \in \sum_i K_i^+$. □

Corollaire 2.44 (dual d'une intersection) *Si K_i, $i \in [1\,{:}\,m]$, sont des cônes convexes fermés d'un espace euclidien $\mathbb{E}$, alors*

$$(K_1 \cap \cdots \cap K_m)^+ = \overline{K_1^+ + \cdots + K_m^+}.$$

On peut enlever l'adhérence si les K_i sont polyédriques ou si $K_1^\ominus \cap \cdots \cap K_m^\ominus \neq \varnothing$.

Démonstration. Soient $A : \mathbb{E}^m \to \mathbb{E} : (x_1, \ldots, x_m) \mapsto x_1 + \cdots + x_m$ et $K = K_1^+ \times \cdots \times K_m^+$. On vérifie aisément que $A^* : \mathbb{E} \to \mathbb{E}^m : x \mapsto (x, \ldots, x)$, que K est un cône convexe fermé et que $K^+ = K_1 \times \cdots \times K_m$. L'identité se déduit alors du lemme de Farkas généralisé (proposition 2.40). Par le lemme 2.43, $K_1^+ + \cdots + K_m^+$ est fermé si les K_i sont polyédriques ou si $K_1^\ominus \cap \cdots \cap K_m^\ominus \neq \varnothing$. □

On ne peut pas se passer de l'adhérence dans le résultat précédent, même si $K_1 \cap K_2^\ominus \cap \cdots \cap K_m^\ominus \neq \varnothing$. Par exemple, dans $\mathbb{R}^3$, si $m = 2$, $K_1 = \mathbb{R}^3_\nabla$ et $K_2 = \{x \in \mathbb{R}^3 : x_2 = x_3\}$, on a $K_1^+ = \mathbb{R}^3_\nabla$ (autodualité du cornet), $K_2^+ = \{d \in \mathbb{R}^3 : d_1 = 0,\ d_2 + d_3 = 0\}$, $K_1 \cap K_2^\ominus = K_1 \cap K_2 = \{x \in \mathbb{R}^3 : x_1 = 0,\ x_2 = x_3 \geqslant 0\} \neq \varnothing$, alors que $K_2^+ + K_3^+ = \{d : d_2 + d_3 > 0\} \cup \{d \in \mathbb{R}^3 : d_1 = 0,\ d_2 + d_3 = 0\}$ n'est pas fermé.

Polyèdre borné et singleton ⊖

La caractérisation de la bornitude du polyèdre P donné par (2.18) s'obtient aisément par l'examen de son cône asymptotique P^∞. Les caractérisations obtenues montrent que la propriété de bornitude ne dépend pas de b (mais pour certains b, P pourra être vide, ce qui ne contredit pas sa bornitude).

Proposition 2.45 (polyèdre borné) *Soient $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$ et $P := \{x \in \mathbb{R}^n : Ax \leqslant b\}$. Alors les propriétés suivantes sont équivalentes :*

(i) P est borné,
(ii) tout vecteur $d \in \mathbb{R}^n$ vérifiant $Ad \leqslant 0$ est nul,
(iii) $A^\mathsf{T}(\mathbb{R}^m_+) = \mathbb{R}^n$.

DÉMONSTRATION. [$(i) \Leftrightarrow (ii)$] D'après la proposition 2.8, P est borné si, et seulement si, $P^\infty = \{0\}$. L'équivalence se déduit alors du fait que $P^\infty = \{d : Ad \leqslant 0\}$.

[$(ii) \Leftrightarrow (iii)$] $(ii) \Leftrightarrow \{d : Ad \leqslant 0\} = \{0\} \Leftrightarrow \mathbb{R}^n = \{d : Ad \leqslant 0\}^+ = A^\mathsf{T}(\mathbb{R}^m_-)$ (lemme de Farkas [proposition 2.40], $(\mathbb{R}^m_-)^+ = \mathbb{R}^m_-$ [point 1 de l'exercice 2.32] et $A^\mathsf{T}(\mathbb{R}^m_-)$ fermé [(2.23)]) $\Leftrightarrow (iii)$. □

Lorsqu'on considère le système linéaire $Ax = b$, avec $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ et $b \in \mathbb{R}^n$, il est naturel de se demander si celui-ci a une solution x unique. On sait qu'il en sera ainsi, quel que soit $b \in \mathbb{R}^n$, si, et seulement si, A est inversible. On cherche ici des conditions similaires pour que le système d'inégalités affines $Ax \leqslant b$ ait une unique solution x, autrement dit, pour que le polyèdre convexe P défini par (2.18) soit un singleton. Pour ce cas, une condition nécessaire et suffisante ne peut s'exprimer qu'en terme de la matrice A, car si b devient « grand », le polyèdre P est « grand » aussi. Pour pouvoir utiliser les conditions nécessaires et suffisantes du résultat suivant, il faut aussi connaître un point du polyèdre convexe.

Proposition 2.46 (polyèdre singleton) *Soient $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$, $x \in \mathbb{R}^n$ vérifiant $Ax \leqslant b$, $I := \{i \in [1:m] : (Ax-b)_i = 0\}$, $m_I := |I|$ et A_I la sous-matrice de A formée de ses lignes avec indices dans I. Alors les propriétés suivantes sont équivalentes :*

(i) x est l'unique solution de $Ax \leqslant b$,
(ii) tout vecteur $d \in \mathbb{R}^n$ vérifiant $A_I d \leqslant 0$ est nul,
(iii) $A_I^\mathsf{T}(\mathbb{R}^{m_I}_+) = \mathbb{R}^n$.

DÉMONSTRATION. [$(i) \Rightarrow (ii)$] Avec un vecteur d vérifiant les conditions données, on peut trouver $t > 0$ tel que $x' = x + td$ vérifie $Ax' \leqslant b$. En effet, si $(Ax - b)_i < 0$, on a $(Ax')_i = (Ax)_i + t(Ad)_i \leqslant b_i$ si $t > 0$ est assez petit car $(Ax)_i < b_i$ (et il y a un nombre fini de tels indices i) ; si $(Ax-b)_i = 0$, on a $(Ax')_i = (Ax)_i + t(Ad)_i = b_i + t(Ad)_i \leqslant b_i$, car $(Ad)_i \leqslant 0$ par hypothèse. L'unicité de x implique que $x' = x$, donc $d = 0$.

[$(ii) \Rightarrow (i)$] Soit x' tel que $Ax' \leqslant b$. On pose $d := x' - x$. Si $(Ax - b)_i = 0$, on a $(Ad)_i = (Ax')_i - (Ax)_i = (Ax')_i - b_i \leqslant 0$. Par (ii), $d = 0$ et donc $x' = x$.

[$(ii) \Leftrightarrow (iii)$] Voir la démonstration de l'équivalence $(ii) \Leftrightarrow (iii)$ de la proposition 2.45. □

La condition (ii) (resp. (iii)) de la proposition 2.46 est plus forte (moins souvent vérifiée) que la condition (ii) (resp. (iii)) de la proposition 2.45, ce qui est consistant avec le fait qu'un singleton est borné !

2.5.7 Cône tangent ⊖

Soit $\mathbb{E}$ est un espace vectoriel de dimension finie et C est un convexe non vide de $\mathbb{E}$, que l'on ne suppose pas nécessairement fermé.

Définitions 2.47 On dit que $d \in \mathbb{E}$ est une *direction admissible* de C en $x \in \mathbb{E}$ si $x + td \in C$ pour tout $t > 0$ petit. L'ensemble des directions directions admissibles forme un cône, noté

$$\mathrm{T}_x^a C := \{d \in \mathbb{E} : x + td \in C \text{ pour tout } t > 0 \text{ petit}\},$$

que l'on appelle le *cône des directions admissibles*. □

La conicité de $\mathrm{T}_x^a C$ ne fait aucun doute. Par ailleurs, la définition montre que

$$x \notin \overline{C} \quad \Longrightarrow \quad \mathrm{T}_x^a C = \varnothing. \tag{2.40}$$

Enfin, par la convexité de C, on voit que

$$\begin{aligned} x \in C \quad \Longrightarrow \quad \mathrm{T}_x^a C &= \{d \in \mathbb{E} : x + td \in C \text{ pour un } t > 0\}, && (2.41)\\ &= \bigcup_{t>0} \frac{C - x}{t}, && (2.42)\\ &= \mathbb{R}_{++}(C - x), && (2.43)\\ &= \mathbb{R}_{+}(C - x). && (2.44) \end{aligned}$$

Le cas où $x \in \overline{C} \setminus C$ est moins aisé à décrire, si bien que certains auteurs préfèrent supposer d'emblée que C est fermé [295]. On notera que $\mathrm{T}_x^a C$ n'est pas nécessairement fermé, même si C est fermé et $x \in C$; ainsi pour le disque $C := \{x \in \mathbb{R}^2 : x_1^2 + (x_2-1)^2 \leqslant 1\}$ et le point $x = 0$ puisque l'on a $\mathrm{T}_x^a C = \{x \in \mathbb{R}^2 : x_2 > 0\} \cup \{0\}$. La définition suivante a donc bien un sens.

Définition 2.48 On appelle *cône tangent* à C en $x \in \mathbb{E}$ l'adhérence de $\mathrm{T}_x^a C$. On le note

$$\mathrm{T}_x C := \overline{\mathrm{T}_x^a C}.$$ □

On déduit de (2.40), (2.43) et (2.44) que

$$\begin{aligned} x \notin \overline{C} \quad &\Longrightarrow \quad \mathrm{T}_x C = \varnothing,\\ x \in C \quad &\Longrightarrow \quad \mathrm{T}_x C = \overline{\mathbb{R}_{++}(C - x)} = \overline{\mathbb{R}_{+}(C - x)}. \end{aligned} \tag{2.45}$$

Le cas où $x \in \overline{C} \setminus C$ ne posera pas de difficulté d'expression du cône tangent, grâce aux formulations en termes de suites données dans la proposition suivante.

Proposition 2.49 (autres expressions du cône tangent) *Si C est une partie convexe d'un espace vectoriel de dimension finie $\mathbb{E}$ et $x \in \overline{C}$, alors*

$$\begin{aligned} \mathrm{T}_x C &= \left\{ d \in \mathbb{E} : \exists \{x_k\} \subseteq C,\ \exists \{t_k\} \downarrow 0 \text{ telles que } \frac{x_k - x}{t_k} \to d \right\}\\ &= \left\{ d \in \mathbb{E} : \exists \{x_k\} \subseteq C^{\ominus},\ \exists \{t_k\} \downarrow 0 \text{ telles que } \frac{x_k - x}{t_k} \to d \right\}. \end{aligned}$$

Démonstration. Désignons par $\mathrm{T}'_x C$ la première nouvelle expression du cône tangent et par $\mathrm{T}''_x C$ la seconde.

[$\mathrm{T}_x C \subseteq \mathrm{T}'_x C$] Soit $d \in \mathrm{T}_x C$. Par la définition 2.48, il existe une suite $\{d_k\} \subseteq \mathrm{T}_x^a C$ telle que $d_k \to d$. Par conséquent, pour tout k, on peut trouver un $t_k > 0$ tel que

$x_k := x + t_k d_k \in C$. Comme les t_k peuvent être pris arbitrairement petits, on peut s'arranger pour que $t_k \to 0$. Alors $(x_k - x)/t_k = d_k \to d$ montre que $d \in \mathrm{T}'_x\, C$.

$[\mathrm{T}'_x\, C \subseteq \mathrm{T}''_x\, C]$ Soit $d \in \mathrm{T}'_x\, C$, si bien qu'il existe des suites $\{x_k\} \subseteq C$ et $\{t_k\} \subseteq \mathbb{R}_{++}$ telles que $t_k \to 0$ et $(x_k - x)/t_k \to d$. Soit $\check{x} \in C^{\ominus}$ qui est non vide (point 1 de la proposition 2.15). On peut supposer que $t_k \leqslant 1$. Alors $x'_k = (1 - t_k^2)x_k + t_k^2 \check{x} \in C^{\ominus}$ par le lemme 2.13. Comme $(x'_k - x)/t_k = (1 - t_k^2)(x_k - x)/t_k + t_k(\check{x} - x) \to d$, on a montré que $d \in \mathrm{T}''_x\, C$ comme limite d'éléments de $\mathrm{T}^a_x C$.

$[\mathrm{T}''_x\, C \subseteq \mathrm{T}_x\, C]$ Soit $d \in \mathrm{T}''_x\, C$, si bien qu'il existe des suites $\{x_k\} \subseteq C^{\ominus}$ et $\{t_k\} \subseteq \mathbb{R}_{++}$ telles que $t_k \to 0$ et $d_k := (x_k - x)/t_k \to d$. Par le lemme 2.13, $x + td_k = (1 - (t/t_k))x + (t/t_k)x_k \in C^{\ominus} \subseteq C$ pour tout $t \in]0, t_k]$, si bien que $d_k \in \mathrm{T}^a_x C$. Donc $d \in \mathrm{T}_x\, C$. □

Comme C et $\overline{C}$ ont les mêmes intérieurs relatifs (point 3 de l'exercice 2.11), on déduit de la seconde expression du cône tangent dans la proprosition précédente que, quel que soit $x \in \mathbb{E}$:

$$\boxed{\mathrm{T}_x\, \overline{C} = \mathrm{T}_x\, C.} \tag{2.46}$$

Si $x \notin \overline{C}$ les deux cônes ci-dessus sont vides.

La démonstration de la proposition suivante est proposée à l'exercice 2.31.

Proposition 2.50 (propriétés des cônes $\mathrm{T}^a_x C$ et $\mathrm{T}_x\, C$) *Si C est une partie convexe d'un espace vectoriel de dimension finie $\mathbb{E}$ et $x \in C$, alors*

1) $\mathrm{T}^a_x C$ *est un cône convexe pointé et* $\mathrm{T}_x\, C$ *est un cône convexe fermé pointé,*
2) $\mathrm{aff}(\mathrm{T}_x\, C) = \mathrm{aff}(\mathrm{T}^a_x C) = (\mathrm{aff}\, C) - x$,
3) $(\mathrm{T}_x\, C)^{\ominus} = (\mathrm{T}^a_x C)^{\ominus} = R_{++}(C^{\ominus} - x)$,
4) $\mathrm{T}_x\, C = (\mathrm{N}_x C)^-$ *et* $\mathrm{N}_x C = (\mathrm{T}_x\, C)^-$.

Proposition 2.51 (calcul de cône tangent) *Soient $\mathbb{E}_1$ et $\mathbb{E}_2$ des espaces vectoriels.*

1) *Si $C_1 \subseteq \mathbb{E}_1$ et $C_2 \subseteq \mathbb{E}_2$ sont deux convexes, alors*

$$\mathrm{T}_{(x_1,x_2)}(C_1 \times C_2) = \mathrm{T}_{x_1}\, C_1 \times \mathrm{T}_{x_2}\, C_2.$$

2) *Si $\{C_i\}_{i \in I}$ est une famille de parties convexes fermées de $\mathbb{E}$ et $x \in \cap_{i \in I} C_i$, alors*

$$\mathrm{T}^a_x(\cap_{i \in I} C_i) \subseteq \cap_{i \in I}(\mathrm{T}^a_x C_i), \text{ avec égalité si } I \text{ est fini,}$$
$$\mathrm{T}_x(\cap_{i \in I} C_i) \subseteq \cap_{i \in I}(\mathrm{T}_x\, C_i), \text{ avec égalité si } I \text{ est fini et si } \cap_{i \in I}\, C_i^{\ominus} \neq \varnothing.$$

Démonstration. 1) On a successivement

$$\begin{aligned}
\mathrm{T}_{(x_1,x_2)}(C_1\times C_2) &= \mathrm{adh}(\mathbb{R}_+(C_1\times C_2-(x_1,x_2))\\
&= \mathrm{adh}(\mathbb{R}_+((C_1-x_1)\times(C_2-x_2)))\\
&= \mathrm{adh}(\mathbb{R}_+(C_1-x_1)\times\mathbb{R}_+(C_2-x_2)) \qquad (2.47)\\
&= \mathrm{adh}(\mathbb{R}_+(C_1-x_1))\times\mathrm{adh}(\mathbb{R}_+(C_2-x_2)) \qquad (2.48)\\
&= \mathrm{T}_{x_1}C_1\times\mathrm{T}_{x_2}C_2.
\end{aligned}$$

L'inclusion $\subseteq$ en (2.47) ne pose pas de difficulté et l'inclusion réciproque repose sur l'identité

$$\Big(t_1(x_1'-x_1),t_2(x_2'-x_2)\Big)=t_2\Big((1-t_1/t_2)x_1+(t_1/t_2)x_1'-x_1,x_2'-x_2\Big),$$

qui permet de conclure lorsque $0\leqslant t_1\leqslant t_2$ (non restrictif) et les x_i' sont arbitraires dans les C_i. Pour (2.48), on utilise le fait que $\mathrm{adh}(P_1\times P_2)=(\mathrm{adh}\,P_1)\times(\mathrm{adh}\,P_2)$, quels que soient les ensembles $P_i\subseteq\mathbb{E}_i$.

2) On a $\mathrm{T}^a_x(\cap_{i\in I}C_i)=\mathbb{R}_+((\cap_{i\in I}C_i)-x)=\mathbb{R}_+(\cap_{i\in I}(C_i-x))\subseteq\cap_{i\in I}(\mathbb{R}_+(C_i-x))$ $=\cap_{i\in I}(\mathrm{T}^a_xC_i)$.

Si $I=[1:m]$ est fini, la dernière inclusion devient une égalité. En effet, si un point $y\in\cap_i(\mathbb{R}_+(C_i-x))$, il peut s'écrire $y=t_i(x_i-x)$ avec $t_i\geqslant 0$ et $x_i\in C_i$, quel que soit $i\in[1:m]$. On peut supposer que $t_m=\max_i t_i$. Si $t_m=0$, alors $y=0$ qui est clairement dans $\mathbb{R}_+((\cap_{i\in I}C_i)-x)$. Si $t_m>0$, on introduit $\bar x:=x+y/t_m$. On a $\bar x=x+(t_i/t_m)(x_i-x)=(1-t_i/t_m)x+(t_i/t_m)x_i\in C_i$, par convexité de C_i. Donc $\bar x\in\cap_iC_i$. Alors $y=t_m(\bar x-x)$ est dans $\mathbb{R}_+((\cap_{i\in I}C_i)-x)$.

La seconde inclusion s'obtient en prenant l'adhérence des deux membres de la première inclusion, car $\mathrm{adh}(\cap_iP_i)\subseteq\cap_i(\mathrm{adh}\,P_i)$.

Si $I=[1:m]$ est fini, la première identité du point 2 nous apprend que

$$\mathrm{T}^a_x(\cap_{i\in I}C_i)=\cap_{i\in I}(\mathrm{T}^a_xC_i)\qquad\text{et}\qquad\mathrm{T}^a_x(\cap_{i\in I}C_i^{\ominus})=\cap_{i\in I}(\mathrm{T}^a_x(C_i^{\ominus})).\qquad(2.49)$$

Maintenant, si $\cap_{i\in I}C_i^{\ominus}\neq\varnothing$, on peut y trouver un point x_0. Clairement, $x_0-x\in\mathrm{T}^a_x(\cap_{i\in I}C_i^{\ominus})$, si bien que $\cap_{i\in I}(\mathrm{T}^a_x(C_i^{\ominus}))\neq\varnothing$ par $(2.49)_2$.

En prenant l'adhérence des deux membres de cette identité, on obtient $\mathrm{T}_x(\cap_{i\in I}C_i)=\cap_{i\in I}(\mathrm{T}_x\,C_i)$, grâce au point 2 de la proposition 2.16 et à l'hypothèse de qualification $\cap_{i\in I}C_i^{\ominus}\neq\varnothing$. □

Notes

Hermann Minkowski (1864-1909) fut l'un des premiers à avoir étudié systématiquement les ensembles convexes [388 ; 1896]. Au départ, ce fut dans le but de résoudre des problèmes en théorie des nombres, alors que notre présentation est davantage de nature qualitative, orientée vers l'analyse. On lui doit par exemple la proposition 2.22 sur la « résolution » d'un polyèdre convexe.

L'*élimination de Fourier* [204 ; 1827] a été redécouverte plus d'un siècle plus tard par Motzkin [406 ; 1936]. Celle-ci a été reconsidérée à maintes reprises en vue de son amélioration [353, 352, 302, 316, 100], mais l'obtention d'une description explicite du projeté d'un polytope est un problème NP-ardu [518 ; 2008].

La proposition 2.17 a été étendue à des cas beaucoup plus généraux. Ainsi, on peut montrer que l'image par une application linéaire d'un ensemble de la forme $c^{-1}(0)$, où $c : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ a ses composantes convexes et « *als* » (*asymptotically level stable*), est fermée [26 ; corollaire 3.7.1]. Cette classe de fonctions c_i inclut celles qui sont convexes et quadratiques par morceaux (leur domaine est une union finie de polyèdres convexes, sur chacun desquels la fonction est quadratique [26 ; proposition 3.3.3]).

Le lemme de Farkas a été énoncé la première fois dans [187 ; 1902] .

Exercices

2.1. *Ensembles convexes.* On note $\mathbb{E}$ un espace vectoriel ou euclidien au besoin.

1) Soient Λ un intervalle non vide de $\mathbb{R}_+$ et C un convexe de $\mathbb{E}$. Alors $\Lambda C := \{\lambda x : \lambda \in \Lambda,\ x \in C\}$ est convexe.
2) Si $C \subseteq \mathbb{E}$ est un convexe, alors $C + C = 2C$.
3) Si $K \subseteq \mathbb{E}$ est un cône, alors K est convexe si, et seulement si, $K + K = K$.
4) *Diagramme de Voronoï.* Soient p un point de $\mathbb{E}$ et Q une partie arbitraire et non vide de $\mathbb{E}$. On note d_P la distance à un ensemble P de $\mathbb{E}$. Alors $V_{p,Q} := \{x \in \mathbb{E} : \mathrm{d}_{\{p\}}(x) \leqslant \mathrm{d}_Q(x)\}$ est convexe.

2.2. *Calcul d'enveloppe affine.* Soient P et Q des parties d'un espace vectoriel $\mathbb{E}$ et C une partie convexe.

1) $P \subseteq Q \implies \operatorname{aff} P \subseteq \operatorname{aff} Q$.
2) $\operatorname{aff}(P \cap Q) \subseteq (\operatorname{aff} P) \cap (\operatorname{aff} Q)$.
3) $\operatorname{aff}(P + Q) = (\operatorname{aff} P) + (\operatorname{aff} Q)$.
4) $\operatorname{aff} \overline{P} = \operatorname{aff} P$.
5) $0 \in \overline{P} \implies \operatorname{aff} P = \operatorname{aff}(\mathbb{R}_{++}P) = \operatorname{aff}(\mathbb{R}_+P) = \operatorname{vect} P$.
6) $\operatorname{aff}(\operatorname{cone} P) = \operatorname{vect} P$.
7) C convexe $\implies \operatorname{aff} C = \{tx + (1-t)y : t \in \mathbb{R},\ x, y \in C\}$ (comparez avec (2.2)).

Si P et Q sont des parties des espaces vectoriels $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ respectivement, alors

8) $\operatorname{aff}(P \times Q) = (\operatorname{aff} P) \times (\operatorname{aff} Q)$.

2.3. *Calcul d'enveloppe convexe.* Démontrez la proposition 2.5.

2.4. *Enveloppe convexe d'un nombre fini de convexes.* Si $P = C_1 \cup \cdots \cup C_m$, où les C_i sont convexes, alors $\operatorname{co} P = \{\sum_{i=1}^m t_i x_i : (t_1, \ldots, t_m) \in \Delta_m,\ x_i \in C_i \text{ pour tout } i\}$ (comparez avec la proposition 2.2).

2.5. *Exemples d'enveloppes convexes.*

1) Soient $X = \{x_1, \ldots, x_n\}$ une partie d'un espace vectoriel $\mathbb{E}$ formée de n points et $k \in [1 : n]$. Alors $\operatorname{co}\{x_{i_1} + \cdots + x_{i_k} : 1 \leqslant i_1 \leqslant \cdots \leqslant i_k \leqslant n\} = k\,(\operatorname{co} X)$.
2) Soient $X = \{x_1, \ldots, x_n\}$ une partie d'un espace vectoriel $\mathbb{E}$ formée de n points et $k \in [1 : n]$. Alors $\operatorname{co}\{x_{i_1} + \cdots + x_{i_k} : 1 \leqslant i_1 < \cdots < i_k \leqslant n\} = \{\sum_{i=1}^n t_i x_i : t_i \in [0, 1] \text{ pour tout } i \text{ et } \sum_{i=1}^n t_i = k\}$.

2.6. *Enveloppe conique d'une somme.* Soient P et Q deux ensembles d'un même espace vectoriel. Montrez que

$$\operatorname{cone}(P + Q) \subseteq \operatorname{cone} P + \operatorname{cone} Q \subseteq \operatorname{cone}(\mathbb{R}_+P + \mathbb{R}_+Q).$$

En déduire que si P et Q sont des cônes convexes, alors $P + Q$ est un cône convexe.

2.7. *Enveloppe conique.* Démontrez la proposition 2.6.

2.8. *Calcul de cône asymptotique.* Démontrez la proposition 2.9. De plus, donnez un exemple dans lequel (2.6) n'a pas lieu parce que l'intersection des C_i est vide. Donnez également un exemple dans lequel (2.7) n'a pas lieu parce que $\mathcal{N}(A) \cap C^\infty$ n'est pas un sous-espace vectoriel.

2.9. *Face exposée d'un convexe.* Soit C un convexe d'un espace euclidien $\mathbb{E}$. On dit qu'une partie E de C est *exposée* s'il existe $\xi \in \mathbb{E}$ tel que $E = \arg\min\{\langle \xi, x\rangle : x \in C\}$. Montrez que toute partie exposée d'un convexe est une face, mais que la réciproque n'est pas nécessairement vraie (elle est vraie dans le cas d'un polyèdre convexe, voir l'exercice 2.18).

2.10. *Autour du lemme 2.13 d'intériorité relative.* Soit $\mathbb{E}$ un espace vectoriel.

1) Démontrez le corollaire 2.14.
2) Si C_1 et C_2 sont deux convexes de $\mathbb{E}$ tels que $C_1 \cap C_2^\circ \neq \varnothing$, alors $(C_1 \cap \operatorname{aff} C_2)^\circ \cap C_2^\circ \neq \varnothing$.
3) *Ensemble convexe dense.* Si C est un convexe dense de $\mathbb{E}$, alors $C = \mathbb{E}$.

2.11. *Topologie des ensembles convexes.* Soit P une partie d'un espace vectoriel $\mathbb{E}$. On note $F(x)$ la face d'un convexe C engendrée par un point $x \in C$.

1) $\operatorname{aff} P^\circ \subseteq \operatorname{aff} P$, avec égalité si $P^\circ \neq \varnothing$ (c'est le cas si P est convexe).
2) A affine et $C^\circ \subseteq A \subseteq C$ impliquent que $C = A$.
3) $\overline{P^\circ} \subseteq \overline{P}$ et $P^\circ \subseteq (\overline{P})^\circ$, avec des égalités si P est convexe.
4) Si C est convexe, alors C°, C et $\overline{C}$ ont la même enveloppe affine, le même intérieur relatif, la même adhérence et la même frontière relative.
5) Deux convexes ont le même intérieur relatif si, et seulement si, ils ont la même adhérence.
6) Pour tout $x \in C$, $x \in F(x)^\circ$.

2.12. *Propriété topologique des cônes.* Soit K un cône. Alors son adhérence $\overline{K}$ et son intérieur relatif K° sont également des cônes.

2.13. *Conditions de qualification équivalentes.* Si C_1 et C_2 sont deux convexes, alors

$$0 \in (C_1 - C_2)^\circ \qquad \Longleftrightarrow \qquad C_1^\circ \cap C_2^\circ \neq \varnothing.$$

2.14. *Face d'un convexe.* Soient C un convexe et F une face non vide de C.

1) Si F_0 est une face de F, alors F_0 est une face de C.
2) $\operatorname{ext}(F) \subseteq \operatorname{ext}(C)$.
3) Si C est fermé, alors $\operatorname{ext}(F) \neq \varnothing \Leftrightarrow \operatorname{ext}(C) \neq \varnothing$.

2.15. *Points extrêmes des boules unités ℓ_1 et ℓ_∞.* Dans $\mathbb{R}^n$, la boule-unité pour la norme ℓ_1 a $2n$ points extrêmes et la boule-unité pour la norme ℓ_∞ en a 2^n.

2.16. *Théorème de Birkhoff* [52, 337]. On dit qu'une matrice G est *doublement stochastique* si ses éléments sont positifs ($G_{ij} \geqslant 0$ pour tout i et j) et si la somme des éléments de chaque ligne et de chaque colonne vaut 1 ($\sum_i G_{ij} = 1$ pour tout j et $\sum_j G_{ij} = 1$ pour tout i). On note $\mathbb{G}^n$ l'ensemble des matrices d'ordre n doublement stochastiques. Calculez $\operatorname{ext}(\mathbb{G}^n)$.

2.17. *Cônes convexes.* Soit K un cône d'un espace vectoriel $\mathbb{E}$.

1) K est convexe ssi pour tout $\forall x, y \in K$ et $\forall \alpha, \beta \in \mathbb{R}_+$, on a $\alpha x + \beta y \in K$.
2) Si K est convexe, $x \in K^\circ$, $y \in K$, $\alpha > 0$ et $\beta \geqslant 0$, alors $\alpha x + \beta y \in K^\circ$.
3) Si $K = \operatorname{cone}\{x_1, \ldots, x_p\}$, alors $\operatorname{aff} K = \operatorname{vect}\{x_1, \ldots, x_p\}$ et $K^\circ = \{\sum_{i=1}^p \alpha_i x_i : \alpha_i > 0 \text{ pour tout } i\}$.

2.18. *Polyèdre convexe sous représentation duale.* Soit $P := \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = a,\ Bx \leqslant b\}$ un polyèdre convexe de $\mathbb{R}^n$ (on suppose les dimensions consistantes).

1) L'ensemble F est une face de P si, et seulement si, il existe un ensemble d'indices I tel que $F = \{x \in P : (Bx - b)_I = 0\}$.
2) Toute face de P est une partie exposée (on sait que la réciproque est vraie pour un convexe quelconque : toute partie exposée d'un convexe est une face, voir l'exercice 2.9).
3) Le point $x \in P$ est un sommet de P si, et seulement si, la matrice $(A^\mathsf{T} \;\; B_I^\mathsf{T})^\mathsf{T}$ formée de la matrice A et des lignes de B d'indices dans $I := \{i : (Bx-b)_i = 0\}$ est injective.
4) $P^\infty = \{d \in \mathbb{R}^n : Ad = 0,\ Bd \leqslant 0\}$.
5) Si I est l'ensemble des indices i tels que $\{x \in P : B_i x < b_i\} \neq \varnothing$ et I^c son complémentaire, alors $\operatorname{aff} P = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = a,\ B_{I^c} x = b_{I^c}\}$ et $P^\oplus = \{x \in P : B_I x < b_I\}$ ($= P$ si $I = \varnothing$).
6) La somme de deux polyèdres convexes est un polyèdre convexe (donnez la représentation duale de cette somme).
7) L'image réciproque d'un polyèdre convexe par une application linéaire est un polyèdre convexe.
8) Le produit cartésien de deux polyèdres convexes est un polyèdre convexe.

2.19. *Polyèdre convexe sous représentation primale.* Soit P un polyèdre convexe d'un espace vectoriel $\mathbb{E}$, donné sous la forme $P = \operatorname{co}\{x_1, \dots, x_p\} + \operatorname{cone}\{y_1, \dots, y_q\}$, avec des x_i et des $y_j \in \mathbb{E}$.

1) $\operatorname{ext}(P) \subseteq \{x_1, \dots, x_p\}$ sans que l'on ait nécessairement l'égalité.
2) $P^\infty = \operatorname{cone}\{y_1, \dots, y_q\}$.
3) $P^\oplus = \{\sum_i \alpha_i x_i + \sum_j \beta_j y_j : \sum_i \alpha_i = 1,\ \alpha > 0,\ \beta > 0\}$.
4) $\operatorname{cone} P = \operatorname{cone}\{x_1, \dots, x_p, y_1, \dots, y_q\}$, qui est donc un cône polyédrique.
5) La somme de deux polyèdres convexes est un polyèdre convexe (donnez la représentation primale de cette somme).
6) L'image d'un polyèdre convexe par une application linéaire est un polyèdre convexe.

2.20. *Projeté d'un polyèdre convexe.* On considère le polyèdre convexe $P := \{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^{n_1} \times \mathbb{R}^{n_2} : A_1 x_1 + A_2 x_2 \leqslant b\}$, où les matrices A_i sont de type $m \times n_i$ et $b \in \mathbb{R}^m$. Montrez que le projeté de P sur $\mathbb{R}^{n_1}$, qui est l'ensemble $\{x_1 \in \mathbb{R}^{n_1} : \text{il existe un } x_2 \in \mathbb{R}^{n_2} \text{ tel que } (x_1, x_2) \in P\}$, est le polyèdre convexe $P_1 := \{x_1 \in \mathbb{R}^{n_1} : y^\mathsf{T} A_1 x_1 \leqslant y^\mathsf{T} b,$ pour tout $y \in \mathbb{R}^m_+ \cap \mathcal{N}(A_2^\mathsf{T})\}$.

2.21. *Image d'un cône convexe fermé par une application linéaire.* On considère le cône convexe fermé $K := \{x \in \mathbb{R}^3 : x_1^2 + x_2^2 \leqslant x_3^2,\ x_3 \geqslant 0\}$ (voir l'exercice 2.32) et l'application linéaire $A : x \in \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^2 : x \mapsto (x_1, x_2 + x_3)$. Montrez que le cône $\{Ax : x \in K\}$ n'est pas fermé dans $\mathbb{R}^2$.

Conséquence. L'image par une application linéaire d'un cône convexe fermé n'est pas nécessairement fermée.

2.22. *Somme d'un cône convexe fermé et d'un sous-espace vectoriel.* Montrez que la somme d'un cône convexe fermé et d'un sous-espace vectoriel n'est pas nécessairement fermée.

2.23. *Propriétés variationnelles de la projection.* Soit $\mathbb{E}$ un espace vectoriel euclidien (produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle$ et norme associée $\| \cdot \|$). Soient C une partie convexe fermée non vide de $\mathbb{E}$ et x un point de $\mathbb{E}$. On note $\bar{x}$ le projeté de x sur C. Montrez que

$$\forall\, y \in C : \quad \langle y - x, \bar{x} - x \rangle \geqslant 0 \quad \text{et} \quad \|y - \bar{x}\| \leqslant \|y - x\|.$$

Montrez par un exemple qu'aucune de ces propriétés ne caractérise le projeté $\bar{x}$.

2.24. *Projection sur un cône convexe fermé.* polyedre convexe@polyèdre convexe!projection d'un – Soit $\mathbb{E}$ un espace vectoriel euclidien (produit scalaire $\langle\cdot,\cdot\rangle$). Soient K un cône convexe fermé non vide de $\mathbb{E}$ et $x\in\mathbb{E}$. Montrez que $\bar{x}\in K$ est le projeté de x sur K si, et seulement si,

$$\langle \bar{x}-x,\bar{x}\rangle = 0 \qquad \text{et} \qquad \forall y\in K: \quad \langle \bar{x}-x,y\rangle \geqslant 0. \tag{2.50}$$

2.25. *Décomposition de Moreau* [403]. Soient $\mathbb{E}$ un espace euclidien (produit scalaire $\langle\cdot,\cdot\rangle$), K un cône convexe fermé de $\mathbb{E}$ et K^- son cône dual négatif. On note P_K et P_{K^-} les projecteurs orthogonaux sur K et K^- respectivement. Montrez que, pour x, y et z donnés dans $\mathbb{E}$, les propriétés suivantes sont équivalentes :

(*i*) $z = x+y$, $x\in K$, $y\in K^-$ et $\langle x,y\rangle = 0$,
(*ii*) $x = \mathrm{P}_K(z)$ et $y = \mathrm{P}_{K^-}(z)$.

En déduire que

$$\mathrm{P}_K(z) = 0 \qquad \Longleftrightarrow \qquad z\in K^-. \tag{2.51}$$

La décomposition de z en $x+y$ comme en (*i*) est appelée la *décomposition de Moreau*.

2.26. *Projection sur $\mathcal{S}_+^n$.* Soit $A = V\Lambda V^{\mathsf{T}}$ la factorisation spectrale d'une matrice $A\in\mathcal{S}^n$ ($\Lambda = \mathrm{Diag}(\lambda_1,\dots,\lambda_n)$ est la matrice diagonale des valeurs propres λ_i de A). Montrez que le projeté de A sur le cône $\mathcal{S}_+^n$ des matrices semi-définies positives est la matrice $V\Lambda^+V^{\mathsf{T}}$, où $\Lambda^+ = \mathrm{Diag}(\lambda_1^+,\dots,\lambda_n^+)$ et $\lambda_i^+ = \max(0,\lambda_i)$.

2.27. *Projection sur une somme de sous-espaces affines.* Soient A_1 et A_2 deux sous-espaces affines d'un espace euclidien $\mathbb{E}$. Si $\bar{x}$ est le projeté d'un point $x\in\mathbb{E}$ sur A_1+A_2, alors $x-\bar{x}$ est orthogonal aux sous-espaces vectoriels parallèles aux sous-espaces affines.

2.28. *Projection en deux temps.* Soit $\mathbb{E}$ un espace euclidien, $\mathcal{A}$ un sous-espace affine de $\mathbb{E}$ et C un convexe fermé non vide de $\mathbb{E}$ contenu dans $\mathcal{A}$. On note P_C (resp. $\mathrm{P}_{\mathcal{A}}$) le projecteur orthogonal sur C (resp. sur $\mathcal{A}$). Montrez que $\mathrm{P}_C = \mathrm{P}_C\circ\mathrm{P}_{\mathcal{A}}$.

2.29. *L'enveloppe convexe ouverte.* L'enveloppe convexe d'une partie relativement ouverte est relativement ouverte.

2.30. *Minimisation d'une fonction linéaire sur une enveloppe convexe fermée.* Soient $\mathbb{E}$ un espace euclidien, $c\in\mathbb{E}$ et $X\subseteq\mathbb{E}$. Alors

$$\inf_{x\in X}\langle c,x\rangle = \inf_{x\in\overline{\mathrm{co}}\,X}\langle c,x\rangle \tag{2.52}$$

et

$$\overline{\mathrm{co}}\left(\arg\min_{x\in X}\langle c,x\rangle\right) \subseteq \arg\min_{x\in\overline{\mathrm{co}}\,X}\langle c,x\rangle, \tag{2.53}$$

avec égalité en (2.53) si X est compact, mais pas nécessairement autrement.

2.31. *Propriétés des cônes $\mathrm{T}_x^a C$ et $\mathrm{T}_x C$.* Démontrez la proposition 2.50.

2.32. *Exemples de cônes duaux.*

1) $\mathbb{R}^n_+$ (orthant positif de $\mathbb{R}^n$) est autodual pour le produit scalaire euclidien de $\mathbb{R}^n$.
2) Le *cornet* ou *cône du second ordre* ou *cône de Lorentz*

$$\mathbb{R}^{n+1}_\triangledown := \{(x,z)\in\mathbb{R}^n\times\mathbb{R} : \|x\|_2 \leqslant z\}$$

est autodual pour le produit scalaire euclidien de $\mathbb{R}^{n+1}$.
3) L'ensemble des matrices d'ordre n symétriques semi-définies positives

$$\mathcal{S}_+^n := \{A\in\mathcal{S}^n : x^{\mathsf{T}}Ax \geqslant 0 \text{ pour tout } x\in\mathbb{R}^n\}$$

est autodual pour le produit scalaire $\langle A,B\rangle = \mathrm{tr}\,AB$ de $\mathcal{S}^n$.

4) Le *simplexe ordonné* de $\mathbb{R}^n$, défini par
$$\mathbb{R}^n_{\leqslant} := \{x \in \mathbb{R}^n : x_1 \leqslant \cdots \leqslant x_n\},$$
a pour cône dual
$$(\mathbb{R}^n_{\leqslant})^+ = \{d \in \mathbb{R}^n : \textstyle\sum_{i=1}^j d_i \leqslant 0, \text{ pour } j = 1, \ldots, n-1, \text{ et } \sum_{i=1}^n d_i = 0\}.$$

5) L'ensemble des matrices *symétriques copositives* $\mathcal{C}^n$ et l'ensemble des matrices *complètement positives* $\mathcal{C}^{n+}$, définis par
$$\mathcal{C}^n := \{A \in \mathcal{S}^n : x^\mathsf{T} A x \geqslant 0 \text{ pour tout } x \geqslant 0\},$$
$$\mathcal{C}^{n+} := \{A \in \mathcal{S}^n : A = BB^\mathsf{T},\ B \geqslant 0\},$$
où $B \geqslant 0$ signifie que B est *positive* (c'est-à-dire que tous ses éléments B_{ij} sont positifs), sont des cônes convexes fermés non vides, duaux l'un de l'autre, et on a
$$\mathcal{C}^{n+} \subseteq \mathcal{S}^n_+ \subseteq \mathcal{C}^n.$$

2.33. *Dual d'une somme et d'une intersection de cônes.* Démontrez le corollaire 2.39.

2.34. *Intérieur et intérieur relatif du cône dual.* Soient $\mathbb{E}$ un espace euclidien (produit scalaire et norme associés notés $\langle \cdot, \cdot \rangle$ et $\| \cdot \|$ respectivement), $P \subseteq \mathbb{E}$ et $\mathrm{P}_{(\mathrm{aff}(P^+))}$ le projecteur orthogonal sur le sous-espace vectoriel $\mathrm{aff}(P^+)$, qui est l'enveloppe affine du cône dual P^+ de P. Montrez que
$$d \in \mathrm{int}(P^+) \iff \exists\, \varepsilon > 0,\ \forall\, x \in P, \text{ on a } \langle d, x \rangle \geqslant \varepsilon \|x\|. \tag{2.54}$$
$$d \in \mathrm{intr}(P^+) \iff \exists\, \varepsilon > 0,\ \forall\, x \in P, \text{ on a } \langle d, x \rangle \geqslant \varepsilon \|\mathrm{P}_{(\mathrm{aff}\, P^+)}\, x\|. \tag{2.55}$$

2.35. *Autour du lemme de Farkas.*

1) *Ajout d'un cône convexe à l'image.* Soient $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ deux espaces euclidiens, $A : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ une application linéaire, K un cône convexe non vide de $\mathbb{E}$ et L un cône convexe non vide de $\mathbb{F}$. Alors $\{y \in L^+ : A^* y \in K^+\}^+ = \overline{A(K) + L}$.
2) *Effet d'une translation.* Quel que soit x_0, on a $Ax_0 + \{y : A^\mathsf{T} y \geqslant 0\}^+ = \{Ax : x \geqslant x_0\}$.

2.36. *Théorèmes de l'alternative.* Voir aussi l'exercice 15.9.

1) *Théorème de l'alternative de Farkas* [187 ; 1902]. Soient $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ et $b \in \mathbb{R}^m$. Alors, des deux affirmations suivantes, une et une seule est vraie :
   (*i*) $\exists\, x \in \mathbb{R}^n_+ : Ax = b$,
   (*ii*) $\exists\, y \in \mathbb{R}^m : A^\mathsf{T} y \geqslant 0$ et $b^\mathsf{T} y < 0$.
2) *Théorème de l'alternative de Motzkin homogène* (1936). Soient $A \in \mathbb{R}^{m_A \times n}$, $B \in \mathbb{R}^{m_B \times n}$ et $C \in \mathbb{R}^{m_C \times n}$ des matrices ayant un même nombre de colonnes. Alors, des deux affirmations suivantes, une et une seule est vraie :
   (*i*) $\exists\, x \in \mathbb{R}^n : Ax = 0$, $Bx \leqslant 0$ et $Cx < 0$,
   (*ii*) $\exists\, (\alpha, \beta, \gamma) \in \mathbb{R}^{m_A} \times \mathbb{R}^{m_B}_+ \times \mathbb{R}^{m_C}_+ : A^\mathsf{T}\alpha + B^\mathsf{T}\beta + C^\mathsf{T}\gamma = 0$ et $\gamma \neq 0$.

   Remarque. Cette alternative peut s'utiliser sans les matrices A et B (on obtient alors l'*alternative de Gordan* [251 ; 1873]), mais pas sans la matrice C (dans ce dernier cas, (*i*) et (*ii*) sont tous les deux trivialement vrais). Elle permet d'avoir des conditions duales exprimant la *compatibilité d'égalités et d'inégalités linéaires* (strictes et non strictes) homogènes.
3) *Théorème de l'alternative de Motzkin non-homogène* [274 ; théorème 3.17]. Soient $A \in \mathbb{R}^{m_A \times n}$, $B \in \mathbb{R}^{m_B \times n}$ et $C \in \mathbb{R}^{m_C \times n}$ des matrices ayant un même nombre de colonnes et $a \in \mathbb{R}^{m_A}$, $b \in \mathbb{R}^{m_B}$ et $c \in \mathbb{R}^{m_C}$ des vecteurs. Alors, des deux affirmations suivantes, une et une seule est vraie :

(*i*) $\exists\, x \in \mathbb{R}^n : Ax = a$, $Bx \leqslant b$ et $Cx < c$,
(*ii*) $\exists\, (\alpha, \beta, \gamma, \gamma_0) \in \mathbb{R}^{m_A} \times \mathbb{R}_+^{m_B} \times \mathbb{R}_+^{m_C} \times \mathbb{R}_+ : A^\mathsf{T}\alpha + B^\mathsf{T}\beta + C^\mathsf{T}\gamma = 0$, $a^\mathsf{T}\alpha + b^\mathsf{T}\beta + c^\mathsf{T}\gamma + \gamma_0 = 0$ et $(\gamma_0, \gamma) \neq 0$.

4) *Théorème de l'alternative de Ville* [534 ; 1938]. Soit $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$. Alors, des deux affirmations suivantes, une et une seule est vraie :
(*i*) $\exists\, x \in \mathbb{R}_+^n \setminus \{0\} : Ax \leqslant 0$,
(*ii*) $\exists\, y \in \mathbb{R}_+^m : A^\mathsf{T} y > 0$.

5) *Variations.*
a) Il existe un $x \in \mathbb{R}^n$ tel que $Ax \leqslant b$ si, et seulement si, $b^\mathsf{T} y \geqslant 0$ pour tout $y \in \mathbb{R}_+^m$ tel que $A^\mathsf{T} y = 0$.
b) Il existe un $x \in \mathbb{R}^n$ tel que $a \leqslant Ax \leqslant b$ si, et seulement si, $a^\mathsf{T} y \leqslant b^\mathsf{T} z$ pour tout $(y, z) \in \mathbb{R}_+^m \times \mathbb{R}_+^m$ tel que $A^\mathsf{T} y = A^\mathsf{T} z$.

2.37. *Sous-système d'inégalités affines incompatibles.* Soit A une matrice de type $m \times n$. Si le système d'inégalités affines $Ax \leqslant b$ n'a pas de solution, alors il existe un sous-ensemble d'indices $I \subseteq \{1, \dots, m\}$ tel que $|I| \leqslant n + 1$ et $A_I x \leqslant b_I$ n'a pas non plus de solution (on a noté A_I la sous-matrice de A formée des lignes d'indices dans I, de même pour b_I).

2.38. *Calcul de cônes normaux.* Démontrez la proposition 2.29.

2.39. *Semi-continuité supérieure du cône normal unitaire.* Démontrez la proposition 2.30.

2.40. *Cône tangent à un polyèdre convexe.* Soient $P := \{x \in \mathbb{R}^n : Ax \leqslant b\}$ un polyèdre convexe de $\mathbb{R}^n$ (A est de type $m \times n$, $b \in \mathbb{R}^m$ et $\mathbb{R}^n$ est muni du produit scalaire euclidien) et $x \in P$. Alors le cône tangent et le cône des directions admissibles sont identiques :

$$\mathrm{T}_x P = \mathrm{T}_x^a P.$$

Par ailleurs, si on note $I := \{i \in [1:m] : (Ax - b)_i = 0\}$, on a

$$\mathrm{T}_x P = \{d \in \mathbb{R}^n : (Ad)_I \leqslant 0\} \qquad \text{et} \qquad \mathrm{N}_x P = \mathrm{cone}\{A_i^\mathsf{T} : i \in I\},$$

où les A_i désignent les lignes de A, ce qui montre en particulier que $\mathrm{T}_x P$ et $\mathrm{N}_x P$ sont des cônes polyédriques.

2.41. *Cônes tangent et normal à $\mathcal{S}_+^n$.* Montrez que les cônes tangent et normal à $\mathcal{S}_+^n$ en $S \in \mathcal{S}_+^n$ s'écrivent

$$\mathrm{T}_S \mathcal{S}_+^n = \{D \in \mathcal{S}^n : v^\mathsf{T} D v \geqslant 0, \text{ pour tout } v \in \mathcal{N}(S)\} \tag{2.56}$$
$$\mathrm{N}_S \mathcal{S}_+^n = \{N \in \mathcal{S}_-^n : \langle S, N\rangle = 0\}. \tag{2.57}$$

3 Fonctions convexes

The fundamental idea to be understood is that the convex functions on $\mathbb{R}^n$ can be identified with certain convex subsets of $\mathbb{R}^{n+1}$ (their epigraphs), while the convex sets in $\mathbb{R}^n$ can be identified with certain convex functions on $\mathbb{R}^n$ (their indicators). These identifications make it easy to pass back and forth between a geometric approach and an analytic approach.

R.T. Rockafellar (1970). Convex Analysis [462].

Moreau and I independently in those days at first, but soon in close exchanges with each other, made the crucial changes in outlook which, I believe, created convex analysis out of convexity. For instance, he and I passed from the basic objects in Fenchel's work, which were pairs consisting of a convex set and a finite convex function on that set, to extended-real-valued functions implicitly having effective domains, for which we moreover introduced set-valued subgradient mappings.

R.T. Rockafellar sur le site Wikimization.

3.1 Définition

Soit $\mathbb{E}$ un espace vectoriel sur $\mathbb{R}$. On note $\overline{\mathbb{R}} := \mathbb{R} \cup \{-\infty, +\infty\}$ la droite achevée. En analyse convexe et en optimisation, il est parfois intéressant de pouvoir considérer des fonctions pouvant prendre des valeurs infinies. En analyse convexe, plutôt que de définir une fonction convexe comme un couple formé d'un ensemble convexe C et d'une fonction f définie sur C ayant une propriété bien particulière (une approche que l'on rencontre encore parfois), il est préférable de dire que cette fonction prend des valeurs infinies en dehors de C. On évite ainsi de devoir décrire C avant de définir f, en particulier lorsque f est construite par une des opérations non triviales que nous verrons dans lesquels il est compliqué de déterminer l'ensemble C. C'est ce à quoi fait allusion la seconde épigraphe de ce chapitre. De même, il peut être utile de représenter un problème d'optimisation avec contrainte $\min\{f(x) : x \in X\}$, où X est une partie de $\mathbb{E}$, par le problème sans contrainte équivalent $\min\{\tilde{f}(x) : x \in \mathbb{E}\}$, où $\tilde{f}$ prend les mêmes valeurs que f sur X et vaut $+\infty$ sur le complémentaire de X.

Cette astuce conduit à un cadre théorique permettant de traiter en même temps les problèmes avec et sans contraintes ; nous l'utiliserons souvent.

On rappelle que le *domaine effectif* (ou simplement *domaine*) d'une fonction $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ est l'ensemble des points où elle ne prend pas la valeur $+\infty$. On le note

$$\operatorname{dom} f := \{x \in \mathbb{E} : f(x) < +\infty\}.$$

On accepte que f prenne la valeur $-\infty$ sur son domaine pour que celui-ci soit convexe lorsque f est convexe (proposition 3.2, ci-dessous), mais nous considérerons le plus souvent des fonctions ne prenant pas la valeur $-\infty$. On rappelle que l'*épigraphe* de f est la partie de l'espace produit $\mathbb{E} \times \mathbb{R}$ qui est au-dessus de son graphe :

$$\operatorname{epi} f := \{(x, \alpha) \in \mathbb{E} \times \mathbb{R} : f(x) \leqslant \alpha\}.$$

Quant à l'*épigraphe stricte*, il est obtenu en prenant l'inégalité stricte ci-dessus. On le note

$$\operatorname{epi}_s f := \{(x, \alpha) \in \mathbb{E} \times \mathbb{R} : f(x) < \alpha\}. \tag{3.1}$$

Comme le montre le point 3 de l'exercice 3.1, cet épigraphe stricte est généralement différent de l'intérieur relatif de l'épigraphe.

Définitions 3.1 On dit qu'une fonction $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ est *convexe* si son épigraphe (ou son épigraphe stricte) est convexe dans $\mathbb{E} \times \mathbb{R}$. On dit que $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ est *concave* si $-f$ est convexe. □

Le fait qu'il soit équivalent de prendre l'épigraphe ou l'épigraphe stricte dans cette définition est le sujet du point 2 de l'exercice 3.1.

Proposition 3.2 (charactérisation de la convexité d'une fonction) *Le domaine d'une fonction convexe est convexe. Une fonction $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ est convexe si, et seulement si, pour tout $x, y \in \operatorname{dom} f$ et tout $t \in]0, 1[$, on a*

$$f\Big((1-t)x + ty\Big) \leqslant (1-t)f(x) + tf(y). \tag{3.2}$$

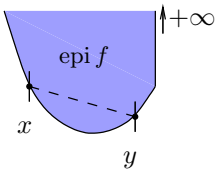
Avant de donner la démonstration de la proposition, observons que le membre de droite de (3.2) n'est pas ambigu, car les coefficients $(1 - t)$ et t sont *strictement* positifs. Donc les produits ne sont pas indéterminés (comme le produit de $-\infty$ par zéro), même si $f(x)$ ou $f(y)$ valent $-\infty$. Par ailleurs, $f(x)$ ou $f(y)$ ne peuvent pas prendre la valeur $+\infty$ (x et $y \in \operatorname{dom} f$) et donc on n'a jamais l'indétermination $\infty - \infty$.

Démonstration. Supposons que f soit convexe. Soient x, $y \in \operatorname{dom} f$, $t \in]0, 1[$ et α, $\beta \in \mathbb{R}$ tels que $\alpha > f(x)$ et $\beta > f(y)$ (de tels α et β existent car x et $y \in \operatorname{dom} f$). Comme (x, α) et (y, β) sont dans l'épigraphe de f, qui est convexe, il en est de même de $(1-t)(x, \alpha) + t(y, \beta) = ((1-t)x + ty, (1-t)\alpha + t\beta)$, ce qui se traduit par $f((1-t)x + ty) \leqslant (1-t)\alpha + t\beta$. Comme $\alpha > f(x)$ et $\beta > f(y)$ sont arbitraires, on obtient (3.2). En particulier, $((1-t)x + ty) \in \operatorname{dom} f$; donc $\operatorname{dom} f$ est convexe.

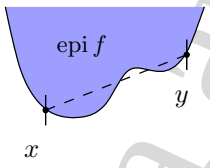
Supposons à présent que $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ vérifie (3.2) pour tout $x, y \in \operatorname{dom} f$ et tout $t \in]0, 1[$. Soient (x, α) et $(y, \beta) \in \operatorname{epi} f$; donc x et $y \in \operatorname{dom} f$. D'après (3.2),

on a pour $t \in]0,1[$: $f((1-t)x+ty) \leqslant (1-t)\alpha + t\beta$. Donc $(1-t)(x,\alpha) + t(y,\beta) = ((1-t)x+ty, (1-t)\alpha+t\beta) \in \operatorname{epi} f$, si bien que $\operatorname{epi} f$ est convexe. □

La signification géométrique de l'*inégalité de convexité* (3.2) est claire (voir la figure 3.1) : pour être convexe, il faut que, sur tout segment $[x,y] \subseteq \operatorname{dom} f$, f reste en-dessous de la fonction affine valant $f(x)$ en x et $f(y)$ en y.



convexe



non convexe

Fig. 3.1. Définition d'une fonction convexe

Définition 3.3 On dit que $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ est *strictement convexe* si pour tout $x, y \in \operatorname{dom} f$ avec $x \neq y$ et pour tout $t \in]0,1[$ on a

$$f\Big((1-t)x+ty\Big) < (1-t)f(x) + tf(y).$$

Sur un espace normé $\mathbb{E}$, on dit que $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ est *fortement convexe* de *module* $\alpha > 0$, si pour tout $x, y \in \operatorname{dom} f$ et tout $t \in [0,1]$, on a

$$f\Big((1-t)x+ty\Big) \leqslant (1-t)f(x) + tf(y) - \frac{\alpha}{2}\, t(1-t)\|x-y\|^2.$$

Si la norme dérive d'un produit scalaire, cette propriété qui revient à affirmer que $f - (\alpha/2)\|\cdot\|^2$ est convexe. □

Une fonction fortement convexe est donc strictement convexe avec une inégalité de convexité renforcée par un terme quadratique lui donnant une « courbure » au moins égale à α.

Une fonction identiquement égale à $+\infty$ est convexe (son épigraphe est vide), mais présente peu d'intérêt. Par ailleurs, une fonction convexe prenant la valeur $-\infty$ est très particulière (exercice 3.3). Une fonction $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ ne prenant pas la valeur $-\infty$ et n'étant pas identiquement égale à $+\infty$ est dite *propre*, sinon elle est dite *impropre*. On note

$$\operatorname{Conv}(\mathbb{E})$$

l'ensemble des fonctions de $\mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ qui sont convexes et propres. Ce n'est pas un espace vectoriel (la différence de deux fonctions convexes n'est généralement pas convexe !), ni même un cône convexe (à moins que l'on ne suppose les fonctions à valeurs réelles, car deux fonctions de $\operatorname{Conv}(\mathbb{E})$ peuvent avoir des domaines qui ne s'intersectent pas, auquel cas leur somme est impropre). Si $f \in \operatorname{Conv}(\mathbb{E})$, son épigraphe n'est pas vide ; donc l'intérieur relatif de celui-ci non plus (proposition 2.15). Le point 3 de l'exercice 3.1 en donne une expression explicite :

$$(\operatorname{epi} f)^{\diamond} = \{(x,\alpha) : x \in (\operatorname{dom} f)^{\diamond},\ f(x) < \alpha\}. \tag{3.3}$$

Il s'agit donc d'une partie de l'épigraphe stricte de f.

On rappelle qu'une une fonction $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ est dite *fermée* si son épigraphe est fermé (il revient au même de dire que f est s.c.i.). La figure 3.2 représente à gauche

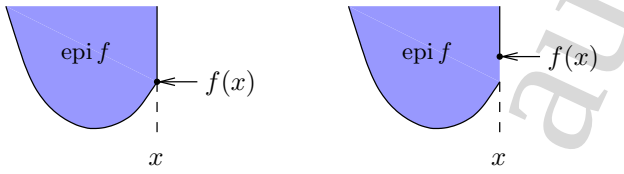


Fig. 3.2. Fonctions convexes fermée (à gauche) et non fermée (à droite)

une fonction convexe fermée et à droite une fonction convexe non fermée, ne différant de la première que par sa valeur en x. On note

$$\mathrm{C\overline{onv}}(\mathbb{E})$$

la partie de $\mathrm{Conv}(\mathbb{E})$ formée des fonctions fermées.

Considérons le problème d'optimisation suivant :

$$(P_X) \quad \begin{cases} \min f(x) \\ x \in X, \end{cases}$$

dans lequel on cherche à minimiser une fonction f définie sur un espace topologique X à valeurs dans $\mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ (voir la section 1.1). Le résultat suivant donne des conditions simples assurant l'unicité de la solution de (P_X).

Théorème 3.4 (unicité de solution) *Si X est une partie convexe d'un espace vectoriel $\mathbb{E}$ et si f est strictement convexe sur X, alors (P_X) a au plus une solution.*

Démonstration. On raisonne par l'absurde. Soient $x_1 \in X$ et $x_2 \in X$ deux solutions distinctes, vérifiant donc

$$f(x_1) = f(x_2) = \min f.$$

Comme X est convexe et f est strictement convexe sur X, on a

$$f\left(\frac{x_1+x_2}{2}\right) < \frac{1}{2}f(x_1) + \frac{1}{2}f(x_2) = \min f.$$

On aurait donc un point $x = \frac{x_1+x_2}{2}$ appartenant à X (car cet ensemble est convexe) et tel que $f(x) < f(x_1)$. Ceci contredirait l'optimalité de x_1 et x_2. □

3.2 Exemples

3.2.1 Indicatrice

On appelle *fonction indicatrice* d'une partie $P \subseteq \mathbb{E}$, ou simplement *indicatrice* de P, la fonction $\mathcal{I}_P : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ définie par

$$\mathcal{I}_P(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \in P \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$

La démonstration du résultat suivant est proposée au point 1 de l'exercice 3.27.

Proposition 3.5 (fonction indicatrice) *Si P est une partie non vide de $\mathbb{E}$, alors $\mathcal{I}_P \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$ (resp. $\mathcal{I}_P \in \mathrm{C}\overline{\mathrm{onv}}(\mathbb{E})$) si, et seulement si, P est convexe (resp. convexe fermé).*

3.2.2 Fonction affine et minorante affine

Une fonction $a : \mathbb{E} \to \mathbb{R}$ est dite *affine* si elle vérifie pour tout $x, y \in \mathbb{E}$ et tout $t \in \mathbb{R}$:

$$a((1-t)x + ty) = (1-t)a(x) + ta(y).$$

Ceci revient à dire que la fonction $x \in \mathbb{E} \mapsto a(x) - a(0)$ est linéaire. Il s'agit évidemment d'une fonction convexe, puisque (3.2) est vérifiée avec égalité sans condition sur $t \in \mathbb{R}$.

En dimension finie, il n'y a pas de restriction à supposer que $\mathbb{E}$ est muni d'un produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle$. Une fonction affine est alors donnée par un élément $x^* \in \mathbb{E}$ et une scalaire $\alpha \in \mathbb{R}$ et s'écrit

$$a : x \in \mathbb{E} \mapsto a(x) = \langle x^*, x \rangle - \alpha.$$

L'élément x^*, qui représente l'application linéaire $x \mapsto a(x) - a(0)$ dans $\mathbb{E}$, est appelé la *pente* de a. On voit que, si l'on munit l'espace produit $\mathbb{E} \times \mathbb{R}$ du produit scalaire $\langle (x, \alpha), (y, \beta) \rangle = \langle x, y \rangle + \alpha\beta$, l'épigraphe de a s'écrit

$$\begin{aligned} \operatorname{epi} a &= \{(x, t) \in \mathbb{E} \times \mathbb{R} : \langle x^*, x \rangle - \alpha \leqslant t\} \\ &= \{(x, t) \in \mathbb{E} \times \mathbb{R} : \langle (x^*, -1), (x, t) \rangle \leqslant \alpha\}, \end{aligned}$$

qui n'est autre que le demi-espace fermé $H^-((x^*, -1), \alpha)$ de $\mathbb{E} \times \mathbb{R}$ (notation (2.33)).

On appelle *minorante affine* d'une fonction $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$, une fonction affine a qui minore f sur $\mathbb{E}$: pour tout $x \in \mathbb{E}$, $f(x) \geqslant a(x)$. L'épigraphe d'une minorante affine de f est donc un demi-espace fermé de $\mathbb{E} \times \mathbb{R}$ qui contient l'épigraphe de f. Forcément, si f a une minorante affine, elle ne peut pas prendre la valeur $-\infty$. On dit qu'une minorante affine a de f est *exacte* en x_0 si $a(x_0) = f(x_0)$. Dans ce cas, elle s'écrit

$$a(x) = f(x_0) + \langle x^*, x - x_0 \rangle.$$

Une fonction convexe et propre a une minorante affine et celle-ci peut être choisie exacte en un point donné de $(\operatorname{dom} f)^\circ$, c'est ce qu'affirme la proposition suivante.

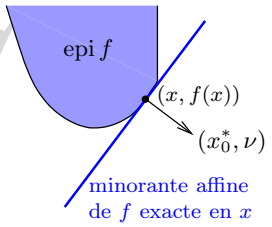
Proposition 3.6 (existence de minorante affine) *Si $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$ et $x \in (\mathrm{dom}\, f)^{\circ}$, alors il existe x^* dans le sous-espace vectoriel parallèle à $\mathrm{aff}(\mathrm{dom}\, f)$ tel que*

$$\forall\, y \in \mathbb{E} : \quad f(y) \geqslant f(x) + \langle x^*, y - x\rangle.$$

Démonstration. Observons d'abord que $(x, f(x))$ est sur la frontière relative de l'ensemble convexe fermé $C := \mathrm{adh}(\mathrm{epi}\, f)$. En effet, $(x, f(x))$ est sur la frontière relative de l'épigraphe de f (un convexe non nécessairement fermé), puisque $(x, f(x)) \in \mathrm{epi}\, f$ et que $(x, \alpha) \in (\mathrm{aff}(\mathrm{epi}\, f)) \setminus (\mathrm{epi}\, f)$ pour tout $\alpha < f(x)$. Donc $(x, f(x)) \notin (\mathrm{epi}\, f)^{\circ}$. Mais ce dernier ensemble est aussi C° (point 3 de la proposition 2.15). Comme $(x, f(x))$ appartient à C mais pas à C°, il est sur la frontière relative de C.

La proposition 2.28 nous assure alors qu'il existe une normale non nulle (x_0^*, ν) à C en $(x, f(x))$ qui est dans l'espace vectoriel parallèle à $\mathrm{aff}(\mathrm{epi}\, f) = \mathrm{aff}(\mathrm{dom}\, f) \times \mathbb{R}$ (point 1 de l'exercice 3.1) qui est $\mathbb{E}_0 \times \mathbb{R}$, où $\mathbb{E}_0$ est l'espace vectoriel parallèle à $\mathrm{aff}(\mathrm{dom}\, f)$. Pour tout $(y, \alpha) \in \mathrm{epi}\, f$, on a donc $\langle (y, \alpha) - (x, f(x)), (x_0^*, \nu)\rangle \leqslant 0$ ou, si l'on munit $\mathbb{E} \times \mathbb{R}$ du produit scalaire naturel de l'espace produit :

$$\forall\, (y, \alpha) \in \mathrm{epi}\, f : \quad \langle x_0^*, y - x\rangle + \nu(\alpha - f(x)) \leqslant 0.$$



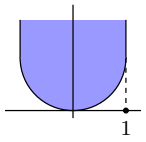
Exploitons cette inégalité :

- on peut prendre $\alpha \uparrow \infty$ dans cette inégalité, car $(\alpha, f(x))$ reste alors dans l'épigraphe de f, ce qui montre que $\nu \leqslant 0$;
- on ne peut avoir $\nu = 0$ (normale horizontale), car $y = x + tx_0^* \in \mathrm{dom}\, f$ pour $t > 0$ petit (car $x \in (\mathrm{dom}\, f)^{\circ}$ et $x_0^* \in \mathbb{E}_0$), si bien que l'inégalité ci-dessus impliquerait $t\|x_0^*\|^2 \leqslant 0$ et donc x_0^* serait aussi nul, contredisant le fait que $(x_0^*, \nu) \neq 0$.

Alors, en définissant $x^* = -x_0^*/\nu$ et en prenant $\alpha = f(y)$ dans l'inégalité exposée ci-dessus, on obtient l'inégalité de l'énoncé. □

Comme souvent, on a obtenu des résultats confortables en des points *qui ne sont pas sur la frontière relative des ensembles convexes considérés*. Dans le cas présent, si x est sur la frontière relative du domaine de f, le résultat de la proposition précédente ne tient plus nécessairement. Ceci est illustré par la fonction d'une variable $x \in \mathbb{R}$ suivante, qui a un graphe en demi-cercle :

$$f(x) = \begin{cases} 1 - \sqrt{1 - x^2} & \text{si } x \in [-1, 1] \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$



Cette fonction convexe a évidemment une minorante affine (par exemple la fonction nulle), mais n'a pas de minorante affine exacte en $x = 1$ (la tangente y est verticale et celle-ci n'est pas le graphe d'une fonction affine ; $\nu = 0$ dans la démonstration précédente).

3.2.3 Fonction convexe polyédrique ⊖

On dit qu'une fonction $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ est (*convexe*) *polyédrique* si son épigraphe est un polyèdre convexe. Une fonction polyédrique est donc nécessairement convexe et fermée (elle peut ne pas être propre cependant).

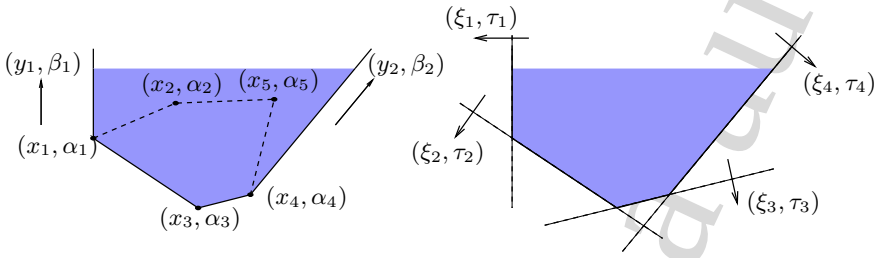


Fig. 3.3. Représentation primale (à gauche) et duale (à droite) d'une fonction polyédrique

Selon la représentation choisie du polyèdre convexe de $\mathbb{E} \times \mathbb{R}$ qu'est l'épigraphe d'un fonction polyédrique f (voir la section 2.4), on obtient une représentation primale ou duale de f. Dans la représentation primale (figure 3.3, à gauche), epi f s'écrit

$$\operatorname{epi} f = \operatorname{co}\{(x_1, \alpha_1), \dots, (x_p, \alpha_p)\} + \operatorname{cone}\{(y_1, \beta_q), \dots, (y_q, \beta_q)\},$$

où les x_i et les y_j sont donnés dans $\mathbb{E}$ et les α_i et β_j sont donnés dans $\mathbb{R}$. Alors

$$f(x) = \inf \left\{ \sum_{1 \leqslant i \leqslant p} t_i \alpha_i + \sum_{1 \leqslant j \leqslant q} s_j \beta_j : \sum_{1 \leqslant i \leqslant p} t_i x_i + \sum_{1 \leqslant j \leqslant q} s_j y_j = x, \right.$$
$$\left. \sum_{1 \leqslant i \leqslant p} t_i = 1,\ t_i \geqslant 0,\ s_j \geqslant 0 \right\}. \tag{3.4}$$

Dans la représentation duale (figure 3.3, à droite), epi f est vu comme une intersection d'un nombre fini de demi-espaces de $\mathbb{E} \times \mathbb{R}$, qui sont des ensembles de la forme

$$\{(x, \alpha) \in \mathbb{E} \times \mathbb{R} : \langle \xi_i, x \rangle + \tau_i \alpha \leqslant t_i\},$$

où $\xi_i \in \mathbb{E}$, $\tau_i \in \mathbb{R}$ et $t_i \in \mathbb{R}$. Puisque le polyèdre convexe ainsi obtenu doit être un épigraphe de fonction, α peut y être pris aussi grand que l'on veut, si bien que les $\tau_i \leqslant 0$. Si $\tau_i < 0$, le demi-espace est l'épigraphe de la fonction affine $a_i : x \mapsto -\langle \xi_i/\tau_i, x \rangle + t_i/\tau_i$. Si $\tau_i = 0$, le demi-espace est vertical et la condition $\langle \xi_i, x \rangle \leqslant t_i$ impose à x d'appartenir à un demi-espace de $\mathbb{E}$: le domaine de f est donc un polyèdre convexe P de $\mathbb{E}$. De ce point de vue, f s'écrit

$$f = \max_{1 \leqslant i \leqslant k} a_i + \mathcal{I}_P. \tag{3.5}$$

Cette représentation permet de voir que la somme de deux fonctions convexes polyédriques est une fonction convexe polyédrique (exercice 3.15).

3.2.4 Fonction sous-linéaire ⊖

Définition 3.7 On dit qu'une fonction $\sigma : \mathbb{E} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ est *sous-linéaire* si elle est convexe et positivement homogène de degré 1 (c'est-à-dire : pour tout $t > 0$ et tout $x \in \mathbb{E}$, on a $\sigma(tx) = t\sigma(x)$). □

Un exemple de fonction sous-linéaire est l'application $d \mapsto f'(x; d)$, dérivée directionnelle d'une fonction convexe en un point x. Nous verrons cela plus loin.

L'appellation « sous-linéaire » vient de la propriété (iii) de la proposition ci-dessous. Elle est semblable à la condition de convexité (3.2), mais doit avoir lieu ici, même si $t_1 + t_2 \neq 1$.

Proposition 3.8 (sous-linéarité) *Soit $\sigma : \mathbb{E} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ une fonction avec domaine non vide. Les propriétés suivantes sont équivalentes :*

(i) *σ est sous-linéaire ;*

(ii) *$\operatorname{epi}\sigma$ est un cône convexe de $\mathbb{E} \times \mathbb{R}$;*

(iii) *$\forall\, (x_1, x_2) \in (\operatorname{dom}\sigma)^2$ et $\forall\, (t_1, t_2) \in \mathbb{R}^2_+$, on a $\sigma(t_1x_1 + t_2x_2) \leqslant t_1\sigma(x_1) + t_2\sigma(x_2)$.*

Démonstration. $[(i) \iff (ii)]$ Par définition même, la convexité de σ est équivalente à la convexité de son épigraphe. Si σ est sous-linéaire et si $(x, r) \in \operatorname{epi}\sigma$, on a $\sigma(x) \leqslant r$, puis $\sigma(tx) = t\sigma(x) \leqslant tr$ pour $t > 0$, donc $(tx, tr) \in \operatorname{epi}\sigma$, qui montre que $\operatorname{epi}\sigma$ est un cône. Inversement, si $\operatorname{epi}\sigma$ est un cône, $(tx, t\sigma(x)) \in \operatorname{epi}\sigma$ pour tout $t > 0$, c'est-à-dire $\sigma(tx) \leqslant t\sigma(x)$ pour tout $t > 0$, donc aussi $\sigma(x) \leqslant \frac{1}{t}\sigma(tx)$; on en déduit $\sigma(tx) = t\sigma(x)$ et l'homogénéité positive de σ.

$[(i) \iff (iii)]$ Supposons que σ soit sous-linéaire. Soient $(x_1, x_2) \in (\operatorname{dom}\sigma)^2$ et $(t_1, t_2) \in \mathbb{R}^2_+$. Alors pour $t = t_1 + t_2 \neq 0$, on a grâce à l'homogénéité positive et la convexité de σ :

$$\sigma(t_1x_1 + t_2x_2) = t\sigma(\tfrac{t_1}{t}x_1 + \tfrac{t_2}{t}x_2) \leqslant t_1\sigma(x_1) + t_2\sigma(x_2).$$

Inversement la condition (iii) implique la convexité de σ (proposition 3.2) ainsi que, pour tout $t > 0$, $\sigma(tx) = \sigma(\frac{t}{2}x + \frac{t}{2}x) = t\sigma(x)$. □

En prenant $x_1 = -x_2 = x$ et $t_1 = t_2 = 1$ dans le point (iii) de la proposition précédente, on voit qu'une fonction sous-linéaire σ vérifie

$$\forall\, x \in \operatorname{dom}\sigma : \qquad \sigma(x) + \sigma(-x) \geqslant 0.$$

Pour que σ devienne linéaire sur un sous-espace vectoriel, il suffit que l'on ait égalité dans cette relation pour des vecteurs engendrant ce sous-espace.

Proposition 3.9 (sous-linéarité et linéarité) *Soit $\sigma : \mathbb{E} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ une fonction sous-linéaire telle que, pour des points $x_1, \ldots, x_m \in \operatorname{dom}\sigma$, on ait*

$$\sigma(x_i) + \sigma(-x_i) = 0. \tag{3.6}$$

Alors σ est linéaire sur le sous-espace vectoriel engendré par $x_1, \dots, x_m$.

DÉMONSTRATION. Par (3.6), les $-x_i \in \operatorname{dom}\sigma$. Par ailleurs si $x = \sum_{i=1}^m t_i x_i$ avec des $t_i \in \mathbb{R}$, on a

$$\begin{aligned}
\sigma(x) &= \sum_{i=1}^m \sigma\Big(|t_i|\,(\operatorname{sgn} t_i)\,x_i\Big) \\
&\leqslant \sum_{i=1}^m |t_i|\,\sigma\Big((\operatorname{sgn} t_i)\,x_i\Big) \qquad \text{[sous-linéarité]} \\
&= \sum_{i=1}^m t_i\,\sigma(x_i) \qquad \text{[(3.6)]}.
\end{aligned}$$

Donc aussi

$$-\sigma(x) \leqslant \sigma(-x) \leqslant \sum_{i=1}^m t_i\,\sigma(-x_i) = -\sum_{i=1}^m t_i\,\sigma(x_i).$$

On en déduit $\sigma(x) = \sum_{i=1}^m t_i\,\sigma(x_i)$, c'est-à-dire la linéarité de σ. □

3.2.5 Fonction d'appui ⊖

Soit $\mathbb{E}$ un espace euclidien (produit scalaire $\langle\cdot,\cdot\rangle$). La *fonction d'appui* d'une partie non vide $P \subseteq \mathbb{E}$ est la fonction $\sigma_P : \mathbb{E} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ définie par

$$\sigma_P(d) := \sup_{x \in P} \langle d, x\rangle.$$

Elle donne donc la valeur optimale du problème de maximisation de la fonction linéaire $x \in \mathbb{E} \mapsto \langle d, x\rangle$ sur P.

Proposition 3.10 *Soient P, P_1 et P_2 des parties non vides de $\mathbb{E}$. Alors*
1) *σ_P est sous-linéaire et fermée,*
2) $\sigma_{P_1} \leqslant \sigma_{P_2} \iff \overline{\text{co}}P_1 \subseteq \overline{\text{co}}P_2$,
3) $\sigma_{P_1} = \sigma_{P_2} \iff \overline{\text{co}}P_1 = \overline{\text{co}}P_2$,
4) $\sigma_P = \sigma_{\text{co}\,P} = \sigma_{\overline{P}} = \sigma_{\overline{\text{co}}P}$,
5) $\operatorname{dom}\sigma_P \subseteq ((\overline{\text{co}}P)^\infty)^-$, $\operatorname{dom}\sigma_P = (P^\infty)^-$ *si P est un polyèdre convexe.*

DÉMONSTRATION. 1) Il s'agit de l'enveloppe supérieure de fonctions linéaires ; celles-ci étant convexes et fermées, la fonction d'appui est convexe et fermée (proposition 3.33). L'homogénéité positive est immédiate.

2) $\boxed{\Rightarrow}$ Il suffit de montrer que $P_1 \subseteq \overline{\text{co}}P_2$. Si ce n'est pas le cas, il existe un point $\hat{x} \in P_1 \setminus \overline{\text{co}}P_2$. On sépare strictement le compact $\{\hat{x}\}$ du fermé $\overline{\text{co}}P_2$: il existe $d \in \mathbb{E}$ et $\alpha \in \mathbb{R}$ tels que

$$\forall\, x \in \overline{\mathrm{co}}P_2, \quad \langle d, x\rangle \leqslant \alpha < \langle d, \hat{x}\rangle.$$

On en déduirait que $\sigma_{P_2}(d) < \sigma_{P_1}(d)$, une contradiction.

$\boxed{\Leftarrow}$ Réciproquement, supposons qu'il existe $d \in \mathbb{E}$ tel que $\sigma_{P_2}(d) \leqslant \alpha < \sigma_{P_1}(d)$. Alors P_2 est contenu dans le demi-espace fermé $H^-(d,\alpha) := \{x \in \mathbb{E} : \langle d, x\rangle \leqslant \alpha\}$, mais celui-ci ne contient pas un point de $\hat{x} \in P_1$. Alors $\overline{\mathrm{co}}P_2 \subseteq H^-(d,\alpha)$ et on aurait $P_1 \not\subseteq \overline{\mathrm{co}}P_2$.

3) C'est une conséquence immédiate du point 2.

4) C'est une conséquence du point 3 puisque $\overline{\mathrm{co}}P = \overline{\mathrm{co}}(\mathrm{co}\, P) = \overline{\mathrm{co}}\overline{P} = \overline{\mathrm{co}}(\overline{\mathrm{co}}P)$.

5) On note $C := \overline{\mathrm{co}}P$. Si $d \notin (C^\infty)^-$, il existe une direction $p \in C^\infty$ telle que $2\alpha := \langle d, p\rangle > 0$. Le fait que $p \in C^\infty$ implique à son tour qu'il existe des suites $\{x_k\} \subseteq C$ et $\{t_k\} \to \infty$ telles que $x_k/t_k \to p$ (point 1 de la proposition 2.7). Dès lors, pour k assez grand, on a $\langle d, x_k\rangle \geqslant t_k\alpha$, ce qui implique que $\sigma_C(d) \geqslant \sup_k \langle d, x_k\rangle = +\infty$. Comme $\sigma_C = \sigma_P$ (point 4), l'inclusion $\mathrm{dom}\,\sigma_P \subseteq (C^\infty)^-$ est démontrée.

Si P est un polyèdre convexe, il peut s'écrire $P = \{x \in \mathbb{E} : Ax \leqslant b\}$ pour une application linéaire $A : \mathbb{E} \to \mathbb{R}^m$ et $b \in \mathbb{R}^m$. On sait qu'alors $P^\infty = \{p \in \mathbb{E} : Ap \leqslant 0\}$ (point 4 de l'exercice 2.18). Soit $d \in (P^\infty)^-$. Par le lemme de Farkas (proposition 2.40), on peut écrire $d = A^*v$ avec $v \geqslant 0$ dans $\mathbb{R}^m$. Alors pour tout $x \in P$, on a $\langle d, x\rangle = v^\mathsf{T}(Ax) \leqslant v^\mathsf{T}b$ (var $v \geqslant 0$ et $Ax \leqslant b$), ce qui montre que $\sigma_P(d) \leqslant v^\mathsf{T}b < +\infty$, c'est-à-dire que $d \in \mathrm{dom}\,\sigma_P$. □

On remarquera que l'on peut avoir $\mathrm{dom}\,\sigma_C \neq (C^\infty)^-$, si C est un convexe fermé non vide, *non polyédrique*. C'est le cas si $C = \{x \in \mathbb{R}^2 : x_2 \geqslant x_1^2\}$, puisqu'alors $C^\infty = \mathbb{R}_+e^2$, $e^1 \in (C^\infty)^-$, mais que $\sigma_C(e^1) \geqslant \sup_k (e^1)^\mathsf{T}(k^2, k^2) = \sup_k k = \infty$.

Proposition 3.11 (calcul de fonctions d'appui) 1) *Pour $i \in \{1, \ldots, m\}$, on suppose donnés des parties non vides P_i de $\mathbb{E}$ et des scalaires $\alpha_i \geqslant 0$. Alors*

$$\sigma_{(\sum_{i=1}^m \alpha_i P_i)} = \textstyle\sum_{i=1}^m \alpha_i\, \sigma_{P_i}.$$

2) *Soient $\mathbb{F}$ un espace euclidien, $A : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ une fonction linéaire, A^* son adjointe et P une partie non vide de $\mathbb{E}$. Alors, pour tout $h \in \mathbb{F}$:*

$$\sigma_{A(P)}(h) = \sigma_P(A^*h).$$

Démonstration. 1) Soit $d \in \mathbb{E}$. On a

$$\sigma_{(\sum_{i=1}^m \alpha_i P_i)}(d) = \sup_{x_i \in P_i} \langle d, \textstyle\sum_{i=1}^m \alpha_i x_i\rangle = \sup_{x_i \in P_i} \Big(\textstyle\sum_{i=1}^m \alpha_i \langle d, x_i\rangle\Big).$$

Ci-dessus, le supremum est pris sur chaque terme séparément, si bien que l'on peut sortir la somme du sup, ce qui conduit au résultat.

2) On a $\sigma_P(A^*h) = \sup\{\langle A^*h, x\rangle : x \in P\} = \sup\{\langle h, Ax\rangle : x \in P\} = \sigma_{A(P)}(h)$.

□

3.3 Régularité

3.3.1 Continuité lipschitzienne ⊖

Les fonctions convexes sont régulières sur leur domaine ; plus précisément elles sont lipschitziennes sur tout convexe compact contenu dans l'intérieur relatif de leur domaine. C'est ce que nous allons montrer à la proposition 3.13 ci-dessous. Dès lors, les accidents ne peuvent arriver que sur la frontière (relative) du domaine. Ce sont ces accidents-frontière qui peuvent rendre la fonction non fermée ou non sous-différentiable. Il faudra donc à l'avenir se concentrer sur le comportement de f sur la frontière relative de son domaine.

Lemme 3.12 *Si $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$ est bornée (supérieurement et inférieurement) sur un voisinage de $\mathbb{E}$, alors f est localement lipschitzienne sur l'intérieur de ce voisinage (tout point de ce voisinage est contenu dans un voisinage sur lequel f est lipschitzienne).*

Démonstration. Par hypothèse, il existe un voisinage V et une constante $C > 0$ tels que $|f(x)| \leqslant C$ lorsque $x \in V$. Fixons $x \in \mathrm{int}(V)$ et $\delta > 0$ tels que $\bar{B}(x,\delta) \subseteq V$ et montrons que f est lipschitzienne de module $\frac{4C}{\delta}$ sur $U := \bar{B}(x, \frac{\delta}{2})$.

Soient $y, y' \in U$, $y \neq y'$, et posons $\Delta := \|y - y'\| \in]0, \delta]$. Avec

$$y'' := y' + \frac{\delta}{2\Delta}(y' - y) \in \bar{B}(x,\delta)$$

on a

$$y' = \frac{2\Delta}{2\Delta + \delta} y'' + \frac{\delta}{2\Delta + \delta} y.$$

Par convexité de f et sa bornitude sur $\bar{B}(x,\delta)$, on obtient alors

$$f(y') \leqslant \frac{2\Delta}{2\Delta+\delta} f(y'') + \frac{\delta}{2\Delta+\delta} f(y) = f(y) + \frac{2\Delta}{2\Delta+\delta}(f(y'') - f(y)) \leqslant f(y) + \frac{4C}{\delta}\|y - y'\|.$$

On obtient le résultat en inversant le rôle de y et y' dans l'inégalité ci-dessus. □

Les voisinages U sur lesquels f est lipschitzienne sont éventuellement plus petits que le voisinage V sur lequel elle est bornée et la constante de Lipschitz sur U pourra être d'autant plus grande que U entoure un point proche du bord de V. C'est le cas par exemple pour la fonction convexe définie par

$$\begin{cases} -\log x & \text{si } x > 0 \\ +\infty & \text{si } x \leqslant 0. \end{cases}$$

Cette fonction n'est pas lipschitzienne sur $]0, \infty[$, mais l'est sur $]\varepsilon, \infty[$, quel que soit $\varepsilon > 0$ (le module de Lipschitz peut y être pris égal à $1/\varepsilon$).

Proposition 3.13 (continuité lipschitzienne) *Si $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$, alors f est lipschitzienne sur tout convexe compact inclus dans $(\mathrm{dom}\, f)^\circ$.*

Démonstration. Sans perte de généralité, on peut supposer que le domaine de f est d'intérieur non vide (dans le cas contraire, on travaille sur $\mathrm{aff}(\mathrm{dom}\, f)$, comme dans la démonstration de la proposition 3.6). Soient $n = \dim \mathbb{E}$ et K un convexe compact non vide de $(\mathrm{dom}\, f)^\circ$.

Montrons, en utilisant le lemme 3.12, que *pour tout $x_0 \in K$, il existe un $\varepsilon_0 > 0$ et une constante $L > 0$ tels que $B(x_0, \varepsilon_0) \subseteq (\mathrm{dom}\, f)^\circ$ et f est lipschitzienne de module L sur $B(x_0, \varepsilon_0)$*. Soit $x_0 \in K$. Comme dans la démonstration de la proposition 2.15, on peut construire un simplexe

$$\Delta = \mathrm{co}\{z_0, z_1, \ldots, z_n\} \subseteq \mathrm{dom}\, f, \qquad \text{avec } x_0 \in \Delta^\circ.$$

Dès lors, il existe $\varepsilon_0' > 0$ tel que $B(x_0, \varepsilon_0') \subseteq \Delta$. Alors f est majorée par une constante M sur cette boule, car tout $x \in \Delta$ s'écrit $x = \sum_{i=0}^n \alpha_i z_i$ avec $(\alpha_0, \ldots, \alpha_n) \in \Delta_{n+1}$, si bien que, par convexité de f, on a

$$f(x) \leqslant \sum_{i=0}^n \alpha_i f(z_i) =: M.$$

Par ailleurs, f est aussi minorée inférieurement sur $B(x_0, \varepsilon_0')$, car elle a une minorante affine (proposition 3.6). Par le lemme 3.12, il existe un $\varepsilon_0 \in \,]0, \varepsilon_0']$ tel que f est lipschitzienne sur $B(x_0, \varepsilon_0)$.

En utilisant la propriété de Heine-Borel pour le compact K, on peut déterminer des points $x_1, \ldots, x_p \in K$, tels qu'avec les ε_i déterminés comme ci-dessus, les boules $B(x_0, \varepsilon_i)$ recouvrent K et f est L_i-lipschitzienne sur $B(x_0, \varepsilon_i)$. En prenant $L = \max(L_1, \ldots, L_p)$, on voit que f est L-lipschitzienne sur K. En effet, un segment $[x, y] \subseteq K$ sera divisé par ces boules en au plus p sous-segments ($[x, y]$ intersecte chaque boule en un unique sous-segment) sur chacun desquels f est L-lipschitzienne ; en ordonnant ces sous-segments de $[x, y]$, on trouve que $|f(y) - f(x)| \leqslant L\|y - x\|$. □

3.3.2 Différentiabilité

En tout point où elle prend une valeur finie, une fonction convexe admet des dérivées directionnelles suivant toutes directions (on se rappelle que l'on n'a pas besoin de topologie sur $\mathbb{E}$ pour que cette notion de différentiabilité ait un sens). C'est ce que l'on montre avec la proposition suivante. Dans cette affirmation, la notion de dérivée directionnelle est prise dans un sens élargi : on accepte les valeurs $-\infty$ ou $+\infty$. Ceci revient à dire que la limite dans

$$f'(x; d) = \lim_{t \downarrow 0} \frac{f(x + td) - f(x)}{t},$$

qui est normalement prise dans $\mathbb{R}$ pour les fonctions réelles, est prise ici dans $\overline{\mathbb{R}}$.

Proposition 3.14 (différentiabilité directionnelle) *Soient $\mathbb{E}$ un espace vectoriel, $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ une fonction convexe, $x \in \mathbb{E}$ un point tel que $f(x)$ est fini et $d \in \mathbb{E}$. Alors*

(i) la fonction

$$t \in \mathbb{R}_{++} \mapsto \frac{f(x+td) - f(x)}{t} \in \overline{\mathbb{R}}$$

est croissante ;

(ii) $f'(x;d)$ existe dans $\overline{\mathbb{R}}$ (elle vaut éventuellement $-\infty$ ou $+\infty$) ;

(iii) $f'(x;d)$ vaut $+\infty$ si, et seulement si, $x + td \notin \operatorname{dom} f$ pour tout $t > 0$;

(iv) on a

$$f'(x;d) \geqslant -f'(x;-d)\,; \tag{3.7}$$

en particulier, si l'une des deux dérivées directionnelles $f'(x;d)$ ou $f'(x;-d)$ vaut $-\infty$ l'autre vaut $+\infty$.

Démonstration. [(i)] Soient $0 < t_1 < t_2$. Si $x + t_2 d \notin \operatorname{dom} f$, la croissance du quotient dans (i) est claire. Si $x + t_2 d \in \operatorname{dom} f$, alors $x + t_1 d \in \operatorname{dom} f$ (convexité de $\operatorname{dom} f$ et $x \in \operatorname{dom} f$) et par la convexité de f, on a

$$\begin{aligned} f(x+t_1 d) &= f\left(\left(1 - \frac{t_1}{t_2}\right) x + \frac{t_1}{t_2}(x + t_2 d)\right) \\ &\leqslant \left(1 - \frac{t_1}{t_2}\right) f(x) + \frac{t_1}{t_2} f(x + t_2 d). \end{aligned}$$

Comme $f(x) \in \mathbb{R}$, on en déduit

$$\frac{f(x+t_1 d) - f(x)}{t_1} \leqslant \frac{f(x+t_2 d) - f(x)}{t_2}.$$

[(ii) et (iii)] Donc, lorsque $t \downarrow 0$ de façon monotone, la fonction ξ définie en (i) décroît. Si $x + td \notin \operatorname{dom} f$ pour tout $t > 0$, alors $\xi(t) = +\infty$ et $f'(x;d) = +\infty$. Dans le cas contraire, la limite $\xi(0^+)$ existe comme limite d'une suite décroissante (et vaut éventuellement $-\infty$).

[(iv)] Si $f'(x;d)$ ou $f'(x;-d) = +\infty$, il n'y a rien à démontrer. Dans le cas contraire, $x - td$ et $x + td \in \operatorname{dom} f$ pour $t > 0$ assez petit. Pour ces $t > 0$, la convexité de f implique que

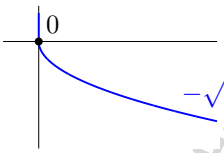
$$f(x) = f\left(\frac{x+td}{2} + \frac{x-td}{2}\right) \leqslant \frac{1}{2} f(x+td) + \frac{1}{2} f(x-td).$$

On en déduit (iv) par passage à la limite lorsque $t \downarrow 0$, après avoir retranché $f(x)$ aux deux membres. □

Deux remarques sur ce résultat.

- D'après le point (iii), on n'aura $f'(x;d) = +\infty$ que si $f(x+td) = +\infty$ pour tout $t > 0$. Mais on peut très bien avoir $f'(x;d) = -\infty$, alors que $f(x+td) > -\infty$ pour tout $t > 0$. C'est le cas en $x = 0$ pour la fonction convexe définie par

$$f(x) = \begin{cases} -\sqrt{x} & \text{si } x \geqslant 0 \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases} \tag{3.8}$$



et la direction $d = 1$.

- Le point (iv) montre que l'on peut comparer $f'(x;d)$ et $f'(x;-d)$ lorsque la fonction f est convexe. Si f n'est pas dérivable en x, en général $f'(x;d) \neq -f'(x;-d)$. Par exemple, si $f(x) = |x|$, $x \in \mathbb{R}$, on a $f'(0;1) = f'(0;-1) = 1$.

  Par ailleurs, la fonction (3.8) donne un exemple d'application de la formule (3.7) avec des valeurs infinies : $f'(0;1) = -\infty$ implique que $f'(0;-1) = +\infty$.

Pour x fixé tel que $f(x) \in \mathbb{R}$, la proposition suivante étudie les propriétés de l'*application dérivée directionnelle*

$$\delta_x : d \in \mathbb{E} \mapsto \delta_x(d) = f'(x;d) \in \overline{\mathbb{R}}. \tag{3.9}$$

Proposition 3.15 (application dérivée directionnelle) *Soient $\mathbb{E}$ un espace normé, $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ une fonction convexe et $x \in \mathbb{E}$ un point tel que $f(x)$ soit fini. Alors l'application dérivée directionnelle (3.9) vérifie les propriétés suivantes :*

1) *δ_x est sous-linéaire,*
2) *si $x \in (\operatorname{dom} f)^\ominus$, alors*
   a) $\operatorname{dom} \delta_x$ est le sous-espace vectoriel $\mathbb{E}_0$ de $\mathbb{E}$ parallèle à $\operatorname{aff}(\operatorname{dom} f)$,
   b) $\delta_x \in \overline{\operatorname{Conv}}(\mathbb{E})$,
   c) δ_x est lipschitzienne sur $\mathbb{E}_0$.

Démonstration. 1) Montrons d'abord la convexité de δ_x. Soient d_1, $d_2 \in \operatorname{dom} \delta_x$ et $\alpha \in [0,1]$. Alors $x + td_1$ et $x + td_2 \in \operatorname{dom} f$ pour $t > 0$ assez petit (proposition 3.14, point (iii)). Par convexité de f, on a

$$\begin{aligned}
\delta_x((1-\alpha)d_1 + \alpha d_2) &= \lim_{t \downarrow 0} \frac{1}{t}\Big\{ f\Big(\underbrace{x + t[(1-\alpha)d_1 + \alpha d_2]}_{\substack{=(1-\alpha)[x+td_1]+\alpha[x+td_2] \\ \in \operatorname{dom} f \text{ pour } t>0 \text{ petit}}} \Big) - f(x) \Big\} \\
&\leqslant \lim_{t \downarrow 0} \frac{1}{t}\Big\{ (1-\alpha) f(x+td_1) + \alpha f(x+td_2) - f(x) \Big\} \\
&= \lim_{t \downarrow 0} \frac{1}{t}\Big\{ (1-\alpha)\Big(f(x+td_1) - f(x) \Big) + \alpha \Big(f(x+td_2) - f(x) \Big) \Big\} \\
&= (1-\alpha)\delta_x(d_1) + \alpha \delta_x(d_2).
\end{aligned}$$

Montrons à présent l'homogénéité positive de degré 1 de δ_x. Soient $d \in \mathbb{E}$ et $\alpha > 0$. On a

$$\delta_x(\alpha d) = \lim_{t \downarrow 0} \alpha \frac{f(x + t\alpha d) - f(x)}{\alpha t} = \alpha \lim_{\tau \downarrow 0} \frac{f(x + \tau d) - f(x)}{\tau} = \alpha \delta_x(d).$$

2) On suppose à présent que $x \in (\operatorname{dom} f)^\ominus$ (donc f est propre, voir l'exercice 3.3) et on note $\mathbb{E}_0$ le sous-espace vectoriel parallèle à $\operatorname{aff}(\operatorname{dom} f)$.

2.a) Si $d \notin \mathbb{E}_0$, $x + td \notin \operatorname{dom} f$ pour tout $t > 0$, si bien que $\delta_x(d) = +\infty$ et $d \notin \operatorname{dom} \delta_x$. Par ailleurs, si $d \in \mathbb{E}_0$, $x + td \in \operatorname{dom} f$ pour tout $t > 0$ petit (car $x \in (\operatorname{dom} f)^\circ$, si bien que $\delta_x(d) < +\infty$ et $d \in \operatorname{dom} \delta_x$.

2.b) La fonction δ_x est convexe (point 1) et propre (car son domaine est un sous-espace vectoriel et que $\delta_x(0) = 0$, donc elle ne peut pas prendre la valeur $-\infty$ sur son domaine). Elle est donc localement lipschitzienne sur $\mathbb{E}_0$ (proposition 3.13), donc certainement s.c.i. sur $\mathbb{E}_0$.

2.c) D'après la proposition 3.13, f est localement lipschitzienne sur $(\operatorname{dom} f)^\circ$. Comme $x \in (\operatorname{dom} f)^\circ$, il existe $r > 0$ tel que f soit lipschitzienne sur $B(x, r) \cap \operatorname{aff}(\operatorname{dom} f)$, disons de module $L > 0$, Alors pour $d \in \mathbb{E}_0$ et $t > 0$ assez petit, $|f(x + td) - f(x)| \leqslant Lt\|d\|$. En divisant par $t > 0$ en passant à la limite lorsque $t \downarrow 0$, on trouve

$$\forall\, d \in \mathbb{E}_0, \quad |\delta_x(d)| \leqslant L\|d\|. \tag{3.10}$$

Soient d_1 et $d_2 \in \mathbb{E}_0$. Dès que $t \geqslant 1$, la monotonie du quotient différentiel de la fonction convexe δ_x (proposition 3.14) et l'homogénéité positive de cette même fonction assurent que

$$\begin{aligned} \delta_x(d_2) - \delta_x(d_1) &\leqslant \frac{\delta_x(d_1 + t(d_2 - d_1)) - \delta_x(d_1)}{t} \\ &= \delta_x\left(\frac{1}{t}d_1 + d_2 - d_1\right) - \delta_x\left(\frac{1}{t}d_1\right). \end{aligned}$$

Comme δ_x est continue sur $\mathbb{E}_0$, lorsque $t \to \infty$, le membre de droite converge vers $\delta_x(d_2 - d_1)$ qui, par (3.10), est majoré par $L\|d_2 - d_1\|$. En inversant le rôle de d_1 et d_2, on obtient $|\delta_x(d_2) - \delta_x(d_1)| \leqslant L\|d_2 - d_1\|$. □

Intéressons-nous à présent à des propriétés de différentiabilité plus forte que la différentiabilité directionnelle, qui est toujours vérifiée par les fonctions convexes, comme nous l'avons vu à la proposition 3.14. La proposition 3.17 ci-dessous montre que les trois notions de différentiabilité suivantes coïncident pour une fonction convexe $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ en un point $x \in \mathbb{E}$ où elle prend une valeur finie (la situation est plus complexe en dimension infinie [433 ; 1993]).

- On dit que f a une *dérivée partielle* en x suivant un vecteur $d \in \mathbb{E}$ si la fonction $t \in \mathbb{R} \mapsto f(x + td)$ est différentiable en $t = 0$.
- On dit que f est *Gâteaux-différentiable* en x si la dérivée directionnelle $f'(x; d)$ existe et est finie pour tout $d \in \mathbb{E}$ et si $d \in \mathbb{E} \mapsto f'(x; d)$ est linéaire.
- On dit que f est *Fréchet-différentiable* en x s'il existe un vecteur $D \in \mathbb{E}$ tel que

$$\lim_{\substack{d \to 0 \\ d \neq 0}} \frac{f(x + d) - f(x) - \langle D, d\rangle}{\|d\|} = 0. \tag{3.11}$$

  Dans ce cas, le vecteur D est appelé le *gradient* de f en x et est noté $\nabla f(x)$. D'après la définition, si f est Fréchet-différentiable en x, f prend des valeurs finies dans un voisinage de x.

Commençons par un lemme qui montre que la dérivée directionnelle en un point (non nécessairement linéaire par rapport à la direction de dérivation) est une approximation au premier ordre de f en ce point. On pourra rapprocher (3.12) de (3.11). Cette propriété est essentiellement due à la lipschitzianité de f et de $f'(x; \cdot)$.

Lemme 3.16 (développement au premier ordre) *Soient $\mathbb{E}$ un espace vectoriel de dimension finie, $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$ et $x \in (\mathrm{dom}\, f)^\circ$. Alors*

$$\lim_{\substack{d\to 0\\ d\neq 0}} \frac{f(x+d) - f(x) - f'(x;d)}{\|d\|} = 0. \tag{3.12}$$

Démonstration. Si (3.12) n'a pas lieu, il existe un $\varepsilon > 0$ et une suite de directions non nulles $\{d_k\}$ convergeant vers zéro, tels que

$$\forall\, k \geqslant 1 : \qquad |f(x+d_k) - f(x) - f'(x;d_k)| \geqslant \varepsilon \|d_k\|.$$

En extrayant une sous-suite au besoin, on peut supposer qu'avec $t_k := \|d_k\|$, la suite bornée $\{d_k/t_k\}$ converge vers un $d \in \mathbb{E}$. Alors

$$\begin{aligned} \varepsilon \;\leqslant\; & \frac{1}{t_k} |f(x+d_k) - f(x+t_k d)| \\ & + \frac{1}{t_k} |f(x+t_k d) - f(x) - f'(x;t_k d)| \\ & + \frac{1}{t_k} |f'(x;t_k d) - f'(x;d_k)|. \end{aligned}$$

Comme $x \in (\mathrm{dom}\, f)^\circ$, f est lipschitzienne dans un voisinage de x (proposition 3.13) et $f'(x;\cdot)$ est lipschitzienne sur $\mathbb{E}$ (proposition 3.15), disons de même constante $L > 0$. Dès lors, les premier et troisième termes du membre de droite ci-dessus sont majorés par $L\|d_k/t_k - d\| \to 0$. Quant au second terme, il tend aussi vers zéro, par la définition et la positive homogénéité de la dérivée directionnelle. On aboutit donc bien à une contradiction puisque $\varepsilon > 0$. □

Proposition 3.17 (différentiabilité) *Soient $\mathbb{E}$ un espace vectoriel de dimension n, $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$ et $x \in (\mathrm{dom} f)^\circ$. Alors les propriétés suivantes sont équivalentes :*

(i) f a des dérivées partielles en x suivant n directions linéairement indépendantes,
(ii) f est Gâteaux-différentiable en x,
(iii) f est Fréchet-différentiable en x.

Démonstration. [$(i) \Rightarrow (ii)$] Comme $f'(x;\cdot)$ est sous-linéaire (point 1 de la proposition 3.15) et linéaire suivant n directions linéairement indépendantes (hypothèse), elle est linéaire sur l'espace vectoriel engendré par ces directions (proposition 3.9), c'est-à-dire sur $\mathbb{E}$.

[$(ii) \Rightarrow (iii)$] La linéarité supposée de $f'(x;\cdot)$ et (3.12) montrent que f est Fréchet différentiable en x.

[$(iii) \Rightarrow (i)$] Vrai quelle que soit la fonction f. □

3.3.3 Reconnaître une fonction convexe par ses dérivées

Les résultats de cette section donnent des critères (souvent même des caractérisations, c'est-à-dire des conditions nécessaires et suffisantes) de convexité d'une fonction au moyen de ses dérivées. Ces critères sont souvent le moyen le plus rapide de vérifier qu'une fonction régulière est convexe.

Pour étudier la convexité d'une fonction on est amené à examiner ses valeurs le long des segments $[x, y]$, pour tout $x, y \in \mathbb{E}$. C'est la définition qui l'impose. Chaque fois que l'on se fixe les points x et y, on se ramène à l'étude d'une fonction réelle d'une variable réelle. Les premières caractérisations (propositions 3.18, 3.20 et 3.23) n'utilisent que ces fonctions « réduites » aux segments $[x, y]$. Au contraire, les corollaires 3.19 et 3.21 et la proposition 3.25 utilisent les valeurs de la fonction sur des voisinages. On a alors besoin d'une topologie sur $\mathbb{E}$ et d'avoir une fonction f dont le domaine contienne un *ouvert*. Si ce n'est pas le cas, le domaine de f est toutefois d'intérieur relatif non vide. Lorsque l'on peut représenter ce sous-espace comme l'image d'une application linéaire continue bijective $L : \mathbb{E}_0 \to \mathrm{aff}(\mathrm{dom}\, f)$, il est possible d'étudier la convexité de f à partir de celle de $f \circ L$ sur un ouvert de l'espace normé $\mathbb{E}_0$.

Utilisation des dérivées premières

Convexité

La proposition suivante montre que l'on peut caractériser la convexité d'une fonction f par le fait que celle-ci est au-dessus des fonctions affines obtenues par linéarisation de f (point (ii)) ou encore en exprimant que ses dérivées directionnelles sont monotones (point (iii)). Ceci est illustré à la figure 3.4. La fonction f

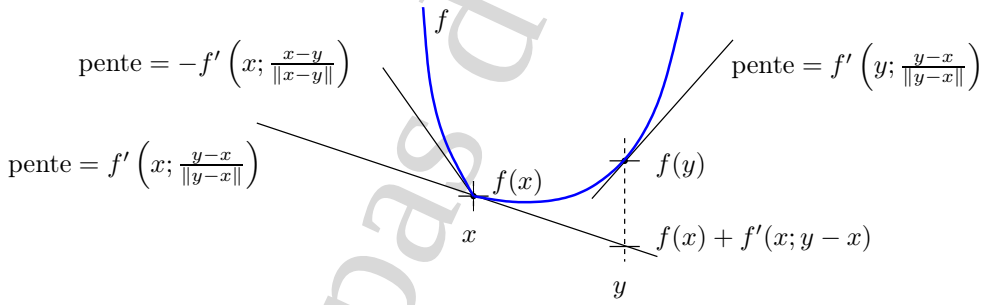


Fig. 3.4. Caractérisations de la convexité

qui y est représentée est convexe. On voit qu'elle est au-dessus de la fonction affine $y \mapsto f(x) + f'(x; y-x)$ et que $f'\left(y; \frac{y-x}{\|y-x\|}\right) \geqslant f'\left(x; \frac{y-x}{\|y-x\|}\right)$. On rappelle qu'une fonction convexe admet des dérivées directionnelles (pouvant valoir $-\infty$ ou $+\infty$) en tout point de son domaine (proposition 3.14).

Proposition 3.18 (convexité et dérivées premières) *Soient $\mathbb{E}$ un espace normé et $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ une fonction non identiquement égale à $+\infty$, ayant un domaine convexe et admettant des dérivées directionnelles en tout point de son domaine (celles-ci pouvant valoir $-\infty$ ou $+\infty$). Alors, les propriétés suivantes sont équivalentes :*

(i) f est convexe ;
(ii) $\forall\, x, y \in \operatorname{dom} f$, $x \neq y$: f est continue sur $]x, y[$ et $f(y) \geqslant f(x) + f'(x; y-x)$;
(iii) $\forall\, x, y \in \operatorname{dom} f$, $x \neq y$: f est continue sur $]x, y[$ et $f'(y; y-x) \geqslant f'(x; y-x)$.

Ces propriétés impliquent que

(iv) $\forall\, x, y \in \operatorname{dom} f$: $f'(x; y-x) + f'(y; x-y) \leqslant 0$.

Démonstration. $[(i) \Rightarrow (ii)]$ Soient $x, y \in \operatorname{dom} f$, $x \neq y$. Si $f'(x; y-x) = -\infty$, l'inégalité dans (ii) est trivialement vérifiée. Sinon $f'(x; y-x)$ a une valeur finie (par la proposition 3.14 : f est convexe et $x, y \in \operatorname{dom} f$, donc $f'(x; y-x) < +\infty$) et l'inégalité dans (ii) s'obtient grâce à la convexité de f par

$$\begin{aligned} f'(x; y-x) &= \lim_{t \downarrow 0} \frac{1}{t}\Big(f(x + t(y-x)) - f(x)\Big) \\ &= \lim_{t \downarrow 0} \frac{1}{t}\Big(f((1-t)x + ty) - f(x)\Big) \\ &\leqslant \lim_{t \downarrow 0} \frac{1}{t}\Big((1-t)f(x) + tf(y) - f(x)\Big) \\ &= f(y) - f(x). \end{aligned}$$

D'autre part, l'application $\xi : [0,1] \to \mathbb{R} : t \mapsto f((1-t)x + ty)$ est convexe et bornée supérieurement par $\max(f(x), f(y))$. Elle est aussi bornée inférieurement. Pour montrer cela, prenons par exemple le point milieu $z = \frac{x+y}{2}$. Alors $f'(z; x-z)$ et $f'(z; y-z)$ sont toutes les deux finies (elles ne valent pas $+\infty$ car f est convexe et $x, y, z \in \operatorname{dom} f$ et ne peuvent alors pas prendre la valeur $-\infty$ par la proposition 3.14 (iv)). Alors ξ est bornée inférieurement par $\inf(f(z), f(z) + f'(z; x-z), f(z) + f'(z; y-z))$. On en déduit que ξ est continue sur $]0,1[$ par le lemme 3.12.

$[(ii) \Rightarrow (i)]$ Si f n'est pas convexe, il existe $x, y \in \operatorname{dom} f$, $x \neq y$, et $\hat{t} \in]0,1[$ tel que $\hat{z} := (1-\hat{t})x + \hat{t}y$ vérifie

$$f(\hat{z}) > (1-\hat{t})f(x) + \hat{t}f(y).$$

Soit $t_1 := \inf\{\bar{t} \in [0, \hat{t}] : f((1-t)x+ty) > (1-t)f(x)+tf(y), \forall\, t \in]\bar{t}, \hat{t}]\}$. Par continuité de f sur $]x, y[$, un tel t_1 existe. D'autre part, soit parce que $t_1 = 0$, soit par continuité de f sur $]x, y[$, on a avec $z_1 := (1-t_1)x + t_1 y$

$$f(z_1) = (1-t_1)f(x) + t_1 f(y).$$

Remarquons que f est continue sur $[z_1, \hat{z}]$. En effet, f étant continue sur $]x, y[$ par hypothèse, il reste à montrer la continuité de f en z_1 lorsque $t_1 = 0$. Mais si $t_1 = 0$, $\liminf_{t \downarrow 0} f((1-t)x + ty) \geqslant f(x)$. Or $\limsup_{t \to 0^+} f((1-t)x + ty)$ ne peut être $> f(x)$ sinon $f'(x; y-x)$, qui est supposé exister, vaudrait $+\infty$, ce qui contredirait l'inégalité

de (ii) ($f(x)$ et $f(y)$ sont finis). Donc f est continue sur $[z_1, \hat{z}]$ et on peut appliquer la version généralisée du théorème de Rolle (corollaire C.11) : il existe $t_2 \in]t_1, \hat{t}[$ tel que $z_2 := (1-t_2)x + t_2 y$ vérifie

$$f'\left(z_2; \frac{y - z_2}{\|y - z_2\|}\right) \geqslant \frac{f(\hat{z}) - f(z_1)}{\|\hat{z} - z_1\|}.$$

On peut alors conclure comme suit :

$$\begin{aligned} f(z_2) + f'(z_2; y - z_2) &> (1-t_2)f(x) + t_2 f(y) \\ &\quad + \frac{1-t_2}{\hat{t} - t_1}\Big((1-\hat{t})f(x) + \hat{t} f(y) - (1-t_1)f(x) - t_1 f(y)\Big) \\ &= (1-t_2)f(x) + t_2 f(y) + (1-t_2)(f(y) - f(x)) \\ &= f(y), \end{aligned}$$

ce qui contredit l'inégalité de (ii).

$[(ii) \Rightarrow (iv)]$ Soient $x, y \in \operatorname{dom} f$. L'inégalité est triviale si $x = y$. Sinon, on utilise l'inégalité de (ii) en intervertissant le rôle de x et de y

$$\begin{aligned} f(y) &\geqslant f(x) + f'(x; y - x) \\ f(x) &\geqslant f(y) + f'(y; x - y). \end{aligned}$$

En sommant, on obtient (iv).

$[(i), (ii) \Rightarrow (iii)]$ Soient $x, y \in \operatorname{dom} f$, $x \neq y$. Si $f'(y; y - x) = +\infty$, (iii) est trivialement vérifiée. Sinon, d'après la proposition 3.14 (iv), $f'(y; y - x)$ est fini (dans le cas contraire, on devrait avoir $f'(y; x - y) = +\infty$, ce qui contredirait le fait que $x, y \in \operatorname{dom} f$) et $f'(y; x - y) \geqslant -f'(y; y - x)$. En utilisant cette inégalité et en intervertissant les rôles de x et y dans l'inégalité de (ii), on obtient

$$\begin{aligned} f(y) &\geqslant f(x) + f'(x; y - x) \\ f(x) &\geqslant f(y) - f'(y; y - x). \end{aligned}$$

En sommant, on obtient (iii).

$[(iii) \Rightarrow (i)]$ Si f n'est pas convexe, il existe $x, y \in \operatorname{dom} f$, $x \neq y$, et $\hat{t} \in]0, 1[$ tels que $\hat{z} := (1-\hat{t})x + \hat{t} y$ vérifie

$$f(\hat{z}) > (1-\hat{t})f(x) + \hat{t} f(y).$$

On peut trouver $\hat{t}_1 \in [0, \hat{t}]$ tel que $\hat{z}_1 := (1-\hat{t}_1)x + \hat{t}_1 y$ vérifie

$$f(\hat{z}_1) = (1-\hat{t}_1)f(x) + \hat{t}_1 f(y)$$

et tel que f soit continue sur $[\hat{z}_1, \hat{z}]$. On peut s'y prendre, par exemple, comme dans la détermination de t_1 dans la démonstration de l'implication $(ii) \Rightarrow (i)$; ici, si $\hat{t}_1 = 0$, on ne peut pas avoir $\limsup_{t \downarrow 0} f((1-t)x + ty) > f(x)$ car cela impliquerait que $f'(x; y - x) = +\infty$, ce qui est en contradiction avec l'hypothèse de monotonie des dérivées directionnelles et le fait qu'il y a des points z entre x et y où $f'(z; y - x)$ est finie. Pour les mêmes raisons, on peut trouver $\hat{t}_2 \in [\hat{t}, 1]$ tel que $\hat{z}_2 := (1-\hat{t}_2)x + \hat{t}_2 y$ vérifie

$$f(\hat{z}_2) = (1-\hat{t}_2)f(x) + \hat{t}_2 f(y)$$

et tel que f soit continue sur $[\hat{z}, \hat{z}_2]$. On peut alors appliquer la variante du théorème de Rolle donnée au corollaire C.11 : il existe $t_1 \in]\hat{t}_1, \hat{t}[$ et $t_2 \in]\hat{t}, \hat{t}_2[$ tels que $z_1 := (1-t_1)x + t_1 y$ et $z_2 := (1-t_2)x + t_2 y$ vérifient

$$f'(z_1; y-x) \geqslant \frac{f(\hat{z}) - f(\hat{z}_1)}{\hat{t} - \hat{t}_1} \quad \text{et} \quad f'(z_2; y-x) \leqslant \frac{f(\hat{z}_2) - f(\hat{z})}{\hat{t}_2 - \hat{t}}.$$

On en déduit que $f'(z_2; y-x) < f(y)-f(x) < f'(z_1; y-x)$, ce qui contredit l'hypothèse de monotonie des dérivées directionnelles dans (iii). □

Sans la continuité de f sur les segments $]x, y[$, l'inégalité de (ii) peut très bien être vérifiée par une fonction non convexe. En voici un exemple sur $\mathbb{R}$: $f(x) = 0$, si $x \neq 0$, et $f(0) = 1$ (on a $f'(x; \pm 1) = 0$, si $x \neq 0$, et $f'(0; \pm 1) = -\infty$).

La démonstration de la proposition précédente est longue parce que nous avons fait des hypothèses minimales sur la régularité de f. Si l'on suppose que le domaine de f est un ouvert convexe d'un espace normé $\mathbb{E}$ et que f est dérivable sur cet ouvert, on a un résultat plus simple à mémoriser et à démontrer. Nous le donnons sous forme de corollaire.

Corollaire 3.19 *Soient $\mathbb{E}$ un espace normé, Ω un ouvert convexe de $\mathbb{E}$ et $f : \Omega \to \mathbb{R}$ une fonction dérivable. Alors, les propriétés suivantes sont équivalentes :*
(i) f est convexe sur Ω ;
(ii) $\forall\, x, y \in \Omega : f(y) \geqslant f(x) + f'(x) \cdot (y - x)$;
(iii) $\forall\, x, y \in \Omega : (f'(y) - f'(x)) \cdot (y - x) \geqslant 0$.

Convexité stricte

On a un résultat analogue à celui de la proposition 3.18 pour les fonctions strictement convexes.

Proposition 3.20 (stricte convexité et dérivées premières I) *Soient $\mathbb{E}$ un espace normé et $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ une fonction non identiquement égale à $+\infty$, ayant un domaine convexe et admettant des dérivées directionnelles en tout point de son domaine (celles-ci pouvant valoir $-\infty$ ou $+\infty$). Alors, les propriétés suivantes sont équivalentes :*
(i) f est strictement convexe ;
(ii) $\forall\, x, y \in \operatorname{dom} f$, $x \neq y$: f est continue sur $]x, y[$ et $f(y) > f(x) + f'(x; y-x)$;
(iii) $\forall\, x, y \in \operatorname{dom} f$, $x \neq y$: f est continue sur $]x, y[$ et $f'(y; y-x) > f'(x; y-x)$.

Démonstration. [$(i) \Rightarrow (ii)$] Supposons que f soit strictement convexe et soient $x, y \in \operatorname{dom} f$, $x \neq y$. La continuité de f sur $]x, y[$ découle de la proposition 3.18. Pour démontrer l'inégalité stricte de (ii), on ne peut plus utiliser le même raisonnement que dans la démonstration de la proposition 3.18, car le passage à la limite détruirait

l'inégalité stricte que l'on a pour les fonctions strictement convexes. On s'y prend alors comme suit. Pour $t \in]0,1]$, on a

$$f'(x;y-x) = \frac{1}{t} f'(x;t(y-x)) \leqslant \frac{1}{t}\Big(f(x+t(y-x)) - f(x)\Big) < f(y) - f(x),$$

où pour la première inégalité on a utilisé la proposition 3.18 (ii) et pour la seconde on a utilisé la stricte convexité de f.

$[(ii) \Rightarrow (iii)]$ Si (iii) n'a pas lieu, il existe $x, y \in \operatorname{dom} f$, $x \neq y$, tels que $f'(y;y-x) \leqslant f'(x;y-x)$. Par la proposition 3.18, on a $f'(z;y-x) = f'(x;y-x)$ pour tout $z \in [x,y]$ et cette valeur est finie. On en déduit (par exemple par le corollaire C.10, en y prenant $\varphi(t) = \pm(f((1-t)x+ty) - tf'(x;y-x))$ pour $t \in [0,1]$) que $f(y) = f(x) + f'(x;y-x)$, ce qui contredit (ii).

$[(iii) \Rightarrow (i)]$ Si f n'est pas strictement convexe, il existe $x, y \in \operatorname{dom} f$, $x \neq y$, et $\hat{t} \in]0,1[$ tels que $\hat{z} := (1-\hat{t})x + \hat{t}y$ vérifie

$$f(\hat{z}) \geqslant (1-\hat{t})f(x) + \hat{t}f(y).$$

Comme f est convexe (proposition 3.18) ceci ne peut avoir lieu que si f est affine entre x et y. Mais alors, la stricte monotonie des dérivées directionnelles dans (iii) ne serait pas vérifiée. □

Énonçons également sous forme de corollaire, le résultat que donne la proposition 3.20 lorsque f est dérivable.

Corollaire 3.21 *Soient $\mathbb{E}$ un espace normé, Ω un ouvert convexe de $\mathbb{E}$ et $f : \Omega \to \mathbb{R}$ une fonction dérivable. Alors, les propriétés suivantes sont équivalentes :*

(i) f est strictement convexe sur Ω ;
(ii) $\forall\, x, y \in \Omega$, $x \neq y$: $f(y) > f(x) + f'(x)\cdot(y-x)$;
(iii) $\forall\, x, y \in \Omega$, $x \neq y$: $(f'(y) - f'(x))\cdot(y-x) > 0$.

Pour une fonction strictement convexe, contnûment différentiable, définie sur un espace de dimension finie, les inégalités de la proposition 3.20 et de son corollaire 3.21 peuvent être renforcées [234 ; lemmes 1.1 et 1.2, pages 61 et 63]. Les inégalités (3.13) et (3.14) qui sont établies dans la proposition suivante seront à nouveau renforcées pour les fonction fortement convexes (proposition 3.23).

Proposition 3.22 (stricte convexité et dérivées premières II) *Soient $\mathbb{E}$ un espace vectoriel de dimension finie, $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R}$ une fonction de classe C^1 et $t \in]0,1[$. Alors les propriétés suivantes sont équivalentes :*

(i) f est strictement convexe,
(ii) pour tout $\beta > 0$, il existe une fonction $g_\beta : [0,2\beta] \to \mathbb{R}_+$ continue, strictement croissante, vérifiant $g_\beta(0) = 0$ et

$$\forall\, x, y \in \beta\bar{B} : \quad f(y) - f(x) \geqslant f'(x)\cdot(y-x) + (1-t)g_\beta(t\|y-x\|), \quad (3.13)$$

(*iii*) *pour tout* $\beta > 0$, *il existe une fonction* $g_\beta : [0, 2\beta] \to \mathbb{R}_+$ *continue, strictement croissante, vérifiant* $g_\beta(0) = 0$ *et*

$$\forall\, x, y \in \beta\bar{B} : \quad (f'(y) - f'(x)) \cdot (y - x) \geqslant g_\beta(\|y - x\|). \tag{3.14}$$

Démonstration. $[(i) \Rightarrow (iii)]$ Soit $\beta > 0$. Au vu de la propriété désirée (3.14), il est naturel d'introduire la fonction $g^0_\beta : [0, 2\beta] \to \mathbb{R}_+$ définie en $\alpha \in [0, 2\beta]$ par

$$g^0_\beta(\alpha) := \inf_{\substack{\|y-x\|=\alpha \\ x,y\in\beta\bar{B}}} \Big(f'(y) - f'(x)\Big) \cdot (y - x).$$

Cette fonction a toutes les propriétés requises par le point (ii), hormis la continuité. Montrons cela.

1. $g^0_\beta(0) = 0$, clairement.
2. $g^0_\beta > 0$ *sur* $]0, 2\beta]$, grâce à la stricte convexité de f et au point (iii) de la proposition 3.20.
3. g^0_β *est strictement croissante sur* $[0, 2\beta]$. En effet, soient $0 < \alpha_1 < \alpha_2 \leqslant 2\beta$. Remarquons d'abord que l'infimum dans la définition de g^0_β est atteint, car $\{(x, y) \in \beta\bar{B} \times \beta\bar{B} : \|y - x\| = \alpha\}$ est compact ($\mathbb{E}$ est de dimension finie) et $(x, y) \mapsto (f'(y) - f'(x)) \cdot (y - x)$ est continue (f est continûment différentiable), puis on utilise alors le théorème de Weierstrass. Il existe donc des points $(x_2, y_2) \in \beta\bar{B} \times \beta\bar{B}$ tels que $\|y_2 - x_2\| = \alpha_2$ et

   $$g^0_\beta(\alpha_2) = \Big(f'(y_2) - f'(x_2)\Big) \cdot (y_2 - x_2).$$

   En introduisant $y := x_2 + (\alpha_1/\alpha_2)(y_2 - x_2)$, on a grâce à la stricte convexité de f et $0 < \alpha_1 < \alpha_2$:

   $$\Big(f'(y_2) - f'(x_2)\Big) \cdot (y_2 - x_2) > \Big(f'(y) - f'(x_2)\Big) \cdot (y_2 - x_2).$$

   En combinant ces deux relations, on obtient

   $$\begin{aligned} g^0_\beta(\alpha_2) &> \Big(f'(y) - f'(x_2)\Big) \cdot (y_2 - x_2) \\ &= \frac{\alpha_2}{\alpha_1} \Big(f'(y) - f'(x_2)\Big) \cdot (y - x_2) \qquad [\text{définition de } y] \\ &> \Big(f'(y) - f'(x_2)\Big) \cdot (y - x_2) \qquad [\alpha_2 > \alpha_1 \text{ et } y \neq x_2] \\ &\geqslant g^0_\beta(\alpha_1) \qquad [\|y - x_2\| = \alpha_1]. \end{aligned}$$

   D'où la croissance stricte de g^0_β.
4. Par définition même de g^0_β, (3.14) a lieu avec $g_\beta = g^0_\beta$.

Pour ontenir une fonction continue g_β, on utilise une technique de dérivation intégration. Soient x et $y \in \beta\bar{B}$. Comme ci-dessus, en intégrant la dérivée de $s \mapsto f(x + s(y - x))$, on obtient

$$f(y) - f(x) = \int_0^1 f'(x + s(y - x)) \cdot (y - x)\, \mathrm{d}s.$$

Mais $x + s(y - x) \in \beta\bar{B}$ (convexité de $\beta\bar{B}$) et (3.14) a lieu avec $g_\beta = g_\beta^0$, si bien que

$$\Big(f'(x + s(y - x)) - f'(x)\Big) \cdot (y - x) \geqslant \frac{1}{s}\, g_\beta^0(s\|y - x\|).$$

qui, avec l'identité précédente donne

$$f(y) - f(x) \geqslant f'(x) \cdot (y - x) + \int_0^1 \frac{1}{s}\, g_\beta^0(s\|y - x\|)\, \mathrm{d}s.$$

En échangeant x et y et en additionnant, on obtient

$$\Big(f'(y) - f'(x)\Big) \cdot (y - x) \geqslant \int_0^1 \frac{2}{s}\, g_\beta^0(s\|y - x\|)\, \mathrm{d}s = \int_0^{\|y-x\|} \frac{2}{r}\, g_\beta^0(r)\, \mathrm{d}r.$$

On obtient alors (3.14) en définissant $g_\beta : [0, 2\beta] \to \mathbb{R}+$ en $s \in [0, 2\beta]$ par

$$g_\beta(s) = \int_0^s \frac{2}{r}\, g_\beta^0(r)\, \mathrm{d}r.$$

Par ailleurs, il est clair que g_β est continue, strictement croissante et vérifie $g_\beta(0) = 0$.

$[(iii) \Rightarrow (ii)]$ Il s'agit de montrer que (3.14) implique (3.13). Comme ci-dessus, en intégrant la dérivée de $s \mapsto f(x + s(y - x))$, on obtient

$$\begin{aligned}
f(y) - f(x) &= \int_0^1 f'(x + s(y - x)) \cdot (y - x)\, \mathrm{d}s \\
&\geqslant f'(x) \cdot (y - x) + \int_0^1 \frac{1}{s}\, g_\beta(s\|y - x\|)\, \mathrm{d}s \qquad [(3.14)] \\
&\geqslant f'(x) \cdot (y - x) + \int_t^1 \frac{1}{s}\, g_\beta(s\|y - x\|)\, \mathrm{d}s \qquad [g_\beta \geqslant 0] \\
&\geqslant f'(x) \cdot (y - x) + (1 - t)\, g_\beta(t\|y - x\|),
\end{aligned}$$

car pour $s \in [t, 1]$, $g_\beta(s\|y - x\|) \geqslant g_\beta(t\|y - x\|)$ (croissance de g_β) et $s \leqslant 1$, si bien que $g_\beta(s\|y - x\|)/s \geqslant g_\beta(t\|y - x\|)$.

$[(ii) \Rightarrow (i)]$ Soient x et y deux points distincts de $\mathbb{E}$. On prend $\beta := \|y - x\|$, qui est strictement positif. Par (3.13) avec $t = \frac{1}{2}$, on a $f(y) - f(x) \geqslant f'(x) \cdot (y - x) + \frac{1}{2} g_\beta(\frac{1}{2}\|y - x\|) > f'(x) \cdot (y - x)$, car $g_\beta(\frac{1}{2}\|y - x\|) > 0$. Donc f est strictement convexe. □

Convexité forte

On a aussi des caractérisations de la forte convexité au moyen d'inégalités renforcées. La démonstration du résultat est proposée à l'exercice 3.11.

Proposition 3.23 (forte convexité et dérivées premières) *Soient* $\mathbb{E}$ *un espace vectoriel euclidien (produit scalaire* $\langle\cdot,\cdot\rangle$ *et norme associée* $\|\cdot\|$*),* $\alpha > 0$ *et* $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ *une fonction non identiquement égale à* $+\infty$*, ayant un domaine convexe et admettant des dérivées directionnelles en tout point de son domaine (celles-ci pouvant valoir* $-\infty$ *ou* $+\infty$*). Alors, les propriétés suivantes sont équivalentes :*

(i) f *est fortement convexe de module* α *;*

(ii) *pour tout* $x, y \in \operatorname{dom} f$, $x \neq y$ *:* f *est continue sur* $]x, y[$ *et* $f(y) \geqslant f(x) + f'(x; y-x) + \frac{\alpha}{2}\|y-x\|^2$ *;*

(iii) *pour tout* $x, y \in \operatorname{dom} f$, $x \neq y$ *:* f *est continue sur* $]x, y[$ *et* $f'(y; y-x) \geqslant f'(x; y-x) + \alpha\|y-x\|^2$.

Ce résultat s'énonce plus simplement lorsque la fonction est différentiable.

Corollaire 3.24 *Soient* $\mathbb{E}$ *un espace euclidien,* Ω *un ouvert convexe de* $\mathbb{E}$ *et* $f : \Omega \to \mathbb{R}$ *une fonction dérivable. Alors, les propriétés suivantes sont équivalentes :*

(i) f *est fortement convexe sur* Ω *;*

(ii) $\forall\, x, y \in \Omega : f(y) \geqslant f(x) + f'(x)\cdot(y-x) + \frac{\alpha}{2}\|y-x\|^2$ *;*

(iii) $\forall\, x, y \in \Omega : (f'(y) - f'(x))\cdot(y-x) \geqslant \alpha\|y-x\|^2$.

Utilisation des dérivées secondes

On peut également donner une caractérisation de convexité d'une fonction (mais pas de sa stricte convexité) au moyen de ses dérivées secondes.

Proposition 3.25 (convexité et dérivées secondes) *Soient* $\mathbb{E}$ *un espace normé,* Ω *un ouvert convexe de* $\mathbb{E}$ *et* $f : \Omega \to \mathbb{R}$ *une fonction deux fois dérivable. Alors* f *est convexe sur* Ω *si, et seulement si,*

$$\forall\, x \in \Omega, \quad \forall\, d \in \mathbb{E} : \quad f''(x)\cdot d^2 \geqslant 0. \tag{3.15}$$

D'autre part, si

$$\forall\, x \in \Omega, \quad \forall\, d \in \mathbb{E} \setminus \{0\} : \quad f''(x)\cdot d^2 > 0, \tag{3.16}$$

alors f *est strictement convexe sur* Ω.

Démonstration. Si f est convexe sur Ω, on a pour tout $x \in \Omega$ et tout $d \in \mathbb{E}$ (en utilisant les propositions C.17 et 3.18) :

$$f''(x)\cdot d^2 = \lim_{t\downarrow 0}\frac{1}{t}(f'(x+td)\cdot d - f'(x)\cdot d) \geqslant 0.$$

Inversement, supposons que (3.15) ait lieu. Si $x, y \in \Omega$, le théorème C.19 donne

$$f(y) = f(x) + f'(x)\cdot(y-x) + \frac{1}{2}f''(x+\theta(y-x))\cdot(y-x)^2,$$

où $\theta \in]0,1[$. Comme le dernier terme est positif ou nul, on voit par la proposition 3.18 que f est convexe. Le cas où (3.16) a lieu se démontre de la même manière. □

Remarquons que la condition (3.16) n'est pas nécessairement vérifiée pour une fonction strictement convexe comme le montre la fonction $x \in \mathbb{R} \mapsto f(x) = x^4$. Bien que celle-ci soit strictement convexe, on a $f''(0) = 0$. Par contre, pour une fonction quadratique, (3.16) est une condition nécessaire et suffisante de convexité stricte (point 2 de l'exercice 3.8).

Lorsque $\mathbb{E}$ est un espace de Hilbert, on peut traduire le résultat de la proposition 3.25 en utilisant la hessienne de f : (i) f est convexe si, et seulement si, sa hessienne $\nabla^2 f(x)$ est semi-définie positive et (ii) si $\nabla^2 f(x)$ est défini positif, alors f est strictement convexe.

3.3.4 Fonction asymptotique ⊖

L'épigraphe d'une fonction $f \in \overline{\mathrm{Conv}}(\mathbb{E})$ est un convexe fermé non vide. On peut donc considérer son cône asymptotique $(\mathrm{epi}\, f)^\infty$. Celui-ci a des propriétés intéressantes.

Proposition 3.26 (définition de f^∞) *Soit $f \in \overline{\mathrm{Conv}}(\mathbb{E})$. Alors*

(i) $(\mathrm{epi}\, f)^\infty$ est l'épigraphe d'une fonction $f^\infty : \mathbb{E} \to \mathbb{R}\cup\{+\infty\}$: $(\mathrm{epi}\, f)^\infty = \mathrm{epi}\, f^\infty$,

(ii) $\forall\, x \in \mathrm{dom}\, f$, $\forall\, d \in \mathbb{E}$:

$$f^\infty(d) = \lim_{t\to+\infty}\frac{f(x+td)-f(x)}{t}, \tag{3.17}$$

(iii) $\mathrm{dom}\, f^\infty \subseteq (\mathrm{dom}\, f)^\infty$,

(iv) $f^\infty \in \overline{\mathrm{Conv}}(\mathbb{E})$ et est sous-linéaire.

Démonstration. Commençons par une caractérisation de l'appartenance à $(\mathrm{epi}\, f)^\infty$. Soit $x \in \mathrm{dom}\, f$ (qui est non vide) ; donc $f(x)$ est fini et $(x, f(x)) \in \mathrm{epi}\, f$. Alors

$$\begin{aligned}(d,\delta) \in (\mathrm{epi}\, f)^\infty &\iff (x,f(x)) + t(d,\delta) \in \mathrm{epi}\, f, \quad \forall\, t \geqslant 0\\ &\iff f(x+td) \leqslant f(x) + t\delta, \quad \forall\, t \geqslant 0.\end{aligned} \tag{3.18}$$

[(i)] Si $(d,\delta) \in (\mathrm{epi}\, f)^\infty$ et $\delta' \geqslant \delta$, $(d,\delta') \in (\mathrm{epi}\, f)^\infty$, grâce à (3.18). Fixons à présent $d \in \mathbb{E}$ et posons

$$\delta_0 := \inf\{\delta : (d,\delta) \in (\mathrm{epi}\, f)^\infty\}.$$

Il faut montrer que $(d, \delta_0) \in (\operatorname{epi} f)^\infty$. D'après (3.18)

$$\delta_0 = \sup_{t>0} \frac{f(x+td) - f(x)}{t}.$$

On en déduit que $f(x+td) \leqslant f(x) + t\delta_0$, $\forall\, t \geqslant 0$, et donc $(d, \delta_0) \in (\operatorname{epi} f)^\infty$ (par (3.18)).

[(ii)] Soit f^∞ la fonction dont $(\operatorname{epi} f)^\infty$ est l'épigraphe. On a $f^\infty(d) = \delta_0$, ou encore (3.17), car le quotient ci-dessus est croissant avec t (de fait de la convexité de f).

[(iii)] D'après (3.18), si $d \in \operatorname{dom} f^\infty$, $(d, f^\infty(d)) \in (\operatorname{epi} f)^\infty$ et $f(x+td) \leqslant \alpha + tf^\infty(d)$, qui est fini quel que soit $t \geqslant 0$. Donc $d \in (\operatorname{dom} f)^\infty$.

[(iv)] D'une part, f^∞ est convexe fermée et non identiquement égale à $+\infty$, parce que son épigraphe est le convexe fermé non vide $(\operatorname{epi} f)^\infty$. D'autre part, f^∞ ne prend pas la valeur $-\infty$ car sa valeur est obtenue comme limite d'une suite croissante (voir (3.17)). Enfin f est sous-linéaire, car son épigraphe est un cône convexe (proposition 3.8). □

Définition 3.27 On appelle *fonction asymptotique* (ou *fonction de récession*) de $f \in \overline{\operatorname{Conv}}(\mathbb{E})$ la fonction $f^\infty \in \overline{\operatorname{Conv}}(\mathbb{E})$ introduite dans la proposition 3.26. □

Quelques remarques sur la proposition 3.26.

- D'après la proposition 3.14, on sait que, lorsque $x \in \operatorname{dom} f$, le quotient de la formule (3.17) croît avec t ; il converge vers $f^\infty(d)$ si $t \to +\infty$ et vers $f'(x;d)$ si $t \downarrow 0$.
- Comme $f(x) \in \mathbb{R}$, la formule du point (3.17) s'écrit aussi

$$f^\infty(d) = \lim_{t\to+\infty} \frac{f(x+td)}{t}, \tag{3.19}$$

  avec un quotient $f(x+td)/t$ qui, contrairement au quotient différentiel dans (3.17), n'est pas nécessairement monotone en t.
- L'utilisation de la formule (3.19) est souvent le moyen le plus rapide de calculer la valeur de la fonction asymptotique en une direction d. Insistons sur le fait que la limite dans (3.19) ne dépend pas du point x choisi dans le domaine de f.
- La formule (3.19) montre que si la fonction $t \mapsto f(x+td)$ a une asymptote à droite, $f^\infty(d)$ en est sa pente ; sinon $f^\infty(d) = +\infty$.
- Si $x \in \operatorname{dom} f$ et $f(x+td) = +\infty$ pour un $t > 0$, alors $d \notin (\operatorname{dom} f)^\infty$ et donc $d \notin \operatorname{dom} f^\infty$ par (iii), c'est-à-dire $f^\infty(d) = +\infty$.
- On n'a pas nécessairement égalité au point (iii). En effet, si $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ est l'exponentielle, on a $f^\infty(1) = +\infty$. Donc $1 \notin \operatorname{dom} f^\infty$, alors que $1 \in (\operatorname{dom} f)^\infty = (\mathbb{R})^\infty = \mathbb{R}$.

La notion de fonction asymptotique est illustrée à la figure 3.5.

On note l'*ensemble de sous-niveau* $\nu \in \mathbb{R}$ d'une fonction $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ de la manière suivante :

$$N_\nu(f) := \{x \in \mathbb{E} : f(x) \leqslant \nu\}.$$

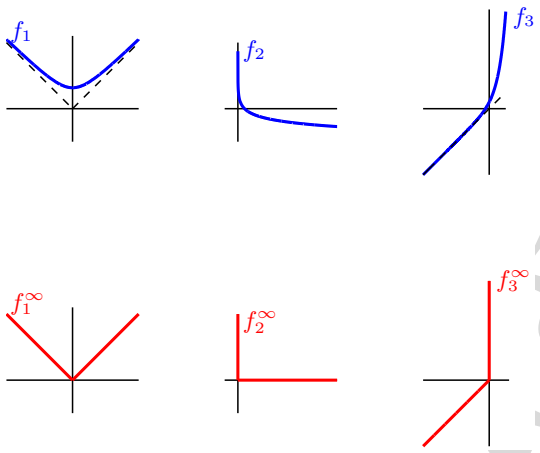


Fig. 3.5. Exemples de fonctions convexes (en haut) et de leur fonction asymptotique (en bas) ; de gauche à droite : $f_1(x) = (x^2+10)^{1/2}$, $f_2(x) = -\log x$ et $f_3(x) = x + e^x$

C'est un ensemble convexe, lorsque f est convexe. La notion de fonction asymptotique est très utile, du fait du résultat suivant, qui montre que pour les fonctions de $\overline{\mathrm{Conv}}(\mathbb{E})$ ces ensembles de sous-niveau ont tous le même cône asymptotique (s'ils sont non vides). En particulier, si l'un d'eux est borné non vide, ils sont tous bornés (éventuellement vides). Un de ces ensembles de sous-niveau est l'ensemble de ses minimiseurs :

$$\arg\min f := \{x \in \mathbb{E} : f(x) \leqslant f(x'),\ \forall\, x' \in \mathbb{E}\} = N_{\inf f}(f).$$

La fonction asymptotique permet alors de donner des conditions nécessaires et suffisantes pour que l'ensemble des minimiseurs soit non vide et compact. D'autres conditions, ne faisant pas intervenir f^∞ et valables pour les fonctions de $\mathrm{Conv}(\mathbb{E})$, sont données à l'exercice 3.35.

Proposition 3.28 (ensembles de sous-niveau d'une fonction convexe) *Soit $f \in \overline{\mathrm{Conv}}(\mathbb{E})$. Alors, pour tout $\nu \in \mathbb{R}$ tel que $N_\nu(f) \neq \varnothing$, on a*

$$(N_\nu(f))^\infty = \{d \in \mathbb{E} : f^\infty(d) \leqslant 0\}. \tag{3.20}$$

En particulier, les propriétés suivantes sont équivalentes :
(i) $\exists\, \nu \in \mathbb{R}$ *tel que* $N_\nu(f)$ *est non vide et compact,*
(ii) $\forall\, \nu \in \mathbb{R}$, $N_\nu(f)$ *est compact,*
(iii) $\arg\min f$ *est non vide et compact,*
(iv) $\forall\, d \in \mathbb{E} \setminus \{0\}$, $f^\infty(d) > 0$.

Démonstration. Soient $\nu \in \mathbb{R}$ et $x \in N_\nu(f)$ supposé non vide. Alors

$$d \in (N_\nu(f))^\infty \quad \Longleftrightarrow \quad f(x+td) \leqslant \nu, \quad \forall\, t \geqslant 0.$$

Donc si $d \in (N_\nu(f))^\infty$, $f^\infty(d) \leqslant 0$ par passage à la limite ci-dessus (après avoir divisé par $t > 0$). Inversement, si $f^\infty(d) \leqslant 0$, $f(x+td) \leqslant f(x)$, pour tout $t > 0$ (le quotient dans (3.17) est croissant et borné par 0). Alors $x \in N_\nu(f)$ implique que $x+td \in N_\nu(f)$, pour tout $t > 0$; donc $d \in (N_\nu(f))^\infty$.

L'équivalence des propriétés (i)-(iv) se déduit facilement de (3.20). □

En pratique, pour montrer que f a un ensemble non vide et borné de minimiseurs (point (iii)), on utilise le point (iv) : quelle que soit la direction non nulle d, $f^\infty(d) > 0$. Comme souvent en analyse convexe, on obtient une propriété globale (la bornitude de l'ensemble des minimiseurs) à partir de propriétés unidirectionnelles (la stricte positivité de la fonction asymptotique dans toutes les directions non nulles).

Dans le reste de cette section, nous énonçons quelques règles de calcul de fonctions asymptotiques. La démonstration de la première règle est proposée à l'exercice 3.5.

Proposition 3.29 (pré-composition par une fonction affine) *Soient $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ deux espaces vectoriels, $A : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ une fonction linéaire, $b \in \mathbb{F}$ et $a : x \in \mathbb{E} \to Ax + b \in \mathbb{F}$ l'application affine associée et $f \in \mathrm{C}\overline{\mathrm{onv}}(\mathbb{E})$ telle que $(\mathrm{dom}\, f) \cap \mathcal{R}(a) \neq \varnothing$. Alors, pour tout $d \in \mathbb{F}$,*

$$(f \circ a)^\infty(d) = f^\infty(Ad).$$

Voici maintenant un résultat permettant de calculer, dans certains cas, la fonction asymptotique d'une post-composition d'une fonction convexe par une fonction convexe croissante [24]. La formule (3.21) rappelle celle de la dérivation en chaîne.

Proposition 3.30 (post-composition par une fonction convexe croissante) *Supposons données deux fonctions $f \in \mathrm{C}\overline{\mathrm{onv}}(\mathbb{E})$ et $g \in \mathrm{C}\overline{\mathrm{onv}}(\mathbb{R})$ telles que $(\mathrm{dom}\, g) \cap f(\mathbb{E}) \neq \varnothing$. On suppose que g est croissante et vérifie $g^\infty(1) > 0$. Alors $(g \circ f) \in \mathrm{C}\overline{\mathrm{onv}}(\mathbb{E})$ et pour tout $d \in \mathbb{E}$, on a*

$$(g \circ f)^\infty(d) = g^\infty(f^\infty(d)). \tag{3.21}$$

Dans ce résultat, on a adopté les conventions suivantes : $g(f(x)) = +\infty$ si $x \notin \mathrm{dom}\, f$ et $g^\infty(f^\infty(d)) = +\infty$ si $d \notin \mathrm{dom}\, f^\infty$.

Démonstration. D'après [295 ; proposition IV.2.1.8], $(g \circ f) \in \mathrm{C}\overline{\mathrm{onv}}(\mathbb{E})$. Montrons que

$$\delta < f^\infty(d) \quad \Longrightarrow \quad g^\infty(\delta) \leqslant (g \circ f)^\infty(d). \tag{3.22}$$

Si $\delta < f^\infty(d)$, alors pour t assez grand et $x \in \mathrm{dom}\, f$ tel que $f(x) \in \mathrm{dom}\, g$, on a $\delta < (f(x+td) - f(x))/t$ ou encore $f(x) + t\delta < f(x+td)$. Comme g est croissante et $f(x) \in \mathrm{dom}\, g$, on en déduit

$$\frac{g(f(x)+t\delta) - g(f(x))}{t} \leqslant \frac{(g \circ f)(x+td) - (g \circ f)(x)}{t}, \quad \text{pour } t \text{ grand.}$$

Comme $f(x) \in \operatorname{dom} g$, la limite dans cette relation conduit à (3.22).

Si $d \notin \operatorname{dom} f^\infty$, on peut prendre $\delta \to \infty$ dans (3.22), et comme $\lim_{\delta\to\infty} g^\infty(\delta) = \infty$ (car $g^\infty(1) > 0$), on en déduit que $(g \circ f)^\infty(d) = \infty$.

Si $d \in \operatorname{dom} f^\infty$, on prend $\delta \downarrow f^\infty(d)$ dans (3.22). Comme g^∞ est fermée, on obtient

$$g^\infty(f^\infty(d)) \leqslant \liminf_{\delta\downarrow f^\infty(d)} g^\infty(\delta) \leqslant (g \circ f)^\infty(d).$$

Pour montrer l'inégalité inverse, on prend $x \in \operatorname{dom} f$ tel que $f(x) \in \operatorname{dom} g$. Alors, quel que soit $t > 0$, $f(x + td) \leqslant f(x) + tf^\infty(d)$ et comme g est croissante :

$$(g \circ f)(x + td) \leqslant g(f(x) + tf^\infty(d)).$$

On divise par $t > 0$ et on passe à la limite pour $t \to \infty$. Ceci donne $(g \circ f)^\infty(d) \leqslant g^\infty(f^\infty(d))$. □

3.4 Opérations

J'ai seul la clef de cette parade sauvage.

A. Rimbaud, Parade, *Illuminations* (1873-1875).

3.4.1 Composition

La *fonction composée* de deux fonctions f et g, dont l'ensemble d'arrivée de f est l'ensemble de définition de g, est la fonction notée $g \circ f$ et définie en x par

$$(g \circ f)(x) = g(f(x)).$$

Si f et g sont convexes, la fonction composée $g \circ f$ n'est généralement pas convexe. Relevons toutefois deux exceptions heureuses que l'on rencontre fréquemment, celle où f est affine et celle où g est convexe croissante. Nous les examinons l'une après l'autre.

Proposition 3.31 (pré-composition par une fonction affine) *Soient $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ deux espaces vectoriels, $a : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ une application affine et $g : \mathbb{F} \to \overline{\mathbb{R}}$ une fonction telle que $\mathcal{R}(a) \cap \operatorname{dom} g \neq \varnothing$.*

1) *Si $g \in \operatorname{Conv}(\mathbb{F})$, alors $g \circ a \in \operatorname{Conv}(\mathbb{E})$.*
2) *Si $g \in \overline{\operatorname{Conv}}(\mathbb{F})$, alors $g \circ a \in \overline{\operatorname{Conv}}(\mathbb{E})$.*
3) *Si g est convexe polyédrique, alors $g \circ a$ est convexe polyédrique.*

Démonstration. 1) Clairement $g \circ a \in \operatorname{Conv}(\mathbb{E})$ lorsque $g \in \operatorname{Conv}(\mathbb{F})$ et que $\mathcal{R}(a) \cap \operatorname{dom} g \neq \varnothing$.

2) Introduisons l'application affine

$$\tilde{a} : \mathbb{E} \times \mathbb{R} \to \mathbb{F} \times \mathbb{R} : (x, \alpha) \mapsto (a(x), \alpha).$$

Alors, $(x, \alpha) \in \operatorname{epi}(g \circ a)$ si, et seulement si, $(a(x), \alpha) \in \operatorname{epi} g$, ce qui s'écrit

$$\mathrm{epi}(g \circ a) = \tilde{a}^{-1}(\mathrm{epi}\, g).$$

Si $g \in \mathrm{C\overline{onv}}(\mathbb{F})$, $\mathrm{epi}\, g$ est fermé, donc aussi $\tilde{a}^{-1}(\mathrm{epi}\, g) = \mathrm{epi}(g \circ a)$, ce qui montre que $g \circ a \in \mathrm{C\overline{onv}}(\mathbb{E})$.

3) Si g est convexe polyédrique, $\mathrm{epi}\, g$ est un polyèdre convexe, donc aussi $\tilde{a}^{-1}(\mathrm{epi}\, g) = \mathrm{epi}(g \circ a)$ (exercice 2.18), ce qui montre que $g \circ a$ est convexe polyédrique. □

Le second cas où la convexité est préservée par composition se situe dans le cadre suivant. Soient $\mathbb{E}$ un espace vectoriel, $F : \mathbb{E} \to (\mathbb{R} \cup \{+\infty\})^m$ une première fonction et $g : \mathbb{R}^m \to \overline{\mathbb{R}}$ une seconde fonction. Avec F pouvant prendre la valeur $+\infty$, la fonction composée $(g \circ F) : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ est définie en $x \in \mathbb{E}$ par

$$(g \circ F)(x) = \begin{cases} g(F(x)) & \text{si } F(x) \in \mathbb{R}^m \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$

On munit $\mathbb{R}^m$ de l'*ordre* habituel (c.-à-d., $[x \leqslant y] \Leftrightarrow [x_i \leqslant y_i$ pour tout $i = 1, \ldots, m]$) et on dit que g est *croissante* si $g(x) \leqslant g(y)$ chaque fois que $x \leqslant y$ dans $\mathbb{R}^m$.

Proposition 3.32 (post-composition par une fonction convexe croissante) *Dans le cadre défini ci-dessus, si F est convexe composante par composante et si g est convexe et croissante, alors $g \circ F$ est convexe.*

Démonstration. Soient x, $y \in \mathrm{dom}(g \circ F)$ et $t \in]0, 1[$. Alors $F(x)$ et $F(y) \in \mathbb{R}^m$ et la convexité composante par composante de F conduit à

$$F((1-t)x + ty) \leqslant (1-t)F(x) + tF(y) \qquad \text{(inégalité dans } \mathbb{R}^m\text{)}.$$

Ensuite

$$\begin{aligned} (g \circ F)\big((1-t)x + ty\big) &\leqslant g\big((1-t)F(x) + tF(y)\big) && \text{[croissance de } g\text{]} \\ &\leqslant (1-t)(g \circ F)(x) + t(g \circ F)(y) && \text{[convexité de } g\text{]}. \end{aligned}$$

C'est l'inégalité recherchée. □

3.4.2 Enveloppes supérieure et inférieure

L'enveloppe supérieure d'une famille de fonctions est la fonction dont la valeur en un point est le supremum (ou borne supérieure) des valeurs prises par ces fonctions en ce point. Soyons plus précis.

Soient $\mathbb{E}$ un premier ensemble utilisé comme espace de définition de fonctions et I un second ensemble utilisé comme ensemble (quelconque) d'indices. Pour tout $i \in I$, on suppose donnée une fonction $f_i : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$. On peut alors introduire la fonction

$$f = \sup_{i \in I} f_i : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}},$$

définie pour $x \in \mathbb{E}$ par

$$f(x) = \sup_{i\in I} \Big(f_i(x) \Big).$$

Cette fonction est appelée *l'enveloppe supérieure* des fonctions f_i. On définit de manière similaire, l'*enveloppe inférieure* des fonctions f_i :

$$\inf_{i\in I} f_i : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}} : x \mapsto \Big(\inf_{i\in I} f_i\Big)(x) := \inf_{i\in I} \Big(f_i(x) \Big).$$

De manière plus abstraite, on peut dire que l'enveloppe supérieure de la famille $\{f_i\}_{i\in I}$ n'est autre que le supremum (ou borne supérieure) de cette famille dans l'ensemble ordonné réticulé des fonctions définies sur $\mathbb{E}$ à valeurs dans $\overline{\mathbb{R}}$ (ou treilli, c.-à-d., l'ordre $[f \leqslant g] \Leftrightarrow$ [pour tout $x \in \mathbb{E}$, $f(x) \leqslant g(x)$] est tel que tout couple de fonctions a une borne supérieure et une borne inférieure). Ceci justifie la notation $\sup_{i\in I} f_i$ [73 ; 1971, p. IV.21].

Proposition 3.33 *Soit $\{f_i\}_{i\in I}$ une famille quelconque de fonctions. Alors*

$$\operatorname{epi}\left(\sup_{i\in I} f_i\right) = \bigcap_{i\in I} (\operatorname{epi} f_i)\,.$$

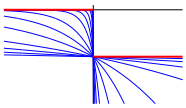
On en déduit que :
1) $\sup_{i\in I} f_i$ *est convexe si* $\mathbb{E}$ *est un espace vectoriel et les* f_i *sont convexes,*
2) $\sup_{i\in I} f_i$ *est fermée si* $\mathbb{E}$ *est un espace topologique et les* f_i *sont fermées.*

Démonstration. En effet $(x,\alpha) \in \operatorname{epi}(\sup_{i\in I} f_i) \iff \alpha \geqslant f_i(x)$, pour tout $i \in I$ $\iff (x,\alpha) \in \operatorname{epi} f_i$, pour tout $i \in I \iff (x,\alpha) \in \cap_{i\in I}(\operatorname{epi} f_i)$. On utilise ensuite le fait qu'une intersection de convexes [resp. fermés] est convexe [resp. fermée]. □

Il se peut cependant que l'enveloppe supérieure de fonctions convexes soit identiquement égale à $+\infty$, même si les $f_i \in \operatorname{Conv}(\mathbb{E})$ (par exemple l'enveloppe supérieure des fonctions constantes).

Le point 2 de la proposition précédente met en évidence l'importance du concept de fonction *fermée* (ou s.c.i.) en optimisation : cette propriété est stable pour l'enveloppe supérieure, une opération souvent rencontrée dans cette discipline. On notera qu'à l'inverse la continuité des fonctions n'est pas conservée par l'enveloppe supérieure, comme le montre l'exemple où les fonctions $f_i : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, pour $i \in \mathbb{R}_+$, sont définies en $x \in \mathbb{R}$ par

$$f_i(x) = -e^{ix}.$$



L'enveloppe supérieure de ces fonctions continues est nulle sur $\mathbb{R}^*_-$ et vaut -1 sur $\mathbb{R}_+$; elle n'est donc pas continue. Bien sûr, une fonction continue étant s.c.i., l'enveloppe supérieure de fonctions continues est s.c.i.. Dans l'exemple ci-dessus, la valeur de l'enveloppe supérieure en zéro est -1, pas zéro ou tout autre valeur > -1.

Le fait que l'enveloppe supérieure de fonctions convexes soit convexe se montre aussi aisément en utilisant l'inégalité de convexité (3.2), grâce au fait que l'enveloppe

supérieure d'une somme est inférieure à la somme des enveloppes supérieures. Seule la convexité des fonctions $x \mapsto f_i(x)$, à $i \in I$ fixé, joue dans l'obtention de ce résultat (il n'y a d'ailleurs pas de structure sur l'ensemble I). La situation est bien différente pour l'enveloppe inférieure, qui ne bénéficie pas des deux propriétés numérotées de la proposition précédente. On peut toutefois avoir la convexité de l'enveloppe inférieure si l'on a une structure vectorielle sur I et si $(x,i) \in \mathbb{E} \times I \mapsto f_i(x)$ est convexe. Cela conduit à la notion de fonction marginale de la section suivante.

3.4.3 Fonction marginale

Soient $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ deux espaces vectoriels et $\varphi : \mathbb{E} \times \mathbb{F} \to \overline{\mathbb{R}}$ une fonction. On associe à cette dernière la *fonction marginale* $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ définie par :

$$f(x) = \inf_{y \in \mathbb{F}} \varphi(x,y). \tag{3.23}$$

Proposition 3.34 1) *f est convexe, si φ est convexe.*
2) *$f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$, si $\varphi \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E} \times \mathbb{F})$ et si f ne prend pas la valeur $-\infty$.*

Démonstration. 1) L'épigraphe stricte $\mathrm{epi}_s f$ est la projection sur $\mathbb{E}\times\mathbb{R}$ de $\mathrm{epi}_s \varphi \subseteq (\mathbb{E}\times\mathbb{F})\times\mathbb{R}$. Comme epi_s est convexe (convexité de φ) et que l'image par une application linéaire d'un convexe est convexe (section 2.1), on en déduit que $\mathrm{epi}_s f$ est convexe ; donc f est convexe.

2) Il reste à montrer que $f \not\equiv +\infty$. Mais si φ est propre, il existe un (x,y) tel que $\varphi(x,y) < \infty$, donc $f(x) < \infty$. □

La fonction marginale est une enveloppe *inférieure* de fonctions convexes $x \mapsto \varphi(x,y)$, paramétrées par $y \in \mathbb{F}$. On pourrait donc, à juste titre, s'étonner de sa convexité. C'est évidemment la convexité *conjointe* sur $\mathbb{E}\times\mathbb{F}$ qui permet d'avoir cette propriété. En comparaison, dans la proposition 3.33, on ne fait aucune hypothèse sur la structure de l'ensemble I, ni sur la manière dont $f_i(x)$ dépend de i.

3.4.4 Inf-convolution ⊖

Soient f et g deux fonctions $\mathbb{E} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$, définies sur un espace vectoriel $\mathbb{E}$. Leur *inf-convolution* est la fonction $(f \uplus g) : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ définie par[1]

$$(f \uplus g)(x) = \inf_{y \in \mathbb{E}} \Big(f(y) + g(x-y) \Big) = \inf\{ f(y) + g(z) : y + z = x \}. \tag{3.24}$$

Voilà une opération bien singulière ! Observons d'abord qu'il s'agit de la fonction marginale associée à la fonction définie sur $\mathbb{E}^2$ par $\varphi(x,y) = f(y) + g(x-y)$, si bien

[1] La notation $f \uplus g$ nous est propre, mais les autres notations ne sont guère stabilisées : on trouve $f \,\square\, g$ chez Rockafellar [462], $f \dot{+} g$ chez Hiriart-Urruty et Lemaréchal [295] et $f \odot g$ chez Borwein et Lewis [68]. Avec un peu de bonne volonté, le lecteur verra dans le symbole $\uplus$ le fait que l'épigraphe (symbole $\cup$) stricte de $f \uplus g$ est obtenu en sommant (symbole $+$) ceux de f et g (proposition 3.35).

qu'elle hérite des propriétés des fonctions marginales. D'autre part, si la définition de l'inf-convolution donnée ci-dessus peut paraître obscure, son expression en termes d'épigraphe est particulièrement simple (la démonstration de la proposition ci-dessous est proposée à l'exercice 3.6).

Proposition 3.35 *Soient f et g deux fonctions $\mathbb{E} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$. Alors*

$$\operatorname{epi}_s(f \boxplus g) = \operatorname{epi}_s f + \operatorname{epi}_s g. \tag{3.25}$$

En particulier :
1) $\operatorname{dom}(f \boxplus g) = \operatorname{dom} f + \operatorname{dom} g$,
2) *commutativité :* $f \boxplus g = g \boxplus f$,
3) *associativité :* $(f \boxplus g) \boxplus h = f \boxplus (g \boxplus h)$,
4) $f \boxplus g$ *est convexe si* f *et* g *sont convexes,*
5) $f \boxplus g \in \operatorname{Conv}(\mathbb{E})$ *si* f *et* $g \in \operatorname{Conv}(\mathbb{E})$ *et ont une minorante affine commune.*

L'identité (3.25) portant sur les épigraphes strictes n'a pas lieu si l'on utilise les épigraphes, bien que l'on ait toujours

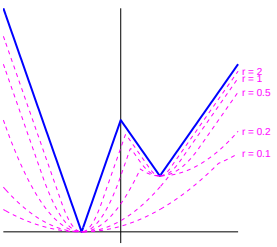
$$\operatorname{epi}(f \boxplus g) \supseteq \operatorname{epi} f + \operatorname{epi} g.$$

Le problème vient du fait que la somme de deux fermés n'est pas nécessairement un fermé, si bien que $\operatorname{epi} f + \operatorname{epi} g$ n'est pas nécessairement un épigraphe ; il peut ne pas contenir sa « frontière inférieure », comme dans l'exemple suivant : si $f = \mathcal{I}_{[0,1[}$ et $g = \mathrm{Id} + \mathcal{I}_{[0,+\infty[}$, alors $(x, \alpha) \in \operatorname{epi} f + \operatorname{epi} g$ si, et seulement si, $x \geqslant 0$, $\alpha \geqslant 0$ et $\alpha > x - 1$, si bien que $\operatorname{epi} f + \operatorname{epi} g$ n'est pas l'épigraphe d'une fonction. Cependant, en prenant $\alpha := f(y) + g(z)$ dans la définition (3.24) de $f \boxplus g$, on a $(x, \alpha) = (y, f(y)) + (z.g(z))$, si bien que

$$(f \boxplus g)(x) = \inf\{\alpha : (x, \alpha) \in \operatorname{epi} f + \operatorname{epi} g\}. \tag{3.26}$$

L'inf-convolution d'une fonction f (éventuellement non convexe) avec la fonction quadratique $q = \frac{1}{2}\|\cdot\|^2$ a un effet régularisant sur certains points de non-différentiabilité de f. La figure ci-joint considère le cas de la fonction non convexe et non différentiable

$$f : x \in \mathbb{R} \mapsto |x+1| - \frac{3}{2}x^+ + (x-1)^+ \in \mathbb{R},$$



qui y est représentée par la courbe en trait plein. Les courbes en tirets sont les inf-convolutions

$$x \mapsto \left(f \boxplus \frac{r}{2} q\right)(x) = \inf_{y \in \mathbb{R}} f(y) + \frac{r}{2}\|y - x\|^2$$

pour les valeurs de $r = 0.1$, $r = 0.2$, $r = 0.5$, $r = 1$ et $r = 2$. On voit en prenant $y = x$ dans l'infimum ci-dessus, que $(f \boxplus \frac{r}{2} q)(x) \in [\inf f, f(x)]$, lorsque $r \geqslant 0$; on verra aussi au point 3 de la proposition 12.2 que $(f \boxplus \frac{r}{2} q)(x)$ croît avec $r > 0$; ces propriétés peuvent s'observer dans la figure. Cet effet régularisant sera examiné dans le cas d'une fonction convexe f à la section 3.7.2.

3.4.5 Inf-image sous une application linéaire ⊖

Voir le syllabus complet.

3.4.6 Enveloppe convexe ▲ ⊖

Voir le syllabus complet.

3.4.7 Adhérence ⊖

Voir le syllabus complet.

3.5 Conjugaison

Soit $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ une fonction, non nécessairement convexe. Nous allons dans cette section lui associer une autre fonction $f^* : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$, appelée conjuguée de Fenchel de f. Elle est construite explicitement à partir de f. Cette construction peut paraître abstraite et arbitraire au premier abord, mais elle est utile à plus d'un titre :

- nous verrons à la section 3.5.2 qu'en réitérant le processus de conjugaison, on dispose d'un moyen analytique de *convexifier* f,
- la conjuguée de Fenchel peut aussi être utilisée comme outil intermédiaire dans le *calcul de sous-gradient*, un concept généralisant la notion de gradient pour les fonctions convexes non différentiables, que nous verrons à la section 3.6,
- enfin la conjuguée de Fenchel permet aussi d'introduire un *problème d'optimisation dual* d'un autre problème d'optimisation (section 13.2).

On supposera dans cette section que $\mathbb{E}$ est un espace euclidien, dont le produit scalaire est noté $\langle \cdot, \cdot \rangle$.

3.5.1 Conjuguée

Comme nous le signalions ci-dessus, la notion de fonction conjuguée intervient dans la définition du sous-différentiel d'une fonction convexe f et c'est par cette notion de sous-différentiel que nous allons motiver l'introduction de la fonction conjuguée.

On verra que le sous-différentiel $\partial f(x)$ de f en x est l'ensemble des pentes x^* des minorantes affines de f exactes en x. Il définit une multifonction

$$\partial f : x \in \mathbb{E} \mapsto \partial f(x) \subseteq \mathbb{E}.$$

Il n'est pas toujours aisé d'expliciter cette application car, pour $x \in \mathbb{E}$, il n'est pas nécessairement simple de déterminer toutes les minorantes affines de f exactes en x. Que l'on songe par exemple à la fonction valeur-propre-maximale $\lambda_{\max}$ qui à une matrice $A \in \mathcal{S}^n$ fait correspondre sa valeur propre maximale $\lambda_{\max}(A)$. Cette fonction est convexe (exercice 3.31), mais quelles sont les minorantes affines de $\lambda_{\max}$ qui sont exactes en une matrice $A \in \mathcal{S}^n$ donnée ? Il est parfois plus facile de déterminer la multifonction réciproque de ∂f, à savoir

$$\partial f^{-1} : x^* \in \mathbb{E} \mapsto \{x \in \mathbb{E} : x^* \in \partial f(x)\}.$$

De ce point de vue, pour une pente $x^* \in \mathbb{E}$ donnée, on cherche les points $x \in \mathbb{E}$ tels que f a une minorante affine de pente x^* qui est exacte en x. Pour déterminer ces points x, on s'y prend de la manière suivante ; c'est dans ce calcul qu'apparaît la fonction conjuguée.

Une fonction affine de pente x^* est une application de la forme

$$a_{x^*,\alpha} : \mathbb{E} \to \mathbb{R} : x \mapsto a_{x^*,\alpha}(x) = \langle x^*, x\rangle - \alpha,$$

où $\alpha \in \mathbb{R}$ est l'opposé de sa valeur en zéro. Pour que cette fonction affine minore f et soit exacte en certains points, on cherche à prendre α le plus petit possible (donc $-\alpha$ le plus grand possible) tout en conservant l'inégalité de minoration $a_{x^*,\alpha} \leqslant f$. Les points où f et cette minorante affine maximale $a_{x^*,\alpha}$ prennent les mêmes valeurs sont les points $x \in \partial f^{-1}(x^*)$ recherchés. La démarche est illustrée à la figure 3.6. De

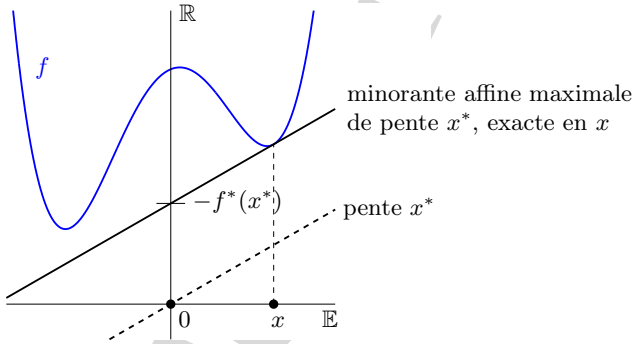


Fig. 3.6. Interprétation de $f^*(x^*)$

manière plus explicite, on cherche le plus petit $\alpha \in \mathbb{R}$ tel que

$$\begin{aligned} a_{x^*,\alpha} \leqslant f \qquad & \text{ou} \quad \Big(\forall\, x \in \mathbb{E} : \quad \langle x^*, x\rangle - \alpha \leqslant f(x)\Big) \\ & \text{ou} \quad \Big(\forall\, x \in \mathbb{E} : \quad \langle x^*, x\rangle - f(x) \leqslant \alpha\Big). \end{aligned} \tag{3.27}$$

On voit clairement que la plus petite valeur de α est donnée par

$$\boxed{f^*(x^*) := \sup_{x\in\mathbb{E}} \Big(\langle x^*, x\rangle - f(x)\Big).} \tag{3.28}$$

C'est la valeur de la conjuguée de f en x^*.

Définition 3.36 Soit $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ une fonction (non nécessairement convexe). Sa *fonction conjuguée* $f^* : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ est la fonction prenant en $x^* \in \mathbb{E}$ la valeur donnée par (3.28). L'application $f \mapsto f^*$ est appelée *transformation de Legendre-Fenchel*. □

Revenons au problème que nous nous posions au début de ce paragraphe : si x est solution du problème en (3.28), alors

$$\forall\, y \in \mathbb{E} : \quad \langle x^*, x\rangle - f(x) \geqslant \langle x^*, y\rangle - f(y) \tag{3.29}$$

ou encore (on vérifiera l'équivalence même lorsque f peut prendre des valeurs infinies)

$$\forall\, y \in \mathbb{E} : \quad f(y) \geqslant f(x) + \langle x^*, y - x\rangle, \tag{3.30}$$

ce qui montre que $y \mapsto f(x) + \langle x^*, y - x\rangle$ est une minorante affine de f, exacte en x. Dès lors, les sous-différentiels de f aux points-solutions du problème en (3.28) contiennent x^*.

L'expression (3.28) de la conjuguée et (3.27) montrent que l'on a une relation très simple entre les minorantes affines de f et les éléments de l'épigraphe de f^* :

$$\boxed{a_{x^*,\alpha} \text{ est une minorante affine de } f \iff (x^*, \alpha) \in \operatorname{epi} f^*.} \tag{3.31}$$

Comme une fonction est entièrement spécifiée par son épigraphe, on peut dire que la conjuguée f^* de f est la fonction qui décrit toutes les minorantes affines de f.

La convexité de f^* mise en évidence par la proposition ci-dessous est remarquable ; on se rappelle en effet que f n'est, elle, pas nécessairement convexe. On note $f \not\equiv -\infty$ (resp. $f \not\equiv +\infty$) pour signifier que f n'est pas identiquement égale à $-\infty$ (resp. $+\infty$) et on note $f > -\infty$ (resp. $f < +\infty$) pour exprimer le fait que f ne prend pas la valeur $-\infty$ (resp. $+\infty$).

Proposition 3.37 (conjuguée convexe fermée) *La fonction conjuguée f^* d'une fonction $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ est convexe et fermée. Par ailleurs, on a les équivalences suivantes*

$$f \not\equiv +\infty \iff f^* > -\infty \iff f^* \not\equiv -\infty, \tag{3.32}$$

$$f \text{ a une minorante affine} \iff f^* \not\equiv +\infty, \tag{3.33}$$

$$f \text{ propre avec minorante affine} \iff f^* \text{ propre} \iff f^* \in \mathrm{C}\overline{\mathrm{onv}}(\mathbb{E}). \tag{3.34}$$

Démonstration. Certains arguments seront donnés plusieurs fois, de manière à garder une démonstrstion structurée.

[f^* est convexe fermée] Il y a trois cas possibles.

- Si f prend la valeur $-\infty$, alors $f^* \equiv +\infty$ (par la définition de f^*), une fonction convexe et fermée (l'épigraphe de f^* est vide, donc convexe et fermé).
- Si $f \equiv +\infty$, alors $f^* \equiv -\infty$ (par la définition de f^*), une fonction convexe et fermée (l'épigraphe de f^* est égal à $\mathbb{E} \times \mathbb{R}$, donc convexe et fermé).
- Si f est propre, f^* s'écrit comme le supremum de la famille indicée par $x \in \operatorname{dom} f$ (non vide) des fonctions affines (donc convexes et fermées) $x^* \mapsto \langle x^*, x\rangle - f(x)$. On en déduit que f^* est elle-même convexe et fermée (proposition 3.33).

[(3.32)] Si $f \not\equiv +\infty$, il existe un $x_0 \in \mathbb{E}$ tel que $f(x_0) < +\infty$; dans ce cas, quel que soit $x^* \in \mathbb{E}$, $f^*(x^*) \geqslant \langle x^*, x_0\rangle - f(x_0) > -\infty$, si bien que $f^* > -\infty$. Évidemment, $f^* > -\infty$ implique que $f^* \not\equiv -\infty$. Enfin, si $f \equiv +\infty$, alors $f^* \equiv -\infty$.

[(3.33)] Soit $x \mapsto \langle x_0^*, x\rangle + \alpha_0$ une minorante affine de f, avec $x_0^* \in \mathbb{E}$ et $\alpha_0 \in \mathbb{R}$; alors, pour tout $x \in \mathbb{E}$, $f(x) \geqslant \langle x_0^*, x\rangle + \alpha_0$; on en déduit que $-\alpha_0 \geqslant \sup\{\langle x_0^*, x\rangle - f(x) : x \in \mathbb{E}\} = f^*(x_0^*)$ et donc que $f^* \not\equiv +\infty$. La réciproque est obtenue par le raisonnement inverse : si $f^* \not\equiv +\infty$, il existe $x_0^* \in \mathbb{E}$ et $\alpha_0 \in \mathbb{R}$ tels que $f^*(x_0^*) \leqslant -\alpha_0$; alors, pour tout $x \in \mathbb{E}$, $\langle x_0^*, x\rangle - f(x) \leqslant -\alpha_0$, si bien que $x \mapsto \langle x_0^*, x\rangle + \alpha_0$ est une minorante affine de f.

[(3.34)] Par (3.32) et (3.33), f est propre et a une minorante affine si, et seulement si, f^* est propre. Enfin, il revient au même de dire que f^* est propre et que $f^* \in \mathrm{C}\overline{\mathrm{onv}}(\mathbb{E})$, parce que f^* est toujours convexe et fermée. □

3.5.2 Biconjuguée

On peut bien sûr appliquer la transformation de Legendre-Fenchel à la fonction conjuguée $f^* : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$; on obtient ainsi la biconjuguée de f, notée f^{**}.

Définition 3.38 Soit $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ une fonction (non nécessairement convexe) et $f^* : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ sa conjuguée. La *fonction biconjuguée* de f est la fonction $f^{**} : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ définie en $x \in \mathbb{E}$ par

$$\boxed{f^{**}(x) = \sup_{x^* \in \mathbb{E}} \Big(\langle x^*, x\rangle - f^*(x^*)\Big).}$$

□

Proposition 3.39 (biconjuguée convexe fermée) *La fonction biconjuguée f^{**} d'une fonction $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ est convexe et fermée. De plus*

$$f \text{ est propre et a une minorante affine} \iff f^{**} \in \mathrm{C}\overline{\mathrm{onv}}(\mathbb{E}). \qquad (3.35)$$

Démonstration. La biconjuguée est convexe et fermée en tant que conjuguée (proposition 3.37).

Si f est propre et a une minorante affine, alors f^* est propre par (3.34). Mais f^* a aussi une minorante affine puisque, avec $x_0 \in \operatorname{dom} f \neq \varnothing$, on a

$$\forall\, x^* \in \mathbb{E} : \qquad f^*(x^*) \geqslant \langle x^*, x_0\rangle - f(x_0).$$

Dès lors, $f^{**} \in \mathrm{C}\overline{\mathrm{onv}}(\mathbb{E})$ par (3.34) appliqué à f^* au lieu de f.

Réciproquement, si $f^{**} \in \mathrm{C}\overline{\mathrm{onv}}(\mathbb{E})$, alors f^* est propre par (3.34) appliqué à f^*. On en déduit que f est propre et a une minorante affine, à nouveau par (3.34). □

Si l'argument x^* de f^* est une forme linéaire (identifiée à un élément de $\mathbb{E}$ au moyen du produit scalaire $\langle\cdot,\cdot\rangle$), l'argument x de f^{**} est dans l'espace de départ $\mathbb{E}$. On peut alors se demander s'il y a un lien entre f et f^{**}. La proposition suivante examine cette question.

Proposition 3.40 (enveloppe convexe fermée) *Soit $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ une fonction propre ayant une minorante affine. Alors*
1) *f^{**} est l'enveloppe supérieure des minorantes affines de f,*
2) *$f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E}) \implies f^{**} = \bar{f}$ (l'adhérence de f),*
3) *$f \in \mathrm{C\overline{onv}}(\mathbb{E}) \iff f^{**} = f$,*
4) *la transformation de Legendre-Fenchel $f \mapsto f^*$ est une bijection sur l'ensemble $\mathrm{C\overline{onv}}(\mathbb{E})$.*

Démonstration. 1) Soit $x \in \mathbb{E}$. La valeur en x de l'enveloppe supérieure des minorantes affines de f s'écrit

$$\begin{aligned}
\sup_{\substack{x^*\in\mathbb{E},\ \alpha\in\mathbb{R}\\ \langle x^*,y\rangle-\alpha\leqslant f(y),\ \forall\, y\in\mathbb{E}}} \Big(\langle x^*,x\rangle-\alpha\Big) &= \sup_{x^*\in\mathbb{E}} \sup_{\substack{\alpha\in\mathbb{R}\\ \langle x^*,y\rangle-\alpha\leqslant f(y),\ \forall\, y\in\mathbb{E}}} \Big(\langle x^*,x\rangle-\alpha\Big)\\
&= \sup_{x^*\in\mathbb{E}} \sup_{\alpha=f^*(x^*)} \Big(\langle x^*,x\rangle-\alpha\Big)\\
&= \sup_{x^*\in\mathbb{E}} \Big(\langle x^*,x\rangle-f^*(x^*)\Big)\\
&= f^{**}(x).
\end{aligned}$$

2) Si $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$, $\bar{f}$ est l'enveloppe supérieure des minorante affines de f (proposition **??**), c'est-à-dire f^{**} d'après le point 1.

3) Si $f \in \mathrm{C\overline{onv}}(\mathbb{E})$, $\mathrm{epi}\, f = \mathrm{adh}(\mathrm{epi}\, f)$ [car $\mathrm{epi}\, f$ est fermé] $= \mathrm{epi}\, \bar{f}$ [par définition de $\bar{f}$] $= \mathrm{epi}\, f^{**}$ [par le point 2, donc $f = f^{**}$. Inversement, l'égalité $f^{**} = f$ implique que f est convexe et fermée (car $f^{**} \in \mathrm{C\overline{onv}}(\mathbb{E})$).

4) D'après la proposition 3.37, la transformation de conjugaison $\mathcal{C} : f \mapsto f^*$ est bien définie sur $\mathrm{C\overline{onv}}(\mathbb{E})$ et est de toute façon à valeurs dans $\mathrm{C\overline{onv}}(\mathbb{E})$. Elle est injective, car si f_1 et $f_2 \in \mathrm{C\overline{onv}}(\mathbb{E})$ sont telles que $f_1^* = f_2^*$, on a $f_1^{**} = f_2^{**}$ et donc $f_1 = f_2$ d'après le point 3. Elle est surjective, car si $g \in \mathrm{C\overline{onv}}(\mathbb{E})$, on a $\mathcal{C}(g^*) = g^{**} = g$ d'après le point 3 ; donc g est l'image de g^* par $\mathcal{C}$. □

Ce résultat permet de comparer les valeurs de f^{**} et de f.

Corollaire 3.41 (comparaison de f^{**} et f) *Quelle que soit $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$, on a*

$$f^{**} \leqslant f.$$

Si $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$ et $x \in \mathrm{dom}\, f$, alors

$$f^{**}(x) = f(x) \qquad \Longleftrightarrow \qquad f \text{ est s.c.i. en } x.$$

Démonstration. Si $f \equiv +\infty$, on a certainement $f^{**} \leqslant f$. Si f n'a pas de minorante affine, $f^* \equiv +\infty$ par (3.33), puis $f^{**} \equiv -\infty \leqslant f$. Dans les autres cas, f^{**} est l'enveloppe supérieure des minorantes affines de f (point 1 de la proposition 3.40), si

bien que $f^{**} \leqslant f$ (quel que soit $x \in \mathbb{E}$, $f^{**}(x)$ est le supremum de valeurs plus petites que $f(x)$).

D'après la proposition **??**, lorsque $x \in \operatorname{dom} f$, on a $f(x) = \bar{f}(x)$ si, et seulement si, f est s.c.i. en x. Le résultat est alors une conséquence du fait que $\bar{f} = f^{**}$ lorsque $f \in \operatorname{Conv}(\mathbb{E})$ (point 2 de la proposition 3.40). □

D'après la proposition 3.40, il est naturel d'appeler aussi la biconjuguée f^{**}, l'*enveloppe convexe fermée* de f. La figure 3.7 donne la biconjuguée de la fonction représentée à la figure 3.6.

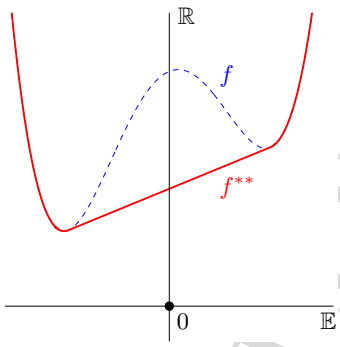


Fig. 3.7. Fonction biconjuguée f^{**} (en trait plein) de la fonction f de la figure 3.6 (en tirets)

La proposition suivante montre qu'il ne sert à rien de réitérer le processus de conjugaison au-delà du second ordre : la tri-conjuguée se confond avec la conjuguée.

Proposition 3.42 (triconjuguée) *Soit $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ une fonction propre ayant une minorante affine. Alors $(f^{**})^* = f^*$.*

Démonstration. D'après le corollaire 3.41, $f^{**} \leqslant f$ et donc $(f^{**})^* \geqslant f^*$ (exercice 3.16-(3)). Inversement, pour x^* fixé, $f^{**}(x) \geqslant \langle x^*, x\rangle - f^*(x^*)$ pour tout $x \in \mathbb{E}$, et donc

$$(f^{**})^*(x^*) = \sup_{x\in\mathbb{E}}\Big(\langle x^*, x\rangle - f^{**}(x)\Big) \leqslant f^*(x^*).$$

□

3.5.3 Règles de calcul

Inf-image sous une application linéaire

Rappelons la définition de l'inf-image $f \operatorname{\underline{\vee}} A$ d'une fonction f sous une application linéaire A, introduite à la section 3.2. On se donne deux espaces euclidiens $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ (on aura besoin ici d'un produit scalaire sur $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$, alors que cette structure n'est pas nécessaire dans la définition de $f \operatorname{\underline{\vee}} A$), une fonction $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ et une application linéaire $A : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$. Alors $f \operatorname{\underline{\vee}} A : \mathbb{F} \to \overline{\mathbb{R}}$ est définie en $y \in \mathbb{F}$ par

$$(f \mathbin{\underline{\vee}} A)(y) = \inf_{\substack{x\in\mathbb{E}\\ Ax=y}} f(x). \tag{3.36}$$

Nous donnons à la proposition 3.43 l'expression de la conjuguée de $f \mathbin{\underline{\vee}} A$. La proposition 3.44 énonce des conditions assurant que $f \mathbin{\underline{\vee}} A$ est dans $\mathrm{Conv}(\mathbb{F})$ ou $\overline{\mathrm{Conv}}(\mathbb{F})$.

Proposition 3.43 (conjuguée de $f \mathbin{\underline{\vee}} A$) *Dans les conditions définies ci-dessus, on a*

$$(f \mathbin{\underline{\vee}} A)^* = f^* \circ A^*. \tag{3.37}$$

De plus, si f est propre et a une minorante affine et si l'application linéaire A vérifie

$$\mathcal{R}(A^*) \cap \operatorname{dom} f^* \neq \varnothing,$$

alors $f \mathbin{\underline{\vee}} A$ est propre et a une minorante affine.

Démonstration. Pour $y^* \in \mathbb{F}$, on trouve

$$\begin{aligned}
(f \mathbin{\underline{\vee}} A)^*(y^*) &= \sup_{y\in\mathbb{F}} \left(\langle y^*, y\rangle - \inf_{\substack{x\in\mathbb{E}\\ Ax=y}} f(x) \right) \\
&= \sup_{\substack{(x,y)\in\mathbb{E}\times\mathbb{F}\\ Ax=y}} \Big(\langle y^*, y\rangle - f(x) \Big) \\
&= \sup_{x\in\mathbb{E}} \Big(\langle y^*, Ax\rangle - f(x) \Big) \\
&= \sup_{x\in\mathbb{E}} \Big(\langle A^* y^*, x\rangle - f(x) \Big) \\
&= f^*(A^* y^*).
\end{aligned}$$

Supposons à présent que f est propre et a une minorante affine et que $\mathcal{R}(A^*) \cap \operatorname{dom} f^* \neq \varnothing$. Alors, clairement, $f \mathbin{\underline{\vee}} A \not\equiv +\infty$ (elle prend une valeur finie sur $A(\operatorname{dom} f)$, qui n'est pas vide). D'autre part, par hypothèse, il existe un $x_0^* := A^* y_0^* \in \operatorname{dom} f^*$. Alors l'inégalité $+\infty > f^*(x_0^*) \geqslant \langle x_0^*, x\rangle - f(x)$ valable pour tout $x \in \mathbb{E}$ conduit à

$$+\infty > f(x) \geqslant \langle y_0^*, Ax\rangle - (f^* \circ A^*)(y_0^*), \quad \text{pour tout } x \in \operatorname{dom} f.$$

Évidemment $(f \mathbin{\underline{\vee}} A)(y) = +\infty$ si $y \notin A(\operatorname{dom} f)$. Soit à présent $y \in A(\operatorname{dom} f)$. En prenant l'infimum ci-dessus pour les $x \in \operatorname{dom} f$ vérifiant $Ax = y$, on trouve

$$(f \mathbin{\underline{\vee}} A)(y) \geqslant \langle y_0^*, y\rangle - (f^* \circ A^*)(y_0^*), \quad \text{pour tout } y \in \mathbb{F}.$$

Dès lors $f \mathbin{\underline{\vee}} A$ a une minorante affine.

Proposition 3.44 (régularité de $f \veebar A$) *Soient $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ deux espaces euclidiens, $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ une fonction et $A : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ une application linéaire.*
1) *Si $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$ et si A vérifie $\mathcal{R}(A^*) \cap \mathrm{dom}\, f^* \neq \varnothing$, alors $f \veebar A \in \mathrm{Conv}(\mathbb{F})$.*
2) *Si $f \in \overline{\mathrm{Conv}}(\mathbb{E})$ et si A vérifie $\mathcal{R}(A^*) \cap (\mathrm{dom}\, f^*)^\circ \neq \varnothing$, alors $f \veebar A \in \overline{\mathrm{Conv}}(\mathbb{F})$. De plus, l'infimum dans (3.36) est atteint lorsqu'il est fini.*

Démonstration. 1) Comme $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$, $f \veebar A$ est convexe (proposition **??**). D'autre part, comme $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ est propre avec une minorante affine (proposition 3.6) et que $\mathcal{R}(A^*) \cap \mathrm{dom}\, f^* \neq \varnothing$, $f \veebar A$ est également propre avec une minorante affine (proposition 3.43). Donc $f \veebar A \in \mathrm{Conv}(\mathbb{F})$.

2) Pour montrer que $f \veebar A$ est fermée, on suppose que l'on a des suites $\{y_k\} \subseteq \mathbb{F}$ et $\{\alpha_k\} \subseteq \mathbb{R}$ telles que

$$(f \veebar A)(y_k) \leqslant \alpha_k, \qquad y_k \to y \qquad \text{et} \qquad \alpha_k \to \alpha.$$

Il suffit de montrer que $(f \veebar A)(y) \leqslant \alpha$. D'après la définition de $f \veebar A$, on peut trouver une suite $\{\varepsilon_k\} \downarrow 0$ et une suite $\{x_k\} \subseteq \mathbb{E}$ telles que

$$f(x_k) \leqslant \alpha_k + \varepsilon_k, \qquad Ax_k = y_k, \qquad y_k \to y \qquad \text{et} \qquad \alpha_k \to \alpha.$$

Il s'agit de passer à la limite dans ces relations.

La suite $\{x_k\}$ n'étant pas nécessairement bornée, on cherche à construire une autre suite $\{\bar{x}_k\} \subseteq \mathbb{E}$, bornée elle, qui laisse inchangés f et A. Si l'on se donne $x_1^* \in \mathcal{R}(A^*) \cap \mathrm{dom}\, f^*$, qui est non vide par hypothèse, il revient au même d'imposer

$$f(\bar{x}_k) - \langle x_1^*, \bar{x}_k \rangle = f(x_k) - \langle x_1^*, x_k \rangle \qquad \text{et} \qquad A\bar{x}_k = Ax_k,$$

puisqu'alors $f(\bar{x}_k) = f(x_k)$ (en effet $x_1^* \in \mathcal{R}(A^*)$ et $A\bar{x}_k = Ax_k$ impliquent que $\langle x_1^*, \bar{x}_k \rangle = \langle x_1^*, x_k \rangle$). Remarquons que $f(\cdot) - \langle x_1^*, \cdot \rangle = f^{**}(\cdot) - \langle x_1^*, \cdot \rangle$ n'est autre que la conjuguée φ^* de la fonction $\varphi \in \overline{\mathrm{Conv}}(\mathbb{E})$ définie par $\varphi(x^*) := f^*(x^* + x_1^*)$. Comme $0 \in \mathrm{dom}\, \varphi$, $\mathbb{E}_0 := \mathrm{aff}\, \mathrm{dom}\, \varphi$ est un sous-espace vectoriel. Soit $\bar{x}_k$ la projection orthogonale de x_k sur $\mathbb{E}_0 - \mathcal{R}(A^*)$. D'une part, $x_k - \bar{x}_k \in \mathcal{R}(A^*)^\perp = \mathcal{N}(A)$, si bien que $A(x_k) = A(\bar{x}_k)$. D'autre part, $x_k - \bar{x}_k \in \mathbb{E}_0^\perp$, si bien que

$$\varphi^*(x_k) = \sup_{x^* \in \mathbb{E}_0} \langle x^*, x_k \rangle - \varphi(x^*) = \sup_{x^* \in \mathbb{E}_0} \langle x^*, \bar{x}_k \rangle - \varphi(x^*) = \varphi^*(\bar{x}_k).$$

On a donc

$$f(\bar{x}_k) \leqslant \alpha_k + \varepsilon_k, \qquad A\bar{x}_k = y_k, \qquad y_k \to y \qquad \text{et} \qquad \alpha_k \to \alpha.$$

Si $\{\bar{x}_k\}$ est bornée, on peut en extraire une sous-suite convergente, disons vers $\bar{x}$. Par semi-continuité inférieure de f, on a $f(\bar{x}) \leqslant \liminf f(\bar{x}_k)$. En passant à la limite ci-dessus, on a

$$f(\bar{x}) \leqslant \alpha \qquad \text{et} \qquad A\bar{x} = y.$$

Donc $(f \veebar A)(y) \leqslant \alpha$ et $(f \veebar A)$ est fermée.

Remarquons que si l'on prend ci-dessus $y_k = y$ et $\alpha_k = (f \veebar A)(y)$, pour tout k, la suite $\{x_k\}$ devient une suite minimisante du problème de minimisation dans (3.36). Le raisonnement ci-dessus montre alors que ce problème a une solution.

Il reste donc à montrer que $\{\bar{x}_k\}$ est bornée. Observons que $\bar{x}_k \in \mathbb{E}_1 := \mathbb{E}_0 - \mathcal{R}(A^*) = \mathrm{vect}(\mathrm{dom}\,\varphi - \mathcal{R}(A^*))$. Dès lors, pour montrer que $\{\bar{x}_k\}$ est bornée, il suffit de monter que, quel que soit $z \in \mathbb{E}_1$, $\{\langle z, \bar{x}_k\rangle\}$ est bornée (par l'absurde : on prend pour z, un point d'adhérence de $\{\bar{x}_k/\|\bar{x}_k\|\}$). Soit donc $z \in \mathbb{E}_1$. Par hypothèse, $0 \in (\mathrm{dom}\, f^*)^\ominus - \mathcal{R}(A^*) = (\mathrm{dom}\, f^* - \mathcal{R}(A^*))^\ominus = (\mathrm{dom}\,\varphi - \mathcal{R}(A^*))^\ominus$, puisque $\mathrm{dom}\, f^* = \mathrm{dom}\,\varphi - x_1^*$ et que $x_1^* \in \mathcal{R}(A^*)$. Donc $tz \in \mathrm{dom}\,\varphi - \mathcal{R}(A^*)$ pour $t > 0$ assez petit : il existe $x^* \in \mathrm{dom}\,\varphi$ et $y^* \in \mathbb{F}$ tels que $tz = x^* - A^*y^*$. En introduisant v^* tel que $x_1^* = A^*v^*$, on trouve

$$\begin{aligned} t\langle z, \bar{x}_k\rangle &= \langle x^*, \bar{x}_k\rangle - \langle A^*y^*, \bar{x}_k\rangle \\ &\leqslant \varphi(x^*) + \varphi^*(\bar{x}_k) - \langle y^*, A\bar{x}_k\rangle \\ &= \varphi(x^*) + \varphi^*(x_k) - \langle y^*, Ax_k\rangle \\ &= \varphi(x^*) + f(x_k) - \langle y^* + v^*, Ax_k\rangle \\ &\leqslant \varphi(x^*) + \alpha_k + \varepsilon_k - \langle y^* + v^*, y_k\rangle, \end{aligned}$$

dont le membre de droite est borné (il converge vers $\varphi(x^*) + \alpha - \langle y^* + v^*, y\rangle \in \mathbb{R}$). □

Pré-composition avec une application linéaire

D'après la proposition 3.31, si $A : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ est une application linéaire et si $g \in \overline{\mathrm{Conv}}(\mathbb{F})$ vérifie $\mathcal{R}(A) \cap \mathrm{dom}\, g \neq \varnothing$, alors $g \circ A \in \overline{\mathrm{Conv}}(\mathbb{E})$, si bien que $(g \circ A)^{**} = g \circ A$. On s'intéresse ci-dessous au calcul de la biconjuguée $(g \circ A)^{**}$ lorsque la fonction $g \in \mathrm{Conv}(\mathbb{F})$ n'est pas nécessairement fermée, mais vérifie une condition plus forte que la condition minimale $\mathcal{R}(A) \cap \mathrm{dom}\, g \neq \varnothing$ assurant la propreté de $g \circ A$.

Proposition 3.45 (biconjuguée de $g \circ A$) *Soient $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ deux espaces vectoriels, $A : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ une application linéaire et $g \in \mathrm{Conv}(\mathbb{F})$ une fonction vérifiant $\mathcal{R}(A) \cap (\mathrm{dom}\, g)^\ominus \neq \varnothing$. Alors $g \circ A \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$ et*

$$(g \circ A)^{**} = g^{**} \circ A.$$

Démonstration. On a déjà vu que $g \circ A \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$. Comme dans la démonstration de la proposition 3.31, on introduit l'application linéaire

$$B : \mathbb{E} \times \mathbb{R} \to \mathbb{F} \times \mathbb{R} : (x, \alpha) \mapsto (Ax, \alpha)$$

qui permet d'écrire $\mathrm{epi}(h \circ A) = B^{-1}(\mathrm{epi}\, h)$, quelle que soit la fonction $h : \mathbb{F} \to \overline{\mathbb{R}}$. D'après (3.3) et grâce à la condition de propreté renforcée $\mathcal{R}(A) \cap (\mathrm{dom}\, g)^\ominus \neq \varnothing$:

$$\begin{aligned} B^{-1}((\mathrm{epi}\, g)^\ominus) &= B^{-1}\Big(\{(y, \alpha) : y \in (\mathrm{dom}\, g)^\ominus,\ g(y) < \alpha\}\Big) \\ &= \{(x, \alpha) : Ax \in (\mathrm{dom}\, g)^\ominus,\ g(Ax) < \alpha\} \\ &\neq \varnothing. \end{aligned}$$

Ensuite

$$\begin{aligned}
\operatorname{epi}((g\circ A)^{**}) &= \overline{\operatorname{epi}(g\circ A)}, && \text{[proposition 3.40, point 2]}\\
&= \overline{B^{-1}(\operatorname{epi} g)}\\
&= B^{-1}(\overline{\operatorname{epi} g}), && \text{[proposition 2.16 et } B^{-1}((\operatorname{epi} g)^{\circ})\neq\varnothing\text{]}\\
&= B^{-1}(\operatorname{epi} g^{**})\\
&= \operatorname{epi}(g^{**}\circ A).
\end{aligned}$$

On a donc bien établi que $(g\circ A)^{**} = g^{**}\circ A$. □

Proposition 3.46 (conjuguée de $g\circ A$) *Soient $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ deux espaces euclidiens, $A:\mathbb{E}\to\mathbb{F}$ une application linéaire et $g\in\operatorname{Conv}(\mathbb{F})$.*

1) *Si $g\in\operatorname{C\overline{onv}}(\mathbb{F})$ et si $\mathcal{R}(A)\cap\operatorname{dom} g\neq\varnothing$, alors $g\circ A\in\operatorname{C\overline{onv}}(\mathbb{E})$ et*

$$(g\circ A)^{*} = (g^{*}\mathbin{\overline{\square}} A^{*})^{**}. \tag{3.38}$$

2) *Si g est convexe polyédrique et si $\mathcal{R}(A)\cap\operatorname{dom} g\neq\varnothing$, alors*

$$(g\circ A)^{*} = g^{*}\mathbin{\overline{\square}} A^{*}. \tag{3.39}$$

De plus, l'infimum dans la définition de $(g^{*}\mathbin{\overline{\square}} A^{*})(x^{*})$ est atteint s'il est fini.

3) *Si $g\in\operatorname{Conv}(\mathbb{F})$ et si $\mathcal{R}(A)\cap(\operatorname{dom} g)^{\circ}\neq\varnothing$, alors $g\circ A\in\operatorname{Conv}(\mathbb{E})$ et (3.39) a lieu. De plus, l'infimum dans la définition de $(g^{*}\mathbin{\overline{\square}} A^{*})(x^{*})$ est atteint s'il est fini.*

Démonstration. 1) D'après la proposition 3.31, $g\circ A\in\operatorname{C\overline{onv}}(\mathbb{E})$. On applique alors la proposition 3.43 avec $f := g^{*}$ et $A := A^{*}$ (ses hypothèses sont vérifiées, car $g^{**}=g$) : (3.37) donne $(g^{*}\mathbin{\overline{\square}} A^{*})^{*} = g\circ A$, qui par conjugaison conduit à (3.38).

2) Si g est convexe polyédrique et si $\mathcal{R}(A)\cap\operatorname{dom} g\neq\varnothing$, alors, d'après le point 1, on a (3.38). Mais g^{*} est convexe polyédrique (exercice 3.15) et donc aussi $g^{*}\mathbin{\overline{\square}} A^{*}$ (proposition **??**), qui est donc fermée. Alors (3.38) donne (3.39). La proposition **??** nous apprend aussi que l'infimum dans la définition de $(g^{*}\mathbin{\overline{\square}} A^{*})(x^{*})$ est atteint s'il est fini.

3) D'après la proposition 3.31, $g\circ A\in\operatorname{Conv}(\mathbb{E})$. On peut appliquer le point 1 avec $g := g^{**}\in\operatorname{C\overline{onv}}(\mathbb{F})$, car $\mathcal{R}(A)\cap\operatorname{dom} g^{**}\supset\mathcal{R}(A)\cap(\operatorname{dom} g^{**})^{\circ} = \mathcal{R}(A)\cap(\operatorname{dom} g)^{\circ}$ [selon l'exercice 3.18 (2)] $\neq\varnothing$ [par hypothèse]. Ceci donne

$$(g^{**}\circ A)^{*} = (g^{*}\mathbin{\overline{\square}} A^{*})^{**}.$$

D'après la proposition 3.45 et grâce à l'hypothèse $\mathcal{R}(A)\cap(\operatorname{dom} g)^{\circ}\neq\varnothing$, $g^{**}\circ A = (g\circ A)^{**}$, si bien que $(g^{**}\circ A)^{*} = (g\circ A)^{*}$. D'autre part, d'après la proposition 3.44 (2) avec $f := g^{*}$ et $A := A^{*}$ et grâce au fait vu ci-dessus que $\mathcal{R}(A)\cap\operatorname{dom} g^{**}\neq\varnothing$, on voit que $g^{*}\mathbin{\overline{\square}} A^{*}$ est fermée (donc $(g^{*}\mathbin{\overline{\square}} A^{*})^{**} = g^{*}\mathbin{\overline{\square}} A^{*}$) et que l'infimum définissant $g^{*}\mathbin{\overline{\square}} A^{*}$ est atteint lorsqu'il est fini. □

Inf-convolution

Une inf-convolution peut se voir comme une inf-image sous une application linéaire, voir (**??**)–(**??**). En appliquant la proposition 3.43 à cette inf-image, on obtient le résultat suivant.

Proposition 3.47 (conjuguée de l'inf-convolution) *Soient $f_1, \dots, f_p : \mathbb{E} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ des fonctions propres telles que*

$$\bigcap_{1 \leqslant i \leqslant p} \operatorname{dom} f_i^* \neq \varnothing.$$

Alors $f_1 \boxplus \cdots \boxplus f_p$ est propre avec une minorante affine et

$$(f_1 \boxplus \cdots \boxplus f_p)^* = f_1^* + \cdots + f_p^*.$$

Démonstration. On applique donc la proposition 3.43. On sait que $f_1 \boxplus \cdots \boxplus f_p = f \barwedge A$, avec $f : \mathbb{E}^p \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ et $A : \mathbb{E}^p \to \mathbb{E}$ définies par

$$f(x_1, \dots, x_p) = f_1(x_1) + \cdots + f_p(x_p) \qquad \text{et} \qquad A(x_1, \dots, x_p) = x_1 + \cdots + x_p.$$

Exiger la propreté de f revient à demander celle des f_i. D'autre part, f a une minorante affine si, et seulement si, les f_i ont une minorante affine. On peut alors calculer f^* et A^* (la somme des $f_i^*(x_i^*)$ ci-dessous peut valoir $+\infty$, mais on est sûr de ne pas additionner $+\infty$ et $-\infty$) :

$$f^*(x_1^*, \dots, x_p^*) = f_1^*(x_1^*) + \cdots + f_p^*(x_p^*) \qquad \text{et} \qquad A^*(x^*) = (x^*, \dots, x^*).$$

Enfin la condition $\mathcal{R}(A^*) \cap \operatorname{dom} f^* \neq \varnothing$ s'écrit $\cap_i \operatorname{dom} f_i^* \neq \varnothing$. En conclusion, $f_1 \boxplus \cdots \boxplus f_p$ est propre avec une minorante affine et $(f_1 \boxplus \cdots \boxplus f_p)^* = (f \barwedge A)^* = f^* \circ A^* = f_1^* + \cdots + f_p^*$. □

Somme

Proposition 3.48 (conjuguée d'une somme) *Soient $f_1, \dots, f_p : \mathbb{E} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ des fonctions.*

1) *Si les $f_i \in \overline{\operatorname{Conv}}(\mathbb{E})$ et $\cap_i \operatorname{dom} f_i \neq \varnothing$, alors $f_1 + \cdots + f_p \in \overline{\operatorname{Conv}}(\mathbb{E})$, $f_1^* \boxplus \cdots \boxplus f_p^* \in \operatorname{Conv}(\mathbb{E})$ et*

$$(f_1 + \cdots + f_p)^* = (f_1^* \boxplus \cdots \boxplus f_p^*)^{**}. \tag{3.40}$$

2) *Si les $f_i \in \operatorname{Conv}(\mathbb{E})$ et $\cap_i (\operatorname{dom} f_i)^\ominus \neq \varnothing$ (on peut remplacer $(\operatorname{dom} f_i)^\ominus$ par $\operatorname{dom} f_i$ dans cette condition si f_i est polyédrique), alors $f_1 + \cdots + f_p \in$*

$\mathrm{Conv}(\mathbb{E})$, $f_1^* \boxplus \cdots \boxplus f_p^* \in \mathrm{C}\overline{\mathrm{onv}}(\mathbb{E})$ *et*

$$(f_1 + \cdots + f_p)^* = f_1^* \boxplus \cdots \boxplus f_p^*. \tag{3.41}$$

De plus, l'infimum dans la définition de $(f_1^* \boxplus \cdots \boxplus f_p^*)(x^*)$ *est atteint lorsqu'il est fini.*

Démonstration. 1) Supposons que les $f_i \in \mathrm{C}\overline{\mathrm{onv}}(\mathbb{E})$ et que $\cap_i \operatorname{dom} f_i \neq \varnothing$. Les fonctions f_i^* vérifient bien les hypothèses demandées sur les f_i dans la proposition 3.47. On en déduit que $f_1^* \boxplus \cdots \boxplus f_p^*$ est propre avec une minorante affine et que $(f_1^* \boxplus \cdots \boxplus f_p^*)^* = f_1 + \cdots + f_p$. Donc $f_1 + \cdots + f_p \in \mathrm{C}\overline{\mathrm{onv}}(\mathbb{E})$ (proposition 3.37) et $f_1^* \boxplus \cdots \boxplus f_p^* \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$ ($f_1^* \boxplus \cdots \boxplus f_p^*$ est aussi convexe par la proposition 3.35). En prenant la conjuguée de la dernière identité, on obtient (3.40).

2a) Si toutes les fonctions f_i sont convexes polyédriques et que l'on a seulement $\cap_i \operatorname{dom} f_i \neq \varnothing$, le point 1 et l'exercice 3.15 donnent le résultat énoncé au point 2. En effet, dans ce cas, les $f_i \in \mathrm{C}\overline{\mathrm{onv}}(\mathbb{E})$ comme fonctions convexes polyédriques, les $f_i^* \in \mathrm{C}\overline{\mathrm{onv}}(\mathbb{E})$ comme conjuguées de fonctions convexes polyédriques et $f_1^* \boxplus \cdots \boxplus f_p^* \in \mathrm{C}\overline{\mathrm{onv}}(\mathbb{E})$ comme inf-convolution de fonctions convexes polyédriques. De plus l'infimum dans la définition de $(f_1^* \boxplus \cdots \boxplus f_p^*)(x^*)$ est atteint lorsqu'il est fini.

2b) Supposons à présent que les $f_i \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$ et que $\cap_i (\operatorname{dom} f_i)^\ominus \neq \varnothing$. On se ramène à la proposition 3.46 (point 2) en écrivant $f_1 + \cdots + f_p = g \circ A$, avec $g \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E}^p)$ et $A : \mathbb{E} \to \mathbb{E}^p$ linéaire, définies par

$$g(x_1, \ldots, x_p) = f_1(x_1) + \cdots + f_p(x_p) \qquad \text{et} \qquad A(x) = (x, \ldots, x).$$

Il faut vérifier que $\mathcal{R}(A) \cap (\operatorname{dom} g)^\ominus \neq \varnothing$. On a $\mathcal{R}(A) = \{(x, \ldots, x) : x \in \mathbb{E}\}$ et $(\operatorname{dom} g)^\ominus = (\operatorname{dom} f_1 \times \cdots \times \operatorname{dom} f_p)^\ominus = (\operatorname{dom} f_1)^\ominus \times \cdots \times (\operatorname{dom} f_p)^\ominus$ (proposition 2.16), si bien que $\mathcal{R}(A) \cap (\operatorname{dom} g)^\ominus = \{(x, \ldots, x) : x \in (\operatorname{dom} f_1)^\ominus \cap \cdots \cap (\operatorname{dom} f_p)^\ominus\}$, qui est non vide par hypothèse. Dès lors $f_1 + \cdots + f_p \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$ et

$$(f_1 + \cdots + f_p)^*(x^*) = (g \circ A)^*(x^*) = (g^* \veebar A^*)(x^*) = \inf_{\substack{x_1^*, \ldots, x_p^* \in \mathbb{E} \\ A^*(x_1^*, \ldots, x_p^*) = x^*}} g^*(x_1^*, \ldots, x_p^*).$$

De plus, l'infimum ci-dessus est atteint lorsqu'il est fini. On vérifie aisément que $g^*(x_1^*, \ldots, x_p^*) = f_1^*(x_1^*) + \cdots + f_p^*(x_p^*)$ et que $A^*(x_1^*, \ldots, x_p^*) = x_1^* + \cdots + x_p^*$, ce qui permet de conclure.

2c) Considérons à présent le cas mixte où les $f_i \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$, où $f_1, \ldots, f_k$ sont polyédriques ($0 < k < p$) et où $(\cap_{1 \leqslant i \leqslant k} \operatorname{dom} f_i) \cap (\cap_{k+1 \leqslant i \leqslant p} (\operatorname{dom} f_i)^\ominus) \neq \varnothing$. On note

$$g_1 = f_1 + \cdots + f_k \qquad \text{et} \qquad g_2 = f_{k+1} + \cdots + f_p.$$

D'après les points 2a et 2b, on a

$$\begin{aligned} g_1^*(y_1^*) &= \inf\{f_1^*(x_1^*) + \cdots + f_k^*(x_k^*) : x_1^* + \cdots + x_k^* = y_1^*\} \\ g_2^*(y_2^*) &= \inf\{f_{k+1}^*(x_{k+1}^*) + \cdots + f_p^*(x_p^*) : x_{k+1}^* + \cdots + x_p^* = y_2^*\}, \end{aligned}$$

avec des bornes inférieures atteintes lorsqu'elles sont finies. Il suffit donc de montrer que

$$(g_1+g_2)^*(x^*)=\inf\{g_1^*(y_1^*)+g_2^*(y_2^*):y_1^*+y_2^*=x^*\} \tag{3.42}$$

et que la borne inférieure est atteinte si elle est finie, car alors

$$\begin{aligned}(f_1+\cdots+f_p)^*(x^*) &= (g_1+g_1)^*(x^*)\\ &= \inf_{y_1^*+y_2^*=x^*}\Big(g_1^*(y_1^*)+g_2^*(y_2^*)\Big) \qquad (3.43)\\ &= \inf_{y_1^*+y_2^*=x^*}\Big(\inf_{x_1^*+\cdots+x_k^*=y_1^*}\Big(f_1^*(x_1^*)+\cdots+f_k^*(x_k^*)\Big)\\ &\qquad +\inf_{x_{k+1}^*+\cdots+x_p^*=y_2^*}\Big(f_{k+1}^*(x_{k+1}^*)+\cdots+f_p^*(x_p^*)\Big)\Big)\\ &= \inf_{x_1^*+\cdots+x_p^*=x^*}\Big(f_1^*(x_1^*)+\cdots+f_p^*(x_p^*)\Big).\end{aligned}$$

De plus, si $(f_1+\cdots+f_p)^*(x^*)$ est fini, l'infimum en (3.43) est atteint par des y_i^* (c'est ce que l'on démontrera), si bien que les $g_i(y_i^*)$ sont finis et les autres bornes inférieures sont également atteintes. Montrons donc (3.42) et l'affirmation qui suit.

On note $\mathcal{A}_2:=\operatorname{aff}\operatorname{dom}g_2$. Clairement, $\operatorname{dom}g_1=\cap_{1\leqslant i\leqslant k}\operatorname{dom}f_i$ et $(\operatorname{dom}g_2)^{\ominus}=(\cap_{k+1\leqslant i\leqslant p}\operatorname{dom}f_i)^{\ominus}=\cap_{k+1\leqslant i\leqslant p}(\operatorname{dom}f_i)^{\ominus}$, car cette dernière intersection est supposée non vide (proposition 2.16). Alors $(\operatorname{dom}g_1)\cap(\operatorname{dom}g_2)^{\ominus}\neq\varnothing$, par hypothèse. Il en découle (voir l'exercice 2.10)

$$(\mathcal{A}_2\cap\operatorname{dom}g_1)^{\ominus}\cap(\operatorname{dom}g_2)^{\ominus}\neq\varnothing.$$

On voit que l'on peut appliquer le point 2b aux fonctions

$$h_1=g_1+\mathcal{I}_{\mathcal{A}_2}\in\operatorname{Conv}(\mathbb{E})$$

et g_2, qui ont un point commun dans l'intérieur relatif de leur domaine. Comme $g_1+g_2=h_1+g_2$, on trouve

$$(g_1+g_2)^*(x^*)=(h_1+g_2)^*(x^*)=\inf_{z_1^*+z_2^*=x^*}\Big(h_1^*(z_1^*)+g_2^*(z_2^*)\Big),$$

avec un infimum atteint s'il est fini. On peut aussi calculer h_1^* par le point 2a, car g_1 et $\mathcal{I}_{\mathcal{A}_2}$ sont polyédriques (exercice 3.15) et ont des domaines qui s'intersectent :

$$h_1^*(z_1^*)=\inf_{y_1^*+z^*=z_1^*}\Big(g_1^*(y_1^*)+\mathcal{I}_{\mathcal{A}_2}^*(z^*)\Big),$$

avec un infimum atteint s'il est fini. En injectant ci-dessus, on trouve

$$(g_1+g_2)^*(x^*)=\inf_{y_1^*+z^*+z_2^*=x^*}\Big(g_1^*(y_1^*)+\mathcal{I}_{\mathcal{A}_2}^*(z^*)+g_2^*(z_2^*)\Big),$$

avec un infimum atteint s'il est fini. On peut maintenant regrouper les deux derniers termes, car $\mathcal{I}_{\mathcal{A}_2}\in\operatorname{Conv}(\mathbb{E})$ et $g_2\in\operatorname{Conv}(\mathbb{E})$ ont un point commun dans l'intérieur relatif de leur domaine ($(\operatorname{dom}\mathcal{I}_{\mathcal{A}_2})^{\ominus}=\mathcal{A}_2\supseteq(\operatorname{dom}g_2)^{\ominus}$) :

$$g_2^*(y_2^*)=(\mathcal{I}_{\mathcal{A}_2}+g_2)^*(y_2^*)=\inf_{z^*+z_2^*=y_2^*}\Big(\mathcal{I}_{\mathcal{A}_2}^*(z^*)+g_2^*(z_2^*)\Big),$$

avec un infimum atteint s'il est fini. On conclut

$$\begin{aligned}(g_1+g_2)^*(x^*) &= \inf_{y_1^*+y_2^*=x^*}\Big(g_1^*(y_1^*)+\inf_{z^*+z_2^*=y_2^*}\Big(\mathcal{I}_{\mathcal{A}_2}^*(z^*)+g_2^*(z_2^*)\Big)\Big)\\ &= \inf_{y_1^*+y_2^*=x^*}\Big(g_1^*(y_1^*)+g_2^*(y_2^*)\Big),\end{aligned}$$

avec un infimum atteint s'il est fini. □

3.6 Sous-différentiabilité

La notion de dérivée est fondamentale en analyse car elle permet d'approcher localement des fonctions par des modèles linéaires, plus simples à étudier. Ces modèles fournissent des renseignements sur les fonctions qu'ils approchent, si bien que de nombreuses questions d'analyse passent par l'étude des fonctions linéarisées (stabilité, inversibilité locale, optimalité, *etc*). On rencontre beaucoup de fonctions convexes qui ne sont pas différentiables au sens classique (voir l'annexe C pour un rappel sur le calcul différentiel), en particulier lorsque celles-ci résultent de constructions qui n'ont rien pour assurer la différentiabilité des fonctions qu'elles produisent. Il en est ainsi de la fonction duale associée à un problème d'optimisation sous contraintes, pour en citer un exemple emblématique. Pour ces fonctions, on dispose toutefois de la notion de sous-différentiel qui peut jouer un rôle similaire à celui de la dérivée des fonctions plus régulières, plus lisses. Nous la développons dans cette section.

Le sous-différentiel est un substitut de la notion de gradient pour les fonctions convexes *non différentiables* (section 3.6.1). Ce n'est plus un vecteur de $\mathbb{E}$ comme le gradient, mais un sous-ensemble de $\mathbb{E}$ qui n'est réduit à un point qu'en cas de différentiabilité (proposition 3.62). Nous l'introduirons de trois manières différentes : à partir des dérivées directionnelles, dont on sait qu'elles existent toujours pour les fonctions convexes (proposition 3.14), en utilisant les minorantes affines de f (section 3.2.2) et en faisant usage de la conjuguée f^* (section 3.5).

Une fonction convexe est sous-différentiable si son sous-différentiel est non vide (définition 3.50). La propriété de sous-différentiabilité s'exprime donc sous la forme de résultat d'existence. Appliqué à la fonction valeur d'un problème d'optimisation cela impliquera l'existence de multiplicateurs optimaux (section 4.6.1) et donc de solutions d'un autre problème d'optimisation, le problème dual (chapitre 13). On dispose donc là d'une méthode originale pour montrer qu'un problème d'optimisation a une solution : il suffit de montrer qu'il est le dual d'un problème dont la fonction valeur est sous-différentiable en zéro (cette technique sera par exemple utilisée pour établir le théorème 13.17).

Dans cette section, on suppose que l'on travaille sur un espace euclidien $\mathbb{E}$, dont le produit scalaire est noté $\langle\cdot,\cdot\rangle$.

3.6.1 Définitions

Dans cette section, on se donne une fonction $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R}\cup\{+\infty\}$ convexe avec domaine non vide, c'est-à-dire

$$f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E}).$$

On rappelle que ces fonctions ont aussi une minorante affine et donc $f^* \in \overline{\mathrm{Conv}}(\mathbb{E})$ (proposition 3.37). On rappelle également, qu'en tout point de son domaine, une fonction convexe admet une dérivée directionnelle suivant toute direction, celle-ci pouvant éventuellement prendre les valeurs $-\infty$ ou $+\infty$ (proposition 3.14).

La notion de sous-différentiabilité est fondée sur la proposition suivante, dont la longueur de démonstration est inversement proportionnelle à l'importance, qui est grande.

Proposition 3.49 (définitions du sous-différentiel) *Soient $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$, $x \in \mathrm{dom}\, f$ et $x^* \in \mathbb{E}$. Alors les propriétés suivantes sont équivalentes :*

(i) $\forall\, d \in \mathbb{E} : f'(x;d) \geqslant \langle x^*, d\rangle$,
(ii) $\forall\, y \in \mathbb{E} : f(y) \geqslant f(x) + \langle x^*, y-x\rangle$,
(iii) $x \in \arg\min_{y\in\mathbb{E}} \big(f(y) - \langle x^*, y\rangle\big) = \arg\max_{y\in\mathbb{E}} \big(\langle x^*, y\rangle - f(y)\big)$,
(iv) $f(x) + f^*(x^*) \leqslant \langle x^*, x\rangle$,
(v) $f(x) + f^*(x^*) = \langle x^*, x\rangle$.

Démonstration. $[(i) \Rightarrow (ii)]$ Par convexité de f et (i) avec $d = y-x$, on obtient (ii) :

$$\forall\, y \in \mathbb{E} : \quad f(y) \geqslant f(x) + f'(x; y-x) \geqslant f(x) + \langle x^*, y-x\rangle.$$

$[(ii) \Rightarrow (iii)]$ On récrit (ii) comme suit :

$$\forall\, y \in \mathbb{E} : \quad f(y) - \langle x^*, y\rangle \geqslant f(x) - \langle x^*, x\rangle. \tag{3.44}$$

C'est (iii).

$[(iii) \Rightarrow (iv)]$ On récrit (3.44) comme suit :

$$\forall\, y \in \mathbb{E} : \quad \langle x^*, x\rangle - f(x) \geqslant \langle x^*, y\rangle - f(y). \tag{3.45}$$

En prenant le supremum en $y \in \mathbb{E}$ à droite, on obtient (iv).

$[(iv) \Rightarrow (v)]$ Par définition de la conjuguée, on a toujours $f(x) + f^*(x^*) \geqslant \langle x^*, x\rangle$.

$[(v) \Rightarrow (i)]$ Par (v), on a certainement (3.45), qui avec $y = x + td$ devient

$$f(x+td) - f(x) \geqslant \langle x^*, td\rangle.$$

Après division par $t > 0$ et passage à la limite lorsque $t \downarrow 0$, on obtient (i). □

Définitions 3.50 On dit qu'une fonction $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$ est *sous-différentiable* en un point $x \in \mathrm{dom}\, f$ s'il existe $x^* \in \mathbb{E}$ vérifiant les propriétés équivalentes (i)-(v) de la proposition 3.49. Ces éléments x^* sont appelés les *sous-gradients* de f en x. L'ensemble des sous-gradients de f en x est appelé le *sous-différentiel* de f en x. Cet ensemble est noté $\partial f(x)$. Par convention, $\partial f(x) = \varnothing$ si $x \notin \mathrm{dom}\, f$. □

Chacune des cinq conditions équivalentes (i)-(v) de la proposition 3.49 reflète un aspect particulier des sous-gradients, permettant en particulier de les calculer.

1) La condition (i) nous apprend qu'un sous-gradient est la pente d'une minorante *linéaire* de $\delta_x(\cdot) = f'(x;\cdot)$, forcément exacte en 0 (les deux fonctions s'annulent en zéro). Ce point de vue conduit à la méthode de calcul de $\partial f(x)$ suivante. On calcule d'abord la dérivée directionnelle en x et on en détermine toutes les minorantes linéaires exactes en 0, pour former $\partial f(x)$.
2) Selon la condition (ii), dont l'inégalité porte le nom d'*inégalité du sous-gradient*, un sous-gradient est la pente d'une minorante *affine* de f, exacte en x. On utilise parfois cette approche pour montrer qu'une pente particulière $s \in \mathbb{E}$ est un sous-gradient. Elle est par exemple utilisée dans la démonstration de la proposition 13.28.
3) La condition (iii) nous informe aussi que x^* est un sous-gradient de f en x si $f(\cdot) - \langle x^*, \cdot\rangle$ atteint son minimum en x. Ce point de vue conduit à la méthode de calcul de $\partial f(x)$ suivante. On se donne d'abord x^* et on calcule les minimiseurs de $x \mapsto f(x) - \langle x^*, x\rangle$; un tel minimiseur x est tel que $x^* \in \partial f(x)$.
4) Les conditions (iv)-(v) nous disent que x^* est un sous-gradient de f en x si la plus haute minorante affine de f de pente x^*, qui est l'application $y \in \mathbb{E} \mapsto \langle x^*, y\rangle - f^*(x^*)$ (voir la discussion au début de la section 3.5.1), est exacte en x. Ce point de vue conduit à la méthode de calcul de $\partial f(x)$ suivante. On commence par calculer la fonction conjuguée f^* puis on utilise la relation (v). Cette approche est souvent la plus aisée lorsque f^* ne prend que les valeurs 0 ou $+\infty$; des exemples sont donnés aux exercices 3.28, **??**, 3.31 et 3.33.

Nous donnerons à la section 3.6.3 des règles de calcul du sous-différentiel qui permettent souvent de ne pas devoir recourir aux méthodes de calcul de base décrites ci-dessus.

La figure 3.8 illustre la définition du sous-différentiel.

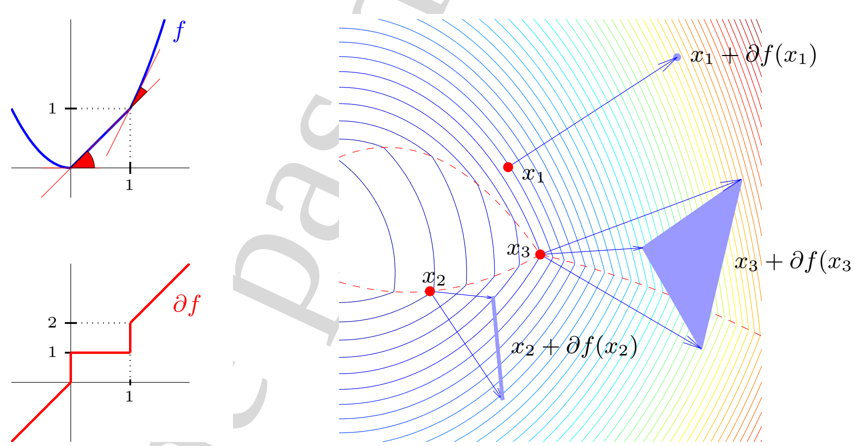


Fig. 3.8. Représentations du sous-différentiel. À gauche : la fonction $x \in \mathbb{R} \mapsto f(x) = \max(x, x^2)$ et la multifonction ∂f. À droite : quelques sous-différentiels dans $\mathbb{R}^2$ de $x \in \mathbb{R}^2 \mapsto \max(q_1(x), q_2(x), q_3(x))$, où les q_i sont quadratiques convexes.

- À gauche, on a représenté la fonction $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ définie par $f(x) = \max(x, x^2)$ (en haut) et l'application multivoque $x \in \mathbb{R} \mapsto \partial f(x) \in \mathcal{P}(\mathbb{R})$ (en bas). Comme on le verra à la proposition 3.62, $\partial f(x)$ ne se distingue de $\nabla f(x)$, le gradient de f en x, qu'en des points de non-différentiabilité, c'est-à-dire ici aux points $x = 0$ et $x = 1$. D'après le point (ii) de la proposition 3.49, en un tel point x, $\partial f(x)$ est l'ensemble des pentes x^* telles que $y \mapsto f(x) + \langle x^*, y-x\rangle$ minore f sur $\mathbb{R}$. Ainsi $\partial f(0) = [0, 1]$ et $\partial f(1) = [1, 2]$. On observe le caractère monotone maximal de la multifonction $x \mapsto \partial f(x)$ (proposition 3.61).
- À droite sont représentées les courbes de niveau d'une fonction $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$, qui est le maximum de trois fonctions quadratiques convexes. Les courbes en tirets sont les lieux de non différentiabilité, que l'on repère par les coins qu'y font les courbes de niveau. On les appelle les *plis* de f. Au point x_1, la fonction est différentiable et le sous-différentiel $\partial f(x_1)$ se confond avec le vecteur gradient $\nabla f(x_1)$ (proposition 3.62), que l'on a représenté ici après avoir translaté l'origine en x_1. En x_2 et x_3 la fonction n'est pas différentiable. Les sous-différentiels en ces points sont alors les enveloppes convexes des vecteurs gradients des fonctions quadratiques « actives » en ces points (proposition 3.72) : $\partial f(x_2)$ est un segment et $\partial f(x_3)$ est un triangle. Les sous-différentiels représentés à la figure 3.8 sont polyédriques, mais ceci est dû à la nature de la fonction considérée (une enveloppe supérieure d'un nombre fini de fonctions convexes différentiables). Il n'en est pas toujours ainsi ; par exemple, le sous-différentiel en zéro de la norme ℓ_2 dans $\mathbb{R}^n$ est la boule unité associée à cette norme (point 3 de l'exercice 3.28).

Voici quelques corollaires de la proposition 3.49.

Corollaire 3.51 (sous-différentiel de la dérivée directionnelle) *Soit $x \in \operatorname{dom} f$ et δ_x l'application dérivée directionnelle définie en (3.9). Alors*

$$\partial f(x) = \partial \delta_x(0).$$

Démonstration. Comme $\delta_x(0) = 0$, cette relation se déduit de l'équivalence entre les points (i) et (ii) de la proposition 3.49. □

Les sous-différentiels de f et de sa conjuguée f^* jouissent d'une belle règle de réciprocité, parfois appelée *règle de bascule* [294].

Corollaire 3.52 (règle de bascule)
1) *Si $f \in \operatorname{Conv}(\mathbb{E})$, alors $x^* \in \partial f(x) \implies x \in \partial f^*(x^*)$.*
2) *Si $f \in \operatorname{C\overline{onv}}(\mathbb{E})$, alors $x^* \in \partial f(x) \iff x \in \partial f^*(x^*)$.*

Démonstration. 1) Si $x^* \in \partial f(x)$, on a $f(x) + f^*(x^*) = \langle x^*, x\rangle$ (point (v) de la proposition 3.49). Comme $f^{**} \leqslant f$ (corollaire 3.41), on a aussi, $f^{**}(x) + f^*(x^*) \leqslant \langle x^*, x\rangle$, ce qui exprime le fait que $x \in \partial f^*(x^*)$ (point (iv) de la proposition 3.49).
2) On a cette fois

$$\begin{aligned} x^* \in \partial f(x) &\iff f(x) + f^*(x^*) = \langle x^*, x\rangle \qquad \text{[proposition 3.49 } (v)\text{]} \\ &\iff f^{**}(x) + f^*(x^*) = \langle x^*, x\rangle \qquad \text{[proposition 3.40]} \\ &\iff x \in \partial f^*(x^*) \qquad \text{[proposition 3.49 } (v) \text{ appliquée à } f^*\text{]}, \end{aligned}$$

ce qui montre l'équivalence. □

La réciproque n'a pas lieu au point 1, pour la fonction $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{R})$ ci-dessous

$$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ 1 & \text{si } x = 0 \\ +\infty & \text{si } x > 0 \end{cases} \qquad \text{donc} \qquad f^*(x^*) = \begin{cases} +\infty & \text{si } x^* < 0 \\ 0 & \text{si } x^* \geqslant 0, \end{cases}$$

puisque l'on a $0 \notin \partial f(0) = \varnothing$, alors que $0 \in \partial f^*(0) =]-\infty, 0]$.

Corollaire 3.53 (sous-différentiel et f^*) *Si $f \in \overline{\mathrm{Conv}}(\mathbb{E})$, alors*

$$\partial f(x) = \operatorname*{arg\,max}_{x^* \in \mathbb{E}} \big(\langle x^*, x\rangle - f^*(x^*)\big). \tag{3.46}$$

Démonstration. On a

$$\begin{aligned} x^* \in \partial f(x) &\iff x \in \partial f^*(x^*) \qquad \text{[règle de bascule]} \\ &\iff x^* \in \arg\max\big(\langle \cdot, x\rangle - f^*(\cdot)\big), \end{aligned}$$

par le point (iii) de la proposition 3.49, appliqué à $f^* \in \overline{\mathrm{Conv}}(\mathbb{E})$ au lieu de f. □

Corollaire 3.54 (sous-différentiels de f et f^{**}) *Soient $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$ et $x \in \operatorname{dom} f$. Alors*
1) $\partial f(x) \subseteq \partial f^{**}(x)$,
2) $\partial f(x) \neq \varnothing \implies f(x) = f^{**}(x)$,
3) $f(x) = f^{**}(x) \implies \partial f(x) = \partial f^{**}(x)$.

Démonstration. 1) Si $x^* \in \partial f(x)$, alors $f(x) + f^*(x^*) = \langle x^*, x\rangle$ (point (v) de la proposition 3.49), donc $f^{**}(x) + (f^{**})^*(x^*) \leqslant \langle x^*, x\rangle$ car $f^{**} \leqslant f$ (corollaire 3.41) et $(f^{**})^* = f^*$ (proposition 3.42), si bien que $x^* \in \partial f^{**}(x)$ (point (iv) de la proposition 3.49).

2) On a toujours $f^{**}(x) \leqslant f(x)$ (corollaire 3.41). D'autre part, si $x^* \in \partial f(x)$, on a par définition de f^{**} et par le point (v) de la proposition 3.49 :

$$f^{**}(x) \geqslant \langle x^*, x\rangle - f^*(x^*) = f(x).$$

3) D'après le point 1, il reste à montrer l'inclusion $\partial f^{**}(x) \subseteq \partial f(x)$. Si $x^* \in \partial f^{**}(x)$, on a $f^{**}(x) + (f^{**})^*(x^*) = \langle x^*, x\rangle$. En utilisant l'hypothèse $f(x) = f^{**}(x)$ et la propriété $(f^{**})^*(x^*) = f^*(x^*)$, on obtient $f(x) + f^*(x^*) = \langle x^*, x\rangle$, c'est-à-dire $x^* \in \partial f(x)$. □

Corollaire 3.55 (optimalité I)
1) $\inf f = -f^*(0)$.
2) *Si* $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$, *alors* $\bar{x} \in \arg\min f$ *si, et seulement si,* $0 \in \partial f(\bar{x})$.
3) *Si* $f \in \mathrm{C\overline{onv}}(\mathbb{E})$, *alors* $\arg\min f = \partial f^*(0)$.

DÉMONSTRATION. 1) $f^*(0) = \sup_x \langle 0, x\rangle - f(x) = -\inf_x f(x)$.

2) C'est une conséquence immédiate du point (ii) de la proposition 3.49 : si x minimise f, on peut prendre $x^* = 0$ dans (ii), donc $0 \in \partial f(x)$; inversement, si $0 \in \partial f(x)$, $x^* = 0$ dans (ii) montre que x minimise f.

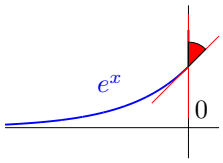
3) On a $\bar{x} \in \arg\min f$ si, et seulement si, $0 \in \partial f(\bar{x})$ (point 2) si, et seulement si, $\bar{x} \in \partial f^*(0)$ (règle de bascule). □

D'après le point 1 du corollaire, trouver un minimiseur de f sur $\mathbb{E}$ revient à trouver les « zéros » de la fonction multivoque $\partial f(\cdot)$. On rapprochera ce fait du résultat selon lequel, lorsque f est convexe différentiable, les minimiseurs de f sont les zéros de son application gradient $\nabla f(\cdot)$.

3.6.2 Quelques propriétés

Une fonction $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$ n'est pas nécessairement sous-différentiable en tout point de son domaine. Comme nous allons le montrer, la difficulté vient essentiellement du fait que la fonction dérivée directionnelle en x peut prendre la valeur $-\infty$. Le fait que $f'(x;d) = -\infty$ empêche que f soit sous-différentiable en x se voit clairement par le point (i) de la proposition 3.49. La réciproque est le sujet de la proposition 3.56 ci-dessous. Une telle situation se présente pour la fonction convexe f définie par (3.8), l'opposée de la racine carrée. Cette fonction n'est pas sous-différentiable en 0, parce que $f'(0;1) = -\infty$. Évidemment, si $f'(x;d) = -\infty$, alors $f'(x;-d) = +\infty$ par (3.7), mais ce n'est pas la valeur $+\infty$ de la dérivée directionnelle qui empêche f d'être sous-différentiable en x. C'est ce que montre l'exemple suivant de fonction convexe f, dont le sous-différentiel en 0 vaut $[1, +\infty[$:

$$f(x) = \begin{cases} e^x & \text{si } x \leqslant 0 \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$



Comme nous l'avons mentionné au début de cette section, la mise en évidence de conditions suffisantes de sous-différentiabilité est importante, car ces conditions deviennent alors un moyen de montrer que certains problèmes d'optimisation ont des solutions. C'est le but de la proposition suivante.

Proposition 3.56 (sous-différentiabilité) *Si $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$ et $x \in \operatorname{dom} f$, les propriétés suivantes sont équivalentes :*

(i) $\partial f(x) \neq \varnothing$,
(ii) *il existe* $y \in (\operatorname{dom} f)^{\diamond}$ *tel que* $f'(x; y-x) > -\infty$,
(iii) $f'(x;\cdot)$ *est propre (ou ne prend pas la valeur* $-\infty$*).*

Ces propriétés sont vérifiées si $x \in (\operatorname{dom} f)^{\diamond}$.

Démonstration. $[(i) \Rightarrow (ii)]$ Soit y un point quelconque de $(\operatorname{dom} f)^{\diamond}$, qui est non vide. Alors $f'(x; y-x) > -\infty$ sinon $\partial f(x)$ serait vide (par le point (i) de la proposition 3.49).

$[(ii) \Rightarrow (iii)]$ Comme $f'(x;0) = 0$, il suffit de montrer que $f'(x;\cdot)$ ne prend pas la valeur $-\infty$. On raisonne par l'absurde. Soit $d_1 := y - x$ (qui peut être nul, si $x \in (\operatorname{dom} f)^{\diamond}$) et supposons qu'il existe $d_0 \in \mathbb{E}$ tel que $f'(x; d_0) = -\infty$. On pose $d_t := (1-t)d_0 + td_1$. Par convexité de $f'(x;\cdot)$ (point 1 de la proposition 3.15), $f'(x; d_t)$ vaut $-\infty$ pour $t \in [0,1[$ et vaut $+\infty$ pour $t > 1$. Mais, pour $\alpha \in]0,1]$ suffisamment petit, $x + \alpha d_0 \in \operatorname{dom} f$ (sinon la dérivée directionnelle suivant d_0 ne vaudrait pas $-\infty$). Alors, par convexité de $\operatorname{dom} f$,

$$x + \alpha d_t = (1-t)[x + \alpha d_0] + t[x + \alpha d_1] \in \operatorname{dom} f$$

pour $t \in [0,1]$ et même pour $t > 1$ proche de 1 (car $x + \alpha d_1 \in (\operatorname{dom} f)^{\diamond}$ par le lemme 2.13). Mais alors, on ne peut avoir $f'(x; d_t) = +\infty$ pour ces $t > 1$ (le quotient différentiel est monotone), comme affirmé précédemment.

$[(iii) \Rightarrow (i)]$ Si $f'(x;\cdot)$ est propre, cette fonction convexe a une minorante affine (proposition 3.6) : $\exists x^* \in \mathbb{E}$ et $\alpha \in \mathbb{R}$ tels que pour tout $d \in \mathbb{E}$ on a

$$f'(x; d) \geqslant \langle x^*, d\rangle + \alpha.$$

En remplaçant d par td avec $t \uparrow \infty$, on voit que l'on peut prendre $\alpha = 0$. Par le point (i) de la proposition 3.49, ce $x^* \in \partial f(x)$ qui est donc non vide.

Finalement, si $x \in (\operatorname{dom} f)^{\diamond}$, la propriété (ii) est vérifiée en prenant $y = x$. □

On trouvera une autre condition nécessaire et suffisante de sous-différentiabilité à l'exercice 3.25, qui est dans le même esprit que la proposition précédente : il faut et il suffit que f soit « sous-lipschitzienne ».

Corollaire 3.57 (optimalité II) *Si $f \in \overline{\mathrm{Conv}}(\mathbb{E})$ et $0 \in (\operatorname{dom} f^*)^{\diamond}$, alors* $\arg\min f$ *est non vide.*

Démonstration. Lorsque $f \in \overline{\mathrm{Conv}}(\mathbb{E})$, $\arg\min f = \partial f^*(0)$ (corollaire 3.55). D'après la proposition, lorsque $0 \in (\operatorname{dom} f^*)^{\diamond}$, f^* est sous-différentiable en zéro, donc $\arg\min f \neq \varnothing$. □

Proposition 3.58 (propriétés géométrique et topologique du sous-différentiel) *Soient $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$, $\mathbb{E}_0$ le sous-espace vectoriel parallèle à $\mathrm{aff}(\mathrm{dom}\, f)$, $\mathrm{P}_{\mathbb{E}_0}$ le projecteur orthogonal sur $\mathbb{E}_0$ et $x \in \mathrm{dom}\, f$. On note $f|_{x+\mathbb{E}_0}$ la restriction de f à $x + \mathbb{E}_0 = \mathrm{aff}(\mathrm{dom}\, f)$. Alors*

1) $\partial f(x) = \partial f|_{x+\mathbb{E}_0}(x) + \mathbb{E}_0^\perp$, *en particulier* $\mathrm{P}_{\mathbb{E}_0}\, \partial f(x) = \partial f|_{x+\mathbb{E}_0}(x)$,
2) $\partial f(x)$ *est convexe et fermé (éventuellement vide),*
3) $x \in (\mathrm{dom}\, f)^{\circ\circ} \iff \mathrm{P}_{\mathbb{E}_0}\, \partial f(x)$ *est non vide et borné,*
4) $x \in (\mathrm{dom}\, f)^{\circ} \iff \partial f(x)$ *est non vide et borné.*

Démonstration. 1) On note $f_0 : y \in \mathbb{E}_0 \mapsto f(x+y)$ la restriction de f à $x + \mathbb{E}_0$. Soit $x^* \in \partial f(x)$. On peut écrire $x^* = x_0^* + h$, avec $x_0^* = \mathrm{P}_{\mathbb{E}_0}\, x^*$ et $h = x^* - x_0^* \in \mathbb{E}_0^\perp$. Il reste à montrer que $x_0^* \in \partial f_0(0)$. Par définition de x^*, $f'(x;d) \geqslant \langle x^*, d\rangle$, pour tout $d \in \mathbb{E}$. Mais, pour tout $d \in \mathbb{E}_0$: $f'(x;d) = f_0'(0;d)$ et $\langle x^*, d\rangle = \langle x_0^*, d\rangle$, si bien que $f_0'(0;d) \geqslant \langle x_0^*, d\rangle$. On a montré que $x_0^* \in \partial f_0(0)$. Réciproquement, soient $x_0^* \in \partial f_0(0)$ et $h \in \mathbb{E}_0^\perp$. Alors, pour tout $d \in \mathbb{E}_0$: $f_0'(0;d) \geqslant \langle x_0^*, d\rangle$, $f_0'(0;d) = f'(x;d)$ et $\langle h, d\rangle = 0$, si bien que $f'(x;d) \geqslant \langle x_0^* + h, d\rangle$. Comme $f'(x;d) = +\infty$ si $d \notin \mathbb{E}_0$, on a certainement aussi $f'(x;d) \geqslant \langle x_0^* + h, d\rangle$, pour tout $d \in \mathbb{E}$. Donc $x_0^* + h \in \partial f(x)$.

2) Comme on a toujours $f(x) + f^*(x^*) \geqslant \langle x^*, x\rangle$, le sous-différentiel est donné par

$$\partial f(x) = \{x^* : f^*(x^*) - \langle x^*, x\rangle \leqslant -f(x)\}.$$

Mais $x^* \mapsto f^*(x^*) - \langle x^*, x\rangle$ est dans $\overline{\mathrm{Conv}}(\mathbb{E})$ (proposition 3.37). Comme ensemble de sous-niveau de cette fonction, $\partial f(x)$ est donc convexe et fermé.

3) Notons d'abord que $\partial f(x)$ est non vide lorsque $x \in (\mathrm{dom}\, f)^{\circ\circ}$ (proposition 3.56), donc $\mathrm{P}_{\mathbb{E}_0}\, \partial f(x) \neq \varnothing$. Montrons à présent que cet ensemble est borné. Pour un $\varepsilon > 0$ assez petit, on note $L \geqslant 0$ le module de Lipschitz de f sur $B(x, 2\varepsilon) \cap (\mathrm{dom}\, f)^{\circ\circ}$ (proposition 3.13). Soit x^* un élément non nul de $\partial f(x)$ (si le sous-différentiel est réduit à $\{0\}$, il n'y a plus rien à démontrer). En prenant $y = x + \varepsilon x^*/\|x^*\|$ au point (ii) de la proposition 3.49, on obtient $\varepsilon\|x^*\| \leqslant f(x + \varepsilon x^*/\|x^*\|) - f(x) \leqslant L\varepsilon$. Donc $\|x^*\| \leqslant L$.

On démontre l'implication inverse par l'absurde. Supposons que $x \in (\mathrm{dom}\, f) \setminus (\mathrm{dom}\, f)^{\circ\circ}$ et que $x^* \in \partial f(x)$ qui est supposé non vide (si le sous-différentiel est vide, il n'y a plus rien à démontrer). Il faut montrer que $\mathrm{P}_{\mathbb{E}_0}\, \partial f(x)$ est non borné. Par définition de x^*, on a $f(y) \geqslant f(x) + \langle x^*, y - x\rangle$ pour tout $y \in \mathbb{E}$. Soit $\nu \in \mathbb{E}_0$ une normale non nulle à $\mathrm{dom}\, f$ en x (elle existe par la proposition 2.28), qui vérifie donc $\langle \nu, y - x\rangle \leqslant 0$ pour tout $y \in \mathrm{dom}\, f$. Alors, on a $f(y) \geqslant f(x) + \langle x^* + t\nu, y - x\rangle$, pour tout $y \in \mathbb{E}$ et pour tout $t > 0$. Dès lors $x^* + t\nu \in \mathbb{E}_0 \cap \partial f(x)$ pour tout $t > 0$, ce qui démontre que cet ensemble est non borné.

4) Si $x \in (\mathrm{dom}\, f)^\circ$, $\mathbb{E}_0 = \mathbb{E}$ et le point 3 montre que $\partial f(x)$ est non vide et borné.

Réciproquement, si $\partial f(x)$ est non vide et borné, $\mathbb{E}_0 = \mathbb{E}$ par le point 1. Alors $(\mathrm{dom}\, f)^{\circ\circ} = (\mathrm{dom}\, f)^\circ$ et on voit que $x \in (\mathrm{dom}\, f)^\circ$ par le point 3. □

Corollaire 3.59 (optimalité III) *Si $f \in \mathrm{C\overline{onv}}(\mathbb{E})$ et $0 \in (\operatorname{dom} f^*)^\circ$, alors* $\arg\min f$ *est non vide et compact.*

Démonstration. Lorsque $f \in \mathrm{C\overline{onv}}(\mathbb{E})$, $\arg\min f = \partial f^*(0)$ (corollaire 3.55). D'après les points 2 et 4 de la proposition, lorsque $0 \in (\operatorname{dom} f^*)^\circ$, $\partial f^*(0)$ est non vide et compact. □

Nous avons défini le sous-différentiel à partir de la dérivée directionnelle. La proposition suivante montre que l'on peut retrouver les dérivées directionnelles à partir du sous-différentiel : $f'(x;\cdot)$ est la fonction d'appui de $\partial f(x)$.

Proposition 3.60 (formule du max) *Si $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$ et $x \in (\operatorname{dom} f)^\ominus$, alors, pour tout $d \in \mathbb{E}$, on a*

$$f'(x;d) = \sup_{x^* \in \partial f(x)} \langle x^*, d\rangle. \tag{3.47}$$

Le supremum est atteint si $f'(x;d) < +\infty$.

Démonstration. En tant qu'élément de $\mathrm{C\overline{onv}}(\mathbb{E})$ (proposition 3.15), $f'(x;\cdot)$ est l'enveloppe supérieure de ses minorantes affines (point 1 de la proposition 3.40). Comme $f'(x;\cdot)$ est positivement homogène de degré 1 (proposition 3.15), toute minorante affine est majorée par une minorante linéaire, si bien que $f'(x;\cdot)$ est aussi l'enveloppe supérieure de ses minorantes linéaires : pour tout $d \in \mathbb{E}$,

$$f'(x;d) = \sup_{\substack{x^* \in \mathbb{E} \\ \langle x^*, h\rangle \leqslant f'(x;h),\ \forall\, h \in \mathbb{E}}} \langle x^*, d\rangle = \sup_{x^* \in \partial f(x)} \langle x^*, d\rangle.$$

Montrons que l'on peut remplacer le supremum par un maximum, lorsque $d \in \mathbb{E}_0 := \operatorname{dom} f'(x;\cdot)$, qui est un sous-espace vectoriel lorsque $x \in (\operatorname{dom} f)^\ominus$ (proposition 3.15). On a en effet

$$f'(x;d) = \sup_{x^* \in \partial f(x)} \langle P_{\mathbb{E}_0} x^*, d\rangle = \sup_{x^* \in P_{\mathbb{E}_0}\partial f(x)} \langle x^*, d\rangle,$$

parce que $P_{\mathbb{E}_0}\partial f(x) \subseteq \partial f(x)$ (point 1 de la proposition 3.58). On utilise alors le fait que $P_{\mathbb{E}_0}\partial f(x)$ est compact lorsque $x \in (\operatorname{dom} f)^\ominus$ (points 2 et 3 de la proposition 3.58). □

Le résultat précédent ne tient plus si x est sur la frontière relative du domaine de f. Voici un contre-exemple : f est l'indicatrice de la boule-unité fermée de $\mathbb{R}^2$, pour la norme euclidienne, et $x = (-1, 0)$. Alors $f'(x;0) = 0$ et si $d \neq 0$:

$$f'(x;d) = \begin{cases} 0 & \text{si } d_1 > 0 \\ +\infty & \text{si } d_1 \leqslant 0. \end{cases}$$

Comme la fonction $\delta_x : d \mapsto f'(x;d)$ n'est pas fermée, elle ne peut être la fonction d'appui d'un ensemble (point 1 de la proposition 3.10) et donc certainement pas du sous-différentiel. D'ailleurs, ce dernier s'écrit $\partial f(x) = \{x^* \in \mathbb{R}^2 : x_1^* \leqslant 0,\ x_2^* = 0\}$ et

$$\sigma_{\partial f(x)}(d) = \begin{cases} 0 & \text{si } d_1 \geqslant 0 \\ +\infty & \text{si } d_1 < 0 \end{cases}$$

est l'enveloppe convexe fermée de δ_x. Cette propriété est tout à fait générale pour les fonctions de $\mathrm{C\overline{onv}}(\mathbb{E})$ (voir l'exercice 3.19).

On peut voir $\partial f : \mathbb{E} \multimap \mathbb{E} : x \mapsto \partial f(x)$ comme la multifonction qui à un élément de $\mathbb{E}$ fait correspondre le sous-différentiel $\partial f(x)$, qui est une partie de $\mathbb{E}$. En voici quelques propriétés.

Proposition 3.61 (la multifonction ∂f) *Si $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$, alors*

(i) $(\mathrm{dom}\, f)^{\circ} \subseteq \mathrm{dom}\, \partial f \subseteq \mathrm{dom}\, f$,
(ii) $\mathcal{R}(\partial f) \subseteq \mathrm{dom}\, f^*$,
(iii) $\mathcal{G}(\partial f)$ *est fermé,*
(iv) la multifonction ∂f est monotone.

Si $f \in \mathrm{C\overline{onv}}(\mathbb{E})$, alors

(v) $(\mathrm{dom}\, f^*)^{\circ} \subseteq \mathcal{R}(\partial f)$,
(vi) $(\partial f)^{-1} = \partial f^*$,
(vii) la multifonction ∂f est monotone maximale.

Démonstration. [*(i)*] C'est une conséquence de la proposition 3.56 et de la définition 3.50 du sous-différentiel.

[*(ii)*] Si $x^* \in \partial f(x)$, alors $x \in \mathrm{dom}\, f$ (par convention) et $f^*(x^*) = \langle x^*, x\rangle - f(x) \in \mathbb{R}$ (par le point *(v)* de la proposition 3.49).

[*(iii)*] Soit $\{x_k, x_k^*\} \subseteq \mathcal{G}(\partial f)$, avec $x_k \to x$ et $x_k^* \to x^*$. Il faut montrer que $(x, x^*) \in \mathcal{G}(\partial f)$. Il suffit en fait de passer à la limite dans

$$\forall\, y \in \mathbb{E} : \quad f(y) \geqslant f(x_k) + \langle x_k^*, y - x_k\rangle.$$

[*(iv)*] Soient $x_1^* \in \partial f(x_1)$ et $x_2^* \in \partial f(x_2)$. En additionnant les deux inégalités $f(x_2) \geqslant f(x_1) + \langle x_1^*, x_2 - x_1\rangle$ et $f(x_1) \geqslant f(x_2) + \langle x_2^*, x_1 - x_2\rangle$, on obtient $\langle x_2^* - x_1^*, x_2 - x_1\rangle \geqslant 0$, ce qui montre la monotonie de ∂f.

[*(v)*] Si $x^* \in (\mathrm{dom}\, f^*)^{\circ}$, alors $x^* \in \mathrm{dom}\, \partial f^*$ (par le point *(i)*), si bien qu'il existe un $x \in \partial f^*(x^*)$ et par le point 2 du corollaire 3.52 (c'est ici que l'on a besoin d'avoir $f \in \mathrm{C\overline{onv}}(\mathbb{E})$), $x^* \in \partial f(x)$.

[*(vi)*] C'est le point 2 de la proposition 3.52.

[*(vii)*] Soit $(y, y^*) \in \mathbb{E}^2$ tel que

$$\langle y^* - x^*, y - x\rangle \geqslant 0, \quad \forall\, (x, x^*) \in \mathcal{G}(\partial f). \tag{3.48}$$

Il suffit de montrer que $(y, y^*) \in \mathcal{G}(\partial f)$. Le problème

$$\min_{x \in \mathbb{E}} \left(f(x) + \frac{1}{2}\|x - (y^* + y)\|^2 \right)$$

a une unique solution $\bar{x}$ (en effet, le critère tend vers l'infini à l'infini car f a une minorante affine ; il est aussi s.c.i. et strictement convexe). Celle-ci vérifie $y^* + y - \bar{x} \in$

$\partial f(\bar{x})$. En prenant $(x, x^*) = (\bar{x}, y^* + y - \bar{x})$ dans (3.48), on trouve que $y = \bar{x}$ et donc que $y^* \in \partial f(\bar{x}) = \partial f(y)$. □

On note que l'on peut très bien avoir $\mathcal{R}(\partial f) \neq \operatorname{dom} f^*$: pour la fonction $x \mapsto f(x) = e^x$, $\mathcal{R}(\partial f) =]0, +\infty[$, alors que $\operatorname{dom} f^* = [0, +\infty[$.

C'est le caractère fermé de f qui rend ∂f monotone *maximale*. La théorie des *inéquations variationnelles* étudie les opérateurs (éventuellement multivoques) qui ne « dérivent pas d'un potentiel » (T n'est pas de la forme ∂f, pour une fonction $f \in \operatorname{Conv}(\mathbb{E})$). Cette théorie englobe donc l'optimisation. Lorsque les opérateurs considérés sont monotones, c'est leur caractère *maximal* qui leur donne une chance d'être surjectif, comme le caractère fermé de f donne une chance au problème $\inf_x(f(x) - \langle u, x\rangle)$, équivalent à $u \in \partial f(x)$, d'avoir une solution. On voit que cela ne suffit pas et qu'une hypothèse de coercivité (équivalente à la croissance de f vers l'infini à l'infini) peut être bien utile.

La proposition suivante établit un lien entre la sous-différentiabilité et la différentiabilité. Par différentiabilité, on entend soit la Gâteaux-différentiabilité, soit la Fréchet-différentiabilité, deux notions identiques pour une fonction convexe (proposition 3.17). Ce résultat peut être utilisé pour montrer qu'un fonction convexe est différentiable ; il suffit de montrer que son sous-différentiel est un singleton.

Proposition 3.62 (lien avec la différentiabilité) *Soient $f \in \operatorname{Conv}(\mathbb{E})$ et $x \in (\operatorname{dom} f)^\circ$. Si f est différentiable en x, alors f est sous-différentiable en x et $\partial f(x) = \{\nabla f(x)\}$. Inversement, si $\partial f(x)$ est le singleton $\{x^*\}$, alors f est différentiable en x et $\nabla f(x) = x^*$.*

Démonstration. Si f est différentiable en x, le point (ii) de la proposition 3.49 est vérifiée avec $x^* = \nabla f(x)$; donc $\nabla f(x) \in \partial f(x)$ et f est sous-différentiable. D'autre part, si $x_0^* \in \partial f(x)$, le point (i) de la proposition 3.49 montre que $f'(x) \cdot d \geqslant \langle x_0^*, d\rangle$, $\forall\, d \in \mathbb{E}$. La linéarité de $f'(x)$ implique que $f'(x) \cdot d = \langle x_0^*, d\rangle$, $\forall\, d \in \mathbb{E}$ et donc que $x_0^* = \nabla f(x)$. On en déduit que $\partial f(x) = \{\nabla f(x)\}$.

Si $\partial f(x)$ est le singleton $\{x^*\}$, la formule du max (3.47) donne pour tout $d \in \mathbb{E}$: $f'(x; d) = \langle x^*, d\rangle$. Donc f est (Gâteaux-)différentiable en x et $\nabla f(x) = x^*$. □

Soit f une fonction convexe différentiable. Alors f' est lipschitzienne si, et seulement si, f^* est fortement convexe. C'est ce que montre la proposition suivante [295], qui nous sera utile dans l'analyse des algorithmes quasi-newtoniens (chapitre 10).

Proposition 3.63 (fonction convexe avec gradient lipschitzien) *Soit $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R}$ une fonction convexe et $\mathcal{C}^{1,1}$. On note ∇f le gradient de f pour le produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle$ et $L > 0$ la constante de Lipschitz de ∇f pour la norme $\|\cdot\|$ associée à ce produit scalaire. Alors, pour tout $x, y \in \mathbb{E}$, on a*

$$\langle \nabla f(y) - \nabla f(x), y - x\rangle \geqslant \frac{1}{L}\|\nabla f(y) - \nabla f(x)\|^2.$$

DÉMONSTRATION. Soient $x, y \in \mathbb{E}$. On note $x^* = \nabla f(x)$ et $y^* = \nabla f(y)$. Alors $x \in \partial f^*(x^*)$ et $y \in \partial f^*(y^*)$. Il suffit de montrer la forte convexité de f^* (proposition 3.23), c'est-à-dire

$$f^*(y^*) \geqslant f^*(x^*) + \langle y^* - x^*, x\rangle + \frac{1}{2L}\|y^* - x^*\|^2.$$

Par définition de f^*, on a

$$f^*(y^*) = \sup_{y\in\mathbb{E}}\Big(\langle y^*, y\rangle - f(y)\Big),$$

si bien que pour obtenir l'inégalité ci-dessus, il est utile de trouver une majoration de $f(y)$. En utilisant le développement de Taylor avec reste intégral, la constante de Lipschitz de ∇f et le point (v) de la proposition 3.49, on obtient

$$\begin{aligned} f(y) &= f(x) + \langle \nabla f(x), y - x\rangle + \int_0^1 \langle \nabla f(x + t(y-x)) - \nabla f(x), y - x\rangle \,\mathrm{d}t \\ &\leqslant f(x) + \langle x^*, y - x\rangle + \frac{L}{2}\|y - x\|^2 \\ &= -f^*(x^*) + \langle x^*, y\rangle + \frac{L}{2}\|y - x\|^2. \end{aligned}$$

Alors

$$f^*(y^*) \geqslant f^*(x^*) + \sup_{y\in\mathbb{E}}\Big(\langle y^* - x^*, y\rangle - \frac{L}{2}\|y - x\|^2\Big).$$

La borne supérieure du membre de droite est atteinte pour $y = x + \frac{1}{L}(y^* - x^*)$. Après substitution, on obtient l'inégalité recherchée. □

3.6.3 Règles de calcul

Quelques règles du calcul sous-différentiel sont données dans les propositions suivantes (on en trouvera d'autres dans [295 ; 1993 ; section VI.4]). Les fonctions considérées sont parfois supposées ne prendre que des valeurs finies, mais on trouvera au corollaire 13.18 une extension de certaines règles de calcul au cas de fonctions pouvant prendre la valeur $+\infty$.

Combinaison conique

Proposition 3.64 (multiplication par un scalaire positif) *Soit* $\alpha \geqslant 0$, $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$ *et* $x \in \mathbb{E}$. *Alors*

$$\partial(\alpha f)(x) = \alpha\, \partial f(x). \tag{3.49}$$

DÉMONSTRATION. C'est une conséquence immédiate de la définition du sous-différentiel. □

Proposition 3.65 (somme) *Soient $f_1, \dots, f_p \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$ et $x \in \mathbb{E}$. Alors*

$$\partial(f_1 + \cdots + f_p)(x) \supseteq \partial f_1(x) + \cdots + \partial f_p(x). \tag{3.50}$$

L'égalité a lieu ci-dessus si

$$\bigcap_{1 \leqslant i \leqslant p} (\mathrm{dom}\, f_i)^{\circ} \neq \varnothing. \tag{3.51}$$

Dans la condition (3.51), on peut remplacer $(\mathrm{dom}\, f_i)^{\circ}$ par $\mathrm{dom}\, f_i$ si f_i est polyédrique.

Démonstration. On note $f = f_1 + \cdots + f_p$.

L'inclusion (3.50) se déduit directement de la définition du sous-différentiel: si $x_i^* \in \partial f_i(x)$ pour $i = 1, \dots, p$, alors $x \in \cap_i(\mathrm{dom}\, f_i) = \mathrm{dom}\, f$ et, pour tout $h \in \mathbb{E}$, $f'(x;h) = f_1'(x;h) + \cdots + f_p'(x;h) \geqslant \langle x_1^* + \cdots + x_p^*, h\rangle$, si bien que $x_1^* + \cdots + x_p^* \in \partial f(x)$.

Supposons maintenant que (3.51) a lieu et que $x^* \in \partial f(x)$; donc $x \in \mathrm{dom}\, f$. Il s'agit de décomposer x^* en des sous-gradients des f_i. On passe par la conjuguée de f donnée par la proposition 3.48, point 2 : puisque $f^*(x^*)$ est fini, on peut écrire

$$f^*(x^*) = (f_1^* \uplus \cdots \uplus f_p^*)(x^*) = f_1^*(x_1^*) + \cdots + f_p^*(x_p^*), \quad \text{avec } x^* = x_1^* + \cdots + x_p^*.$$

Alors, d'après la définition du sous-différentiel (point (v) de la proposition 3.49):

$$\langle x_1^* + \cdots + x_2^*, x\rangle = f_1(x) + \cdots + f_p(x) + f_1^*(x_1^*) + \cdots + f_p^*(x_p^*).$$

Mais on a toujours $f_2(x) + \cdots + f_p(x) + f_2^*(x_2^*) + \cdots + f_p^*(x_p^*) \geqslant \langle x_2^* + \cdots + x_p^*, x\rangle$, si bien que l'identité ci-dessus donne $\langle x_1^*, x\rangle \geqslant f_1(x) + f_1^*(x_1^*)$. Comme l'inégalité inverse a toujours lieu, on obtient $\langle x_1^*, x\rangle = f_1(x) + f_1^*(x_1^*)$, c'est-à-dire que $x_1^* \in \partial f_1(x_1)$. De même pour les autres indices : $x_i^* \in \partial f_i(x_i)$, pour tout i. Donc $x^* \in \partial f_1(x) + \cdots + \partial f_p(x)$. □

On ne peut pas se passer de la condition (3.51) pour avoir égalité en (3.50). Par exemple, si f_1 est la fonction $-\sqrt{x}$ définie en (3.8) et $f_2 = \mathcal{I}_{]-\infty,0]}$, la somme $f = f_1 + f_2$ a son domaine réduit à $\{0\}$ et $\partial f(0) = \mathbb{R}$, alors que $\partial f_1(0) + \partial f_2(0) = \varnothing$, parce que $\partial f_1(0) = \varnothing$.

Composition

Le cadre est le suivant. On dispose d'une fonction affine $a : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ entre deux espaces euclidiens $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$. Celle-ci est supposée être définie en $x \in \mathbb{E}$ par

$$a(x) = Ax + b,$$

où $A : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ est linéaire et $b \in \mathbb{F}$. On note A^* l'application linéaire adjointe de A pour les produits scalaires que l'on s'est donné sur $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$. L'application affine a est composée avec une application $g : \mathbb{F} \to \overline{\mathbb{R}}$.

Proposition 3.66 (pré-composition par une fonction affine) *Dans le cadre défini ci-dessus, si $g \in \mathrm{Conv}(\mathbb{F})$, alors pour tout $x \in \mathbb{E}$:*

$$\partial(g \circ a)(x) \supseteq A^*\Big(\partial g(a(x))\Big), \tag{3.52}$$

avec égalité si l'une des conditions suivantes est vérifiée :
- $\mathcal{R}(a) \cap (\mathrm{dom}\, g)^{\circ} \neq \varnothing$,
- $\mathcal{R}(a) \cap \mathrm{dom}\, g \neq \varnothing$ *et* g *est aussi polyédrique.*

Démonstration. Démontrons (3.52). Soit $y^* \in \partial g(a(x))$, supposé non vide. Alors, pour tout $x' \in \mathbb{E}$, on a $(g \circ a)(x') = g(a(x')) \geqslant g(a(x)) + \langle y^*, A(x' - x)\rangle = (g \circ a)(x) + \langle A^* y^*, x' - x\rangle$, ce qui montre que $A^* y^* \in \partial(g \circ a)(x)$.

Démontrons l'égalité en (3.52) lorsque $\mathcal{R}(A) \cap (\mathrm{dom}\, g)^{\circ} \neq \varnothing$ [resp. lorsque g est convexe polyédrique et $\mathcal{R}(A) \cap (\mathrm{dom}\, g) \neq \varnothing$]. Dans ce cas, $g \circ a \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$ (proposition 3.31). Soit $x^* \in \partial(g \circ a)(x)$ avec $x \in \mathrm{dom}(g \circ a)$, ce qui s'écrit (proposition 3.49)

$$(g \circ a)^*(x^*) + (g \circ a)(x) = \langle x^*, x\rangle.$$

En introduisant $g_0 \in \mathrm{Conv}(\mathbb{F})$ par $g_0(y) = g(y + b)$, on peut écrire $g \circ a = g_0 \circ A$. La relation ci-dessus implique que $(g_0 \circ A)^*(x^*)$ est fini. D'autre part, $\mathcal{R}(A) \cap (\mathrm{dom}\, g_0)^{\circ} = (\mathcal{R}(a) - b) \cap (\mathrm{dom}\, g - b)^{\circ} = (\mathcal{R}(a) \cap (\mathrm{dom}\, g)^{\circ}) - b$, qui est donc non vide [on trouve que $\mathcal{R}(A) \cap \mathrm{dom}\, g_0$ est non vide dans le cas polyédrique]. D'après la proposition 3.46, il existe alors un $y^* \in \mathbb{F}$ tel que $A^* y^* = x^*$ et $(g_0 \circ A)^*(x^*) = g_0^*(y^*)$. On en déduit que $(g \circ a)^*(x^*) = g_0^*(y^*) = g^*(y^*) - \langle y^*, b\rangle$. La relation ci-dessus devient

$$g^*(y^*) + g(a(x)) = \langle A^* y^*, x\rangle + \langle y^*, b\rangle = \langle y^*, a(x)\rangle.$$

Elle exprime que $y^* \in \partial g(a(x))$ (proposition 3.49) ; donc $x^* \in A^*(\partial g(a(x)))$. □

La démonstration du corollaire suivant est proposée à l'exercice 3.26. Le résultat doit être différencié du point 1 du théorème 3.58.

Corollaire 3.67 (restriction à un sous-espace affine) *Soient $\mathbb{E}_0$ un sous-espace vectoriel de $\mathbb{E}$, $\mathrm{P}_{\mathbb{E}_0}$ le projecteur orthogonal de $\mathbb{E}$ sur $\mathbb{E}_0$, $x_0 \in \mathbb{E}$ et $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$. On note $f|_{x_0+\mathbb{E}_0} : x \in \mathbb{E}_0 \mapsto f(x_0 + x)$ la restriction de f à $x_0 + \mathbb{E}_0$. Alors en $x \in \mathbb{E}_0$, on a*

$$\partial(f|_{x_0+\mathbb{E}_0})(x) \supseteq \mathrm{P}_{\mathbb{E}_0}\Big(\partial f(x_0 + x)\Big), \tag{3.53}$$

avec égalité si l'une des conditions suivantes est vérifiée :
- $(x_0 + \mathbb{E}_0) \cap (\mathrm{dom}\, f)^{\circ} \neq \varnothing$,
- $(x_0 + \mathbb{E}_0) \cap (\mathrm{dom}\, f) \neq \varnothing$ *et* f *est aussi polyédrique.*

Replaçons-nous dans le cadre défini à la section 3.4.1. Soient $\mathbb{E}$ un espace vectoriel, $F : \mathbb{E} \to (\mathbb{R} \cup \{+\infty\})^m$ une fonction convexe (composante par composante) et g :

$\mathbb{R}^m \to \overline{\mathbb{R}}$ une fonction convexe *croissante* (pour l'ordre habituel de $\mathbb{R}^m$). On sait qu'alors la fonction composée $(g \circ F)$ définie en $x \in \mathbb{E}$ par

$$(g \circ F)(x) = \begin{cases} g(F(x)) & \text{si } F(x) \in \mathbb{R}^m \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$

est convexe (proposition 3.32). On s'intéresse ici à sa sous-différentiabilité. Pour rendre les notations plus compactes, on écrira

$$\partial F(x) := \partial F_1(x) \times \cdots \times \partial F_m(x) \subseteq \mathbb{E}^m.$$

Rappelons que si F et g sont à valeurs finies et différentiables, on a

$$(g \circ F)'(x) = g'(x) \circ F'(x).$$

Le résultat suivant généralise cette identité.

Proposition 3.68 (post-composition par une fonction convexe croissante) *Dans le cadre défini ci-dessus, le sous-différentiel de $g \circ F$ en $x \in \mathbb{E}$ est donné par*

$$\partial(g \circ F)(x) = \left\{ \sum_{i=1}^{m} \gamma_i x_i^* : \gamma \in \partial g(F(x)),\ x_i^* \in \partial F_i(x),\ \textit{for } i \in [1:n] \right\}.$$

Démonstration. □

Ce résultat a de nombreuses conséquences pratiques. On en déduit par exemple que le carré (ou la puissance $p \geqslant 2$) d'une fonction convexe *positive* est convexe.

Fonction marginale

Rappelons le cadre introduit à la section 3.4.3. On dispose de deux espaces euclidiens $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ et d'une fonction $\varphi : \mathbb{E} \times \mathbb{F} \to \overline{\mathbb{R}}$. La fonction marginale $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ associée à φ est définie en $x \in \mathbb{E}$ par

$$f(x) = \inf_{y \in \mathbb{F}} \varphi(x, y). \tag{3.54}$$

Le sous-différentiel de f dépend de celui de φ qui est supposé calculé pour le produit scalaire de $\mathbb{E} \times \mathbb{F}$ suivant : $\langle (x, y), (x', y') \rangle = \langle x, x' \rangle + \langle y, y' \rangle$.

Proposition 3.69 (fonction marginale) *Dans le cadre défini ci-dessus, supposons que $\varphi \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E} \times \mathbb{F})$ et que $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$. Si $x \in \operatorname{dom} f$ et $f(x) = \varphi(x, y_x)$ pour un certain $y_x \in \mathbb{F}$ (i.e., l'infimum en (3.54) est atteint en y_x), alors*

$$\partial f(x) = \{x^* : (x^*, 0) \in \partial\varphi(x, y_x)\}.$$

DÉMONSTRATION. On a les équivalences suivantes :

$$\begin{aligned}
& x^* \in \partial f(x) \\
& \iff f(x') \geqslant f(x) + \langle x^*, x' - x\rangle, \quad \forall\, x' \in \mathbb{E} \qquad \text{[proposition 3.49 } (ii)\text{]} \\
& \iff \varphi(x', y') \geqslant \varphi(x, y_x) + \langle (x^*, 0), (x', y') - (x, y_x)\rangle, \quad \forall\, (x', y') \in \mathbb{E} \times \mathbb{F} \qquad (3.55) \\
& \iff (x^*, 0) \in \partial\varphi(x, y_x) \qquad \text{[proposition 3.49 } (ii)\text{]}.
\end{aligned}$$

L'implication directe $\boxed{\Rightarrow}$ dans (3.55) vient de l'inégalité $f(x') \leqslant \varphi(x', y')$ qui est vérifiée pour tout $y' \in \mathbb{F}$ et de l'égalité $f(x) = \varphi(x, y_x)$. L'implication réciproque $\boxed{\Leftarrow}$ dans (3.55) vient de ce que le membre de droite est indépendant de y', si bien que l'on peut donc prendre la borne inférieure en y' dans le membre de gauche sans modifier l'inégalité. □

Remarques 3.70 1. Il faut bien noter que, si la borne inférieure $\inf_y \varphi(x, y)$ est atteinte en plusieurs y_x, $\{x^* : (x^*, 0) \in \partial\varphi(x, y_x)\}$ ne dépend pas du minimiseur y_x choisi. C'est une conséquence de la démonstration.

On a un autre éclairage sur cette indépendance par rapport à y_x en observant que φ est constante sur l'ensemble $M(x) := \{(x, y_x) : y_x \text{ minimise } \varphi(x, \cdot)\}$, si bien que $\partial\varphi$ est aussi constant sur l'*intérieur relatif* de $M(x)$ (exercice 3.34). Cependant $\partial\varphi(x, y_x)$ peut varier lorsque (x, y_x) passe de l'intérieur relatif de $M(x)$ à son bord. C'est le cas de la fonction définie par $\varphi(x, y) = \max(0, |y| - 1)$, dont la fonction marginale est nulle :

$$M(x) = \{x\} \times [-1, 1] \qquad \text{et} \qquad \partial\varphi(x, y_x) = \begin{cases} \{0\} \times [-1, 0] & \text{si } y = -1 \\ \{(0, 0)\} & \text{si } -1 < y < 1 \\ \{0\} \times [0, 1] & \text{si } y = 1. \end{cases}$$

Malgré cela, quel que soit le y_x choisi dans $[-1, 1]$, le sous différentiel de f en x est toujours réduit à $\{0\}$.

2. D'autre part, si φ est différentiable en (x, y_x), où y_x est un minimiseur quelconque de $\varphi(x, \cdot)$, alors f est également différentiable en x (car son sous-différentiel est un singleton) et on a
$$\nabla f(x) = \nabla_x \varphi(x, y_x).$$
C'est comme s'il y avait un minimiseur unique $y_x := \eta(x)$, fonction différentiable de x, que l'on écrivait $f(x) = \varphi(x, \eta(x))$ et que l'on calculait $\nabla f(x)$ par une dérivation en chaîne :
$$\nabla f(x) = \nabla_x \varphi(x, \eta(x)) + \eta'(x)^* \nabla_y \varphi(x, \eta(x)).$$
On retrouverait le résultat ci-dessus en observant que $\nabla_y \varphi(x, \eta(x)) = 0$ car $\eta(x)$ minimise $\varphi(x, \cdot)$.

3. Le fait que $\varphi(x,\cdot)$ ait un minimum unique n'implique nullement la différentiabilité de la fonction marginale en x. Par exemple, f est la fonction marginale de φ définie par $\varphi(x,y_x) = f(x) + y_x^2$. Cette dernière a un minimum $y_x = 0$ unique en y quel que soit x, alors que f peut ne pas être différentiable.

Enveloppe supérieure

Considérons à présent le cas de l'enveloppe supérieure

$$f := \sup_{i\in I} f_i$$

de fonctions convexes $f_i : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$, pour i dans un ensemble quelconque I, dont les éléments sont appelés indices ci-dessous. Rappelons de la section 3.4.2, qu'elle est définie en $x \in \mathbb{E}$ par

$$f(x) = \sup_{i\in I}\Big(f_i(x)\Big).$$

On aura besoin de désigner l'ensemble des indices des fonctions f_i valant $f(x)$ en $x \in \mathbb{E}$:

$$I^0(x) := \{i \in I : f(x) = f_i(x)\}.$$

Proposition 3.71 (enveloppe supérieure I) *Dans le cadre défini ci-dessus, si les f_i sont convexes et $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$, alors pour tout $x \in \mathrm{dom}\, f$, on a*

$$\partial f(x) \supseteq \overline{\mathrm{co}}\left(\bigcup_{i\in I^0(x)} \partial f_i(x)\right). \tag{3.56}$$

Démonstration. Soient $x \in \mathrm{dom}\, f$, $i \in I^0(x)$ et $x_i^* \in \partial f_i(x)$. Comme un sous-différentiel est un ensemble convexe fermé (proposition 3.58), il suffit de montrer que $x_i^* \in \partial f(x)$. Quel que soit $y \in \mathbb{E}$, on a

$$\begin{aligned} f(y) &\geqslant f_i(y) \quad [\text{par définition de } f] \\ &\geqslant f_i(x) + \langle x_i^*, y - x\rangle \quad [\text{car } x_i^* \in \partial f_i(x)] \\ &= f(x) + \langle x_i^*, y - x\rangle \quad [\text{car } i \in I^0(x)]. \end{aligned}$$

Ceci montre que $x_i^* \in \partial f(x)$ (point (ii) de la proposition 3.49). □

La proposition 3.71 montre en particulier, que $\partial f(x) \neq \varnothing$, si l'un des $\partial f_i(x) \neq \varnothing$, avec $i \in I^0(x)$. Il se pourrait cependant que $I^0(x) = \varnothing$ ou que $\partial f_i(x) = \varnothing$ pour tout $i \in I^0(x)$, auxquels cas cette proposition ne donne pas d'information. Ce dernier cas se présente, par exemple, lorsque les fonctions f_i sont obtenues en divisant par $i \in \mathbb{N}^*$ (ou en mulitpliant par $i \in]0,1]$) la fonction définie en (3.8) (l'opposée de la racine carrée) : $I^0(0) = \mathbb{N}^*$, mais tous les $\partial f_i(0) = \varnothing$, alors que f est l'indicatrice de $\mathbb{R}_+$ et a donc un sous-différentiel $\partial f(0) =]-\infty, 0[$ non vide.

L'identification de conditions pour avoir l'égalité en (3.56) est un problème délicat. Un des résultats les plus simples est le suivant. Pour des résultats plus fins, on pourra consulter la section VI.4.4 dans [295 ; 1993].

Proposition 3.72 (enveloppe supérieure II) *Dans le cadre défini ci-dessus, supposons que*

- *les f_i sont convexes,*
- *I est compact,*
- *$\forall\, x \in \operatorname{dom} f$, $i \mapsto f_i(x)$ est semi-continue supérieurement,*

alors pour tout $x \in (\operatorname{dom} f)^\circ$:

$$\partial f(x) = \operatorname{co}\left(\bigcup_{i \in I^0(x)} \partial f_i(x) \right). \tag{3.57}$$

Démonstration. □

3.7 Proximalité ⊖

3.7.1 Opérateur proximal

Voir le syllabus complet.

3.7.2 Régularisée de Moreau-Yosida

Voir le syllabus complet.

3.8 Point-selle et convexité-concavité

3.8.1 Point-selle

La notion de point-selle (n dit aussi point-col) est très générale, comme l'est celle d'un minimum d'une fonction. Elle est attachée à des fonctions définies sur un produit d'ensembles n'ayant, a priori, pas de structure particulière.

Définitions 3.73 Soient X et Y deux ensembles et $\varphi : X \times Y \to \overline{\mathbb{R}}$. On dit que $(\bar{x}, \bar{y}) \in X \times Y$ est un *point-selle* de φ sur $X \times Y$ si

$$\forall (x, y) \in X \times Y : \qquad \varphi(\bar{x}, y) \leqslant \varphi(\bar{x}, \bar{y}) \leqslant \varphi(x, \bar{y}). \tag{3.58}$$

Dans les conditions ci-dessus, $\varphi(\bar{x}, \bar{y})$ est appelée la *valeur-selle* de φ. □

Autrement dit, $(\bar{x}, \bar{y})$ est un point-selle de φ si, et seulement si, $x \mapsto \varphi(x, \bar{y})$ atteint un minimum en $\bar{x}$ et $y \mapsto \varphi(\bar{x}, y)$ atteint un maximum en $\bar{y}$. Rien n'est requis en dehors de la « croix » $(\{\bar{x}\} \times Y) \cup (X \times \{\bar{y}\})$, si bien l'image de la selle ou du col à laquelle fait réfeerence l'appellation peut être trompeuse comme lorsque $\varphi : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ est définie par $\varphi(x, y) = x^2 y^2$ (tous les points de l'axe des ordonnées sont des points-selles). Enfin, on pourra souvent se ramener à la définition précédente par un changement variable. Par exemple, le point $(0, 0) \in \mathbb{R}^2$ n'est pas un point-selle de la fonction $(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mapsto xy + (x^3 + y^3)$, au sens de la définition ci-dessus, mais le devient *localement* après le changement de variables $(x, y) \curvearrowright (\tilde{x}, \tilde{y})$ avec $\tilde{x} := x+y$ et $\tilde{y} := x-y$ (voir le tracé de droite à la figure 3.9).

La définition est illustrée à la figure 3.9 dans le cas où $X = Y = \mathbb{R}$. On y a tracé les

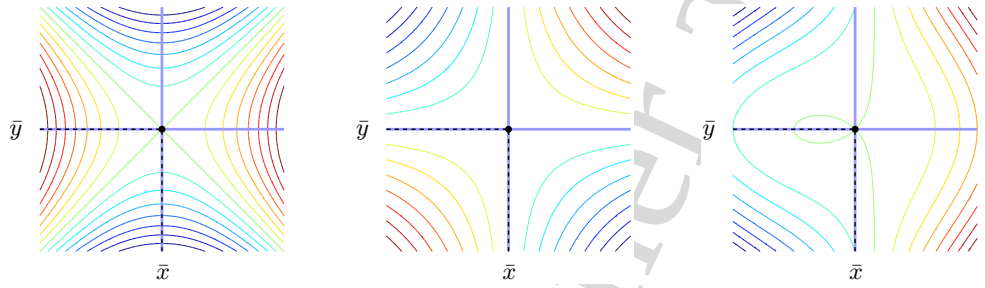


Fig. 3.9. Courbes de niveau de fonctions φ avec point-selle $(\bar{x}, \bar{y}) = (0, 0)$: $\varphi(x, y) = x^2 - y^2$ à gauche, $\varphi(x, y) = xy$ au milieu et $\varphi(x, y) = (x + y)(x - y) + (x + y)^3 + (x - y)^3$ à droite.

courbes de niveaux de trois fonctions φ. Le tracé de gauche correspond à la fonction $\varphi(x, y) = x^2 - y^2$ dont le graphe se présente comme une selle, strictement convexe suivant l'axe des abscisses et strictement concave suivant l'axe des ordonnées : il y a un unique point-selle $(\bar{x}, \bar{y}) = (0, 0)$. Le tracé du millieu est un peu moins lié à l'idée que l'on peut se faire de point-selle et correspond à la fonction $\varphi(x, y) = xy$: on a toujours le même unique point-selle $(\bar{x}, \bar{y}) = (0, 0)$. Le tracé de droite correspond à une fonction non quadratique et le point-selle $(\bar{x}, \bar{y}) = (0, 0)$ n'est que local en x.

La notion de point-selle joue un rôle important en dualité min-max (section 13.1) ; en particulier par le résultat énoncé au téorème 13.3.

3.8.2 Fonction convexe-concave ▲ ⊖

Voir le syllabus complet.

Notes

Bien que long, ces deux premiers chapitres ne donnent qu'un aperçu, utile à l'optimisation, de l'immense théorie qu'est l'Analyse Convexe. On en apprendra davantage en travaillant les monographies de Rockafellar [462 ; 1970], d'Hiriart-Urruty et Lemaréchal [295 ; 1993] et de Borwein et Lewis [68 ; 2000]. Elles traitent toutes les trois

de la théorie en dimension finie et sont orientées vers l'optimisation. Elles ont été nos trois sources d'information principales. L'ouvrage de Rockafellar est très complet, mais difficile. On trouve chez Hiriart-Urruty et Lemaréchal à peu près tout ce dont on a besoin d'analyse convexe en optimisation et on y apprend à manier chaque notion avec de multiples points de vue. Le livre de Borwein et Lewis se concentre sur l'essentiel et laisse au lecteur la possibilité de mettre à l'épreuve ses connaissances et sa maîtrise du sujet sur de nombreux exercices instructifs et stimulants. Mentionnons aussi la monographie d'Auslender et Teboulle [26] consacrée à l'extension des notions de cônes et fonctions asymptotiques à l'optimisation non convexe et à l'étude des inéquations variationnelles.

Les livres d'Ekeland et Temam [177 ; 1974] et de Barbu et Precupanu [31 ; 1975] sont des classiques de la dimension infinie. Pour des traitements plus récents, on pourra consulter Aubin et Ekeland [22 ; 1984], Phelps [433 ; 1993] qui synthétise les questions touchant aux liens entre la différentiabilité des fonctions convexes et la structure des espaces de Banach sur lesquels elles sont définies (*espaces d'Asplund* en particulier) Bonnans et Shapiro [67 ; 2000] et Borwein et Vanderwerff [69 ; 2010].

La notion de fonction conjuguée fut introduite par Mandelbrojt [373 ; 1939] pour une fonction d'une seule variable réelle ; il montre la relation $f^{**} = f$ pour une fonction convexe ne prenant que des valeurs finies. L'opération de conjugaison est précisée et améliorée par Fenchel [188 ; 1949], qui l'étend aux fonctions convexes dépendant d'un nombre fini de variables et qui introduit la notation f^*. La conjugaison généralise une transformation de fonction introduite bien plus tôt par Legendre [357 ; 1787]. L'extension aux espaces vectoriels topologiques est due à Brondsted [81 ; 1964], Moreau [404 ; 1967] et Rockafellar.

L'expression « règle de bascule » (corollaire 3.52) a été empruntée à Hiriart-Urruty [294] et celle « formule du max » (proposition 3.60) à Borwein et Lewis [68]. Le caractère monotone maximal du sous-différentiel a été mis en évidence par Minty [390 ; 1964] et Moreau [403 ; 1965].

Le lecteur trouvera des compléments sur la régularisée de Moreau-Yosida dans le très bel article de Moreau [403], sur lequel nous nous sommes en partie fondés. Cette notion s'étend aux opérateurs monotones maximaux (voir par exemple [78, 79]). On peut aussi prendre des pénalisations autres que la pénalisation quadratique pour construire cette régularisée [511, 172 ; 1992-93].

Exercices

3.1. *Épigraphe d'une fonction.* Soit $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$. Alors
1) $\operatorname{aff}(\operatorname{epi} f) = (\operatorname{aff}(\operatorname{dom} f)) \times \mathbb{R}$,
2) f est convexe si, et seulement si, son épigraphe stricte est convexe,
3) si f est convexe, alors $(\operatorname{epi} f)^\circ = \{(x, \alpha) : x \in (\operatorname{dom} f)^\circ,\ f(x) < \alpha\}$.

3.2. *Autre définition d'une fonction convexe.* Soit $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ une fonction. Alors f est convexe si, et seulement si,

$$\forall\, x, y \in \operatorname{dom} f, \quad \forall\, t \notin [0,1] : \qquad f((1-t)x + ty) \geqslant (1-t)f(x) + tf(y). \tag{3.59}$$

3.3. *Fonction convexe propre.* Soient $\mathbb{E}$ un espace vectoriel et $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ une fonction convexe. S'il existe $x \in (\operatorname{dom} f)^\circ$ tel que $f(x) > -\infty$, alors f est propre.

3.4. *Inégalités de convexité.* Soient $\mathbb{E}$ un espace vectoriel (de dimension finie).

1) *Inégalité de Jensen* [312, 313]. Une fonction $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ est convexe si, et seulement si, pour tout m-uplet $(t_1, \dots, t_m) \in \Delta_m$ et pour tout $(x_1, \dots, x_m) \in (\operatorname{dom} f)^m$, on a
$$f\left(\sum_{i=1}^m t_i x_i\right) \leqslant \sum_{i=1}^m t_i f(x_i). \tag{3.60}$$
2) *Inégalité de Jensen, version intégrale.* Une fonction $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ est convexe si, et seulement si, pour tout espace de probabilité $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$ et toute fonction $(\mathcal{A}, \mu)$-intégrable $F : \Omega \to \mathbb{E}$ telle que $\int_\Omega F \,\mathrm{d}\mu \in \operatorname{dom} f$, on a
$$f\left(\int_\Omega F \,\mathrm{d}\mu\right) \leqslant \int_\Omega (f \circ F) \,\mathrm{d}\mu. \tag{3.61}$$
3) On suppose que f est convexe et on se donne x_0, $x_1 \in \operatorname{dom} f$ et $t > 1$ tels que $(1-t)x_0 + tx_1 \in \operatorname{dom} f$. Alors $f((1-t)x_0 + tx_1) \geqslant (1-t)f(x_0) + tf(x_1)$.
4) *Inégalité géométrico-arithmétique.* La moyenne géométrique est inférieure à la moyenne arithmétique : si $\{a_i\}_{i=1}^n$ sont n nombres positifs, on a
$$\left(\prod_{i=1}^n a_i\right)^{1/n} \leqslant \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n a_i. \tag{3.62}$$
Remarque. Pour retenir le sens de cette inégalité, il suffit de constater que l'inégalité inverse n'a pas lieu si un des a_i est nul et un autre ne l'est pas.

3.5. *Fonction asymptotique d'une pré-composition par une fonction affine.* Démontrez la proposition 3.29.

3.6. *Inf-convolution.* Démontrez la proposition 3.35 sur l'inf-convolution, ainsi que les propriétés suivantes :

1) $f \leqslant g \Longrightarrow f \boxplus h \leqslant g \boxplus h$,
2) $f \boxplus \mathcal{I}_{\{0\}} = f$,
3) $\mathcal{I}_A \boxplus \mathcal{I}_B = \mathcal{I}_{A+B}$.

3.7. *Courbes de niveau d'une fonction convexe.* Chaque dessin A, B et C de la figure 3.10 représente 3 courbes de niveau (iso-valeurs) d'une fonction f définie sur $\mathbb{R}^2$ à valeurs

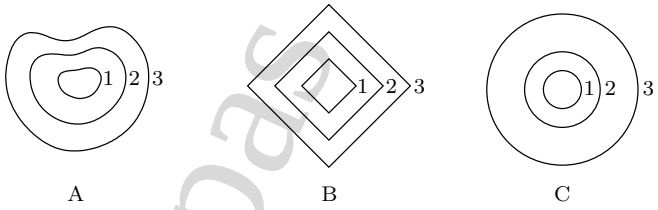


Fig. 3.10. Courbes de niveau d'une fonction convexe ?

dans $\mathbb{R}$. De manière plus précise, la courbe étiquetée « i » ($i = 1, 2, 3$) représente l'ensemble $\{x \in \mathbb{R}^2 : f(x) = i\}$. Ces fonctions peuvent-elles être convexes ?

3.8. *Fonction quadratique convexe.* On considère la fonction réelle définie sur $\mathbb{R}^n$ par $f(x) = g^\mathsf{T} x + \frac{1}{2} x^\mathsf{T} H x$, où $g \in \mathbb{R}^n$ et H est une matrice d'ordre n symétrique.

1) Montrez que f est convexe si, et seulement si, $H \succcurlyeq 0$.
2) Montrez que f est strictement convexe si, et seulement si, $H \succ 0$.
3) Calculez le cône asymptotique commun aux ensembles de sous-niveau non vides de f lorsque $H \succcurlyeq 0$ (voir la proposition 3.28).

3.9. *Exemples d'inf-convolution.* Soient A et B deux opérateurs auto-adjoints sur un espace euclidien $\mathbb{E}$. On note $x \mapsto f(x) = \langle Ax, x\rangle$ et $x \mapsto g(x) = \langle Bx, x\rangle$ les formes quadratiques associées. Calculez $f \boxplus g$.

3.10. *Différentiabilité directionnelle de la fonction max.* Pour $i \in [1\,{:}\,m]$, on suppose données des fonctions $f_i : \mathbb{E} \to \mathbb{R}$ qui en $x \in \mathbb{E}$ sont continues et ont des dérivées directionnelles. On note $f_{\max} : R \to \mathbb{R}$ la fonction max, définie par $f_{\max}(x) = \max_{1\leqslant i\leqslant m} f_i(x)$, et $I(x) := \{i \in [\![1, m]\!] : f_i(x) = f_{\max}(x)\}$. Alors

$$f'_{\max}(x; d) = \max_{i\in I(x)} f'_i(x; d).$$

3.11. *Caractérisation de la forte convexité d'une fonction.* Démontrez la proposition 3.23.

3.12. *Problème d'optimisation sans solution.* Soient $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$, $X \subseteq \mathbb{R}^n$ et $\|\cdot\|$ une norme sur $\mathbb{R}^m$. On considère le problème $\min\{\|F(x)\| : x \in X\}$. On suppose que $0 \notin F(X)$ et que $F(X)$ est un ouvert. Montrez que :

1) ce problème n'a pas de solution,
2) si F est continue et $\{x_k\}$ est une suite minimisante, ou bien $\|x_k\| \to \infty$, ou bien $\liminf \mathrm{d}_{X^c}(x_k) = 0$ ($\mathrm{d}_{X^c}(x_k)$ est la distance de x_k au complémentaire de X, supposée infinie si $X = \mathbb{R}^n$).

Remarque. Ce résultat s'applique par exemple au problème $\min\{e^x : x \in \mathbb{R}\}$.

3.13. *Minimisation concave.* Supposons qu'un problème de minimisation d'une *fonction concave* f sur un ensemble *convexe* C ait une solution x_*. Alors f prend sa valeur minimale $f(x_*)$ sur la face de C engendrée par x_*. En particulier, si C est fermé et a un point extrême, le problème a un minimum en un point extrême de C.

3.14. *Optimisation multicritère, Pareto optimalité* [309]. Soient X un ensemble et $f : X \to \mathbb{R}^m$ une fonction. On considère les composantes de f comme m critères à minimiser (on parle d'*optimisation multicritère*). On dit que $x_* \in X$ est *Pareto optimal* s'il n'existe pas de $x \in X$ vérifiant $f_i(x) < f_i(x_*)$ pour tout i, ce qui s'écrit aussi

$$\forall\, x \in X, \quad \max_{1\leqslant i\leqslant m} \Big(f_i(x) - f_i(x_*)\Big) \geqslant 0.$$

On dit que $x_* \in X$ est *moyennement optimal* s'il existe un $r \in \mathbb{R}^m_+$, *non nul*, tel que x_* minimise $x \mapsto r^{\mathsf{T}} f(x)$ sur X.

1) Montrez que x_* est Pareto optimal si, et seulement si, $(f(x_*) - \mathbb{R}^m_{++}) \cap f(X) = \varnothing$.
2) On a représenté à la figure 3.11, dans le cas où $m = 2$, un exemple d'ensemble $f(X)$. Déterminez dans celui-ci l'image par f des points Pareto optimaux et l'image par f des points moyennement optimaux.
3) Montrez qu'un point moyennement optimal est Pareto optimal.
4) Montrez que, lorsque $f(X) + \mathbb{R}^m_+$ est convexe (a fortiori lorsque $f(X)$ est convexe), un point Pareto optimal est moyennement optimal.
5) Montrez que $f(X) + \mathbb{R}^m_+$ est convexe si X est convexe et si les fonctions f_i sont convexes ; alors que $f(X)$ ne l'est pas nécessairement.

3.15. *Propriétés particulières aux fonctions convexes polyédriques.* Soient f, f_1 et f_2 des fonctions convexes polyédriques. Alors

1) $f_1 + f_2$ est polyédrique,
2) $f_1 \boxplus f_2$ est polyédrique, $\operatorname{epi} f_1 \boxplus f_2 = \operatorname{epi} f_1 + \operatorname{epi} f_2$ et l'infimum dans la définition de $(f_1 \boxplus f_2)(x)$ est atteint pour tout $x \in \operatorname{dom}(f_1 \boxplus f_2) = \operatorname{dom} f_1 + \operatorname{dom} f_2$,
3) f^* est polyédrique.

3.16. *Calcul de fonctions conjuguées.* On note $\langle\cdot,\cdot\rangle$ le produit scalaire utilisé pour définir la conjuguée.

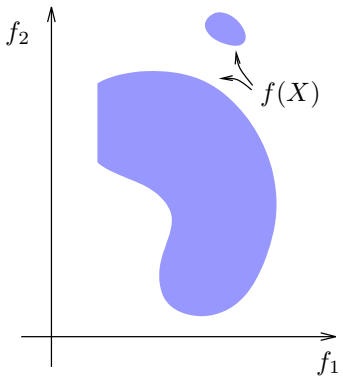


Fig. 3.11. Un ensemble $f(X)$ dans $\mathbb{R}^2$

1) *Fonction quadratique strictement convexe.* Soient Q une matrice auto-adjointe définie positive (pour le produit scalaire $\langle\cdot,\cdot\rangle$), $q \in \mathbb{R}^n$ et $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ la fonction quadratique définie par

$$f(x) = \frac{1}{2}\langle Qx, x\rangle + \langle q, x\rangle.$$

Alors, pour tout $x^* \in \mathbb{R}^n$,

$$f^*(x^*) = \frac{1}{2}\langle Q^{-1}(x^*-q), (x^*-q)\rangle.$$

Si Q est seulement semi-définie positive, on a $f^*(Qx+q) = \frac{1}{2}\langle Qx, x\rangle$ pour tout $x \in \mathbb{R}^n$ et $f^*(x^*) = +\infty$ si $x^* \notin \mathcal{R}(Q) + q$.

2) Si $g(x) = f(x) + \alpha$, alors $g^*(x^*) = f^*(x^*) - \alpha$.

3) *Monotonie.* Si f, $g : \mathbb{E} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ sont propres avec une minorante affine et $f \leqslant g$, alors $f^* \geqslant g^*$.

4) *Enveloppe inférieure.* Soient I un ensemble d'indices quelconque et, pour $i \in I$, des fonctions $f_i : \mathbb{E} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ propres ayant une minorante affine commune, c.-à-d., $\exists\, x_0^* \in \mathbb{E}$ tel que $\sup_{i\in I} f_i^*(x_0^*) < +\infty$. Alors leur enveloppe inférieure $f_{\inf} : \mathbb{E} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ définie en x par $f_{\inf}(x) = \inf_{i\in I} f_i(x)$ est propre avec une minorante affine et on a

$$f_{\inf}^* = \sup_{i\in I} f_i^*.$$

5) *Enveloppe supérieure.* Soient I un ensemble d'indices quelconque et, pour $i \in I$, des fonctions $f_i \in \overline{\mathrm{Conv}}(\mathbb{E})$ telles que leur enveloppe supérieure $f_{\sup} : \mathbb{E} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ définie en x par $f_{\sup}(x) = \sup_{i\in I} f_i(x)$ ait un domaine non vide. Alors $f_{\sup} \in \overline{\mathrm{Conv}}(\mathbb{E})$ et on a

$$f_{\sup}^* = \left(\inf_{i\in I} f_i^*\right)^{**}.$$

3.17. *Minimum de f et f^{**}.* Soient $\mathbb{E}$ un espace euclidien et $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ une fonction non nécessairement convexe. Montrez que

1) $\inf f = \inf f^{**}$,
2) $\overline{\mathrm{co}}(\arg\min f) \subseteq \arg\min f^{**}$ (l'égalité n'a pas nécessairement lieu),

3) si f est propre et fermée, si $\arg\min f \neq \varnothing$ et si $\arg\min f^{**}$ est borné, alors $\overline{\mathrm{co}}(\arg\min f) = \arg\min f^{**}$.

3.18. *Enveloppe convexe fermée de fonctions convexes.* Soient f, f_1 et $f_2 \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$.
1) Si $x_0 \in (\mathrm{dom}\, f)^\circ$ et $x \in \mathbb{E}$, alors $f^{**}(x) = \lim_{t\uparrow 1} f((1-t)x_0 + tx)$.
2) $\mathrm{aff}\,\mathrm{dom}\, f = \mathrm{aff}\,\mathrm{dom}\, f^{**}$, $(\mathrm{dom}\, f)^\circ = (\mathrm{dom}\, f^{**})^\circ$ et $\mathrm{adh}\,\mathrm{dom}\, f = \mathrm{adh}\,\mathrm{dom}\, f^{**}$.
3) Si f_1 et $f_2 \in \overline{\mathrm{Conv}}(\mathbb{E})$ et $(\mathrm{dom}\, f_1) \cap (\mathrm{dom}\, f_2) \neq \varnothing$, alors $f_1 + f_2 \in \overline{\mathrm{Conv}}(\mathbb{E})$.
Si f_1 et $f_2 \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$ et $(\mathrm{dom}\, f_1)^\circ \cap (\mathrm{dom}\, f_2)^\circ \neq \varnothing$, alors $(f_1 + f_2)^{**} = f_1^{**} + f_2^{**}$.

3.19. *Fonction d'appui du sous-différentiel.* Soient $f \in \overline{\mathrm{Conv}}(\mathbb{E})$ et $x \in \mathbb{E}$ tel que $\partial f(x)$ soit non vide. Alors la fonction d'appui de $\partial f(x)$ est l'enveloppe convexe fermée de $\delta_x(\cdot) = f'(x;\cdot) : \sigma_{\partial f(x)} = \delta_x^{**} \leqslant \delta_x$.

3.20. *Allure du sous-différentiel.* Soit $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$.
1) Soient $\bar{x} \in (\mathrm{dom}\, f)^\circ$ et $\varepsilon > 0$. Montrez que $\bar{B}(0,\varepsilon) \subseteq \partial f(\bar{x})$ si, et seulement si, $f'(\bar{x};h) \geqslant \varepsilon\|h\|$ pour tout $h \in \mathbb{E}$.
2) Supposons que f soit sous-différentiable en $x \in \mathbb{E}$ et que $t \in \mathbb{R} \mapsto f(x+th)$ soit différentiable en 0. Alors $\partial f(x) \subseteq f'(x;h)h/\|h\|^2 + h^\perp$.

3.21. *Représentation du sous-différentiel.* Soit $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ une fonction convexe, dont on note $\partial f(x)$ le sous-différentiel en x pour le produit scalaire euclidien. La figure 3.12 donne quatre dessins : A, B, C et D. Dans chacun d'eux, on a noté x un point de $\mathbb{R}^2$, $\mathcal{C}$ une *partie* d'une courbe de niveau de f (c.-à-d., f est constante sur une courbe contenant $\mathcal{C}$) et S un ensemble. Pour chacun de ces dessins :
(a) dites si S peut être l'ensemble $x + \partial f(x)$,
(b) dans l'affirmative en (a) et si $S = x + \partial f(x)$, dites si x est un minimiseur de f,
(c) dans l'affirmative en (a) et (b), et si $S = x + \partial f(x)$, dites si x est l'*unique* minimiseur de f.

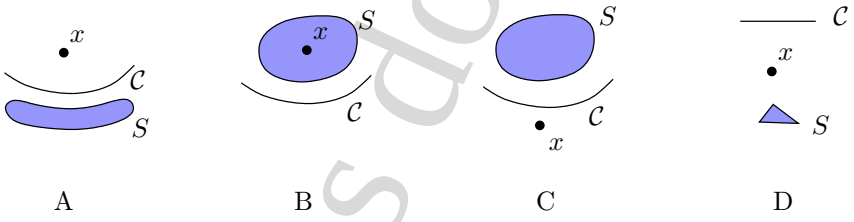


Fig. 3.12. Représentation du sous-différentiel d'une fonction convexe ?

3.22. *Sous-différentiel de fonction fortement convexe* [468 ; 1976, proposition 6]. Soient $\mathbb{E}$ un espace euclidien dont le produit scalaire est noté $\langle\cdot,\cdot\rangle$, $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$ et $\alpha > 0$. Alors les propriétés suivantes sont équivalentes :
(*i*) la fonction f est fortement convexe de module α,
(*ii*) la multifonction ∂f est fortement monotone de module α,
(*iii*) $\forall\, x \in \mathrm{dom}\, f$, $\forall\, x^* \in \partial f(x)$, $\forall\, y \in \mathbb{E}$, on a $f(y) \geqslant f(x) + \langle x^*, y - x\rangle + (\alpha/2)\|y - x\|^2$.

3.23. *Minimum saillant* [436 ; § 5.2.3]. Soient $\mathbb{E}$ un espace euclidien dont la norme est notée $\|\cdot\|$, $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$, $\bar{B}$ la boule unité fermée de $\mathbb{E}$, $\bar{x} \in \mathrm{dom}\, f$ et $\alpha > 0$ (un réel). Montrez que les propriétés suivantes sont équivalentes :
(*i*) $\forall\, x \in \mathbb{E}$: $f(x) \geqslant f(\bar{x}) + \alpha\|x - \bar{x}\|$,
(*ii*) $\forall\, d \in \mathbb{E}$: $f'(\bar{x};d) \geqslant \alpha\|d\|$,

(*iii*) $\alpha\bar{B} \subseteq \partial f(\bar{x})$.

On dit qu'un point $\bar{x}$ vérifiant ces propriétés est un *minimum saillant* de $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$.

3.24. *Ensemble saillant de minimiseurs.* Soient $\mathbb{E}$ un espace euclidien de produit scalaire noté $\langle \cdot, \cdot \rangle$ (norme associée $\|\cdot\|$), $\bar{B} := \{x \in \mathbb{E} : \|x\| \leqslant 1\}$ la boule unité fermée de $\mathbb{E}$, $f \in \overline{\mathrm{Conv}}(\mathbb{E})$ et $f_{\min} := \inf\{f(x) : x \in \mathbb{E}\}$. On suppose que $f_{\min}$ est fini et que f a un ensemble de minimiseurs $S := \{x \in \mathbb{E} : f(x) = f_{\min}\}$ non vide.

1) Montrez que, quel que soit $x \in \mathbb{E}$, le problème $\inf\{\|x-y\| : y \in S\}$ a une solution et une seule. On la note $\mathrm{P}_S(x)$.

On note $\mathrm{dist}(x, S) := \|x - \mathrm{P}_S(x)\|$ la distance de x à S, pour la norme $\|\cdot\|$. On dit que l'ensemble des minimiseurs S est *saillant* s'il existe $\alpha > 0$ tel que

$$\forall x \in \mathbb{E} : \quad f(x) \geqslant f_{\min} + \alpha\,\mathrm{dist}(x, S). \tag{3.63}$$

Dans une première partie, on se propose de montrer que cette propriété est *équivalente* à l'inclusion suivante (pour le même $\alpha > 0$)

$$S + \alpha\bar{B} \subseteq \bigcup_{x \in S} \Big(x + \partial f(x)\Big), \tag{3.64}$$

où le sous-différentiel $\partial f(x)$ de f en $x \in \mathbb{E}$ est calculé pour le produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle$.

Supposons dans un premier temps que (3.63) ait lieu et l'on se donne pour objectif de démontrer (3.64). Soient $\bar{x}_0 \in S$, $u \in \bar{B}$ et $\bar{x} := \mathrm{P}_S(\bar{x}_0 + \alpha u)$. On introduit $g := \bar{x}_0 + \alpha u - \bar{x}$.

2) Montrez que $\|g\| \leqslant \alpha$.

3) Montrez que $\forall x \in \mathbb{E}$, $f(x) \geqslant f(\bar{x}) + \langle g, x - \bar{x}\rangle$.

4) Montrez que (3.64) est vérifiée.

Supposons à présent que (3.64) ait lieu et l'on se donne pour objectif de démontrer (3.63). Soient $x \in \mathbb{E}\backslash S$ et $\bar{x} := \mathrm{P}_S(x)$.

5) Montrez qu'il existe un $\bar{x}_1 \in S$ et $g_1 \in \partial f(\bar{x}_1)$ tels que

$$\bar{x} + \alpha\,\frac{x - \bar{x}}{\|x - \bar{x}\|} = \bar{x}_1 + g_1.$$

6) Montrez que $f(x) \geqslant f_{\min} + \langle g_1, x - \bar{x}_1\rangle$ et en déduire (3.63).

Dans une seconde partie, on considère l'algorithme de minimisation de f, qui calcule en $x \in \mathbb{E}$ le nouvel itéré x_+ comme solution de

$$\inf_{y \in \mathbb{E}} \left(f(y) + \frac{1}{2}\|y - x\|^2 \right). \tag{3.65}$$

7) Sachant que les fonctions de $\overline{\mathrm{Conv}}(\mathbb{E})$ ont une minorante affine, montrez que le problème (3.65) a une solution et une seule.

8) Supposons que f ait un ensemble saillant de minimiseurs. Montrez que si x est suffisamment proche de S, alors $x_+ \in S$.

3.25. *Sous-différentiabilité et sous-lipschitzianité.* Soit $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$ et $x \in \mathrm{dom}\, f$. Montrez que $\partial f(x) \neq \varnothing$ si, et seulement si, il existe une constante $L \geqslant 0$ telle que

$$\forall\, y \in \mathbb{E} : \quad f(y) \geqslant f(x) - L\|y - x\|.$$

3.26. Démontrez le corollaire 3.67.

3.27. *Fonction indicatrice.* Soient P une partie non vide d'un espace vectoriel $\mathbb{E}$ et $\mathcal{I}_P$ son indicatrice.

1) Démontrez la proposition 3.5.

Supposons à présent que $\mathbb{E}$ soit un espace euclidien, que C soit un convexe non vide de $\mathbb{E}$, que $x \in C$ et que K est un cône non vide de $\mathbb{E}$.

2) $\mathcal{I}_P^* = \sigma_P$ et $\mathcal{I}_K^* = \mathcal{I}_{K^-}$.
3) $\partial \mathcal{I}_C(x) = \mathrm{N}_C(x)$.

3.28. *Norme.* Soient $\mathbb{E}$ un espace euclidien dont le produit scalaire est noté $\langle \cdot, \cdot \rangle$ et $f(\cdot) := \|\cdot\|$ une norme (pas nécessairement celle associée au produit scalaire). On note $\|\cdot\|_{\mathrm{D}}$ la norme duale de $\|\cdot\|$ par rapport à ce produit scalaire (voir (A.8)) et $\bar{B}_{\mathrm{D}}$ la boule-unité fermée pour la norme duale.

1) La norme $\|\cdot\|$ est une fonction convexe propre fermée, avec une minorante affine.
2) $f^* = \mathcal{I}_{\mathrm{D}}$.
3) Soit $\|\cdot\|_{\mathrm{DD}}$ la *norme biduale* de $\|\cdot\|$, c'est-à-dire la norme duale de $\|\cdot\|_{\mathrm{D}}$ par rapport au produit scalaire donné :

$$\|u\|_{\mathrm{DD}} := \sup_{\|v\|_{\mathrm{D}} \leqslant 1} \langle v, u \rangle.$$

Montrez que $\|\cdot\|_{\mathrm{DD}} = \|\cdot\|$ et que

$$\forall\, x \in \mathbb{E}, \quad \exists\, x^* \in \mathbb{E} : \quad \|x^*\|_{\mathrm{D}} = 1 \quad \text{et} \quad \langle x, x^* \rangle = \|x\|. \tag{3.66}$$

4) Le sous-différentiel de la norme s'écrit

$$\partial f(x) = \operatorname*{arg\,max}_{\|y\|_{\mathrm{D}} \leqslant 1} \langle y, x \rangle = \{x^* \in \mathbb{E} : \|x^*\|_{\mathrm{D}} \leqslant 1 \text{ et } \langle x^*, x \rangle = \|x\|\}. \tag{3.67}$$

En particulier :
- $\partial f(0) = \bar{B}_D$,
- $\|x^*\|_{\mathrm{D}} = 1$ si $x^* \in \partial f(x)$ et $x \neq 0$,
- si $\mathbb{E} = \mathbb{R}^n$, $\langle \cdot, \cdot \rangle$ est le produit scalaire euclidien, $x \neq 0$ et $p \in]1, \infty[$, on a

$$\begin{aligned} \partial(\|\cdot\|_1)(x) = \{x^* \in \mathbb{R}^n : {} & x_i^* = -1 \text{ si } x_i < 0, \\ & x_i^* \in [-1, +1] \text{ si } x_i = 0, \\ & x_i^* = +1 \text{ si } x_i > 0\}, \end{aligned} \tag{3.68a}$$

$$\nabla(\|\cdot\|_p)(x) = \{\mathrm{sgn}(x_i)(|x_i|/\|x\|_p)^{p-1}\}_{i \in [1\,:\,n]}, \tag{3.68b}$$

$$\partial(\|\cdot\|_\infty)(x) = \mathrm{co}\{\mathrm{sgn}(x_i) e^i : i \in I\}, \tag{3.68c}$$

où e^i est le i-ième vecteur de base de $\mathbb{R}^n$ et $I := \{i \in [1\,:\,n] : |x_i| = \|x\|_\infty\}$.

5) On déduit de la formule du max (3.47) que la dérivée directionnelle de la norme en $x \in \mathbb{E}$ dans la direction $h \in \mathbb{E}$ s'écrit

$$(\|\cdot\|)'(x; h) = \max_{\substack{x^* \in \bar{B}_D \\ \langle x^*, x \rangle = \|x\|}} \langle x^*, h \rangle. \tag{3.69}$$

Démontrez :
- (3.69) en utilisant directement la définition (C.1) de la dérivée directionnelle,
- $(\|\cdot\|)'(0; h) = \|h\|$,

– si $\mathbb{E} = \mathbb{R}^n$, $\langle \cdot, \cdot \rangle$ est le produit scalaire euclidien, $x \neq 0$ et $p \in]1, \infty[$, on a

$$(\|\cdot\|_1)'(x;h) = \tag{3.70a}$$
$$(\|\cdot\|_p)'(x;h) = \tag{3.70b}$$
$$(\|\cdot\|_\infty)'(x;h) = \max_{i:\ |x_i|=\|x\|_\infty} (\operatorname{sgn} x_i) h_i, \tag{3.70c}$$

3.29. *Compteur de composante non nulle.* On note $\|\cdot\|_0$ le *compteur de composante non nulle* d'un vecteur (donc $\|x\|_0$ est le nombre de composantes non nulles du vecteur $x \in \mathbb{R}^n$, voir aussi la section 17.4). On note également $\|x\|_p$ la norme ℓ_p de $x \in \mathbb{R}^n$ ($p = 1$ ou ∞) et $\bar{B}_1 := \{x \in \mathbb{R}^n : \|x\|_1 \leqslant 1\}$ la boule unité fermée de $\mathbb{R}^n$ pour la norme ℓ_1. On considère la fonction $f : \mathbb{R}^n \to \overline{\mathbb{R}}$ définie en $x \in \mathbb{R}^n$ par

$$f(x) = \|x\|_0 + \mathcal{I}_{\bar{B}_1}(x),$$

où $\mathcal{I}_{\bar{B}_1}$ est l'indicatrice de $\bar{B}_1$ ($\mathcal{I}_{\bar{B}_1}(x) = 0$ si $x \in \bar{B}_1$ et $\mathcal{I}_{\bar{B}_1}(x) = +\infty$ si $x \notin \bar{B}_1$). Montrez que sa conjuguée f^* et la biconjuguée f^{**} prennent les valeurs suivantes :

$$f^*(x^*) = (\|x^*\|_\infty - 1)^+. \tag{3.71}$$
$$f^{**}(x) = \|x\|_1 + \mathcal{I}_{\bar{B}_1}(x). \tag{3.72}$$

Remarque : on a montré que, sur la boule unité de la norme ℓ_1, $\|\cdot\|_1$ est la plus grande fonction convexe qui minore la fonction non convexe $\|\cdot\|_0$ (alors que sur $\mathbb{R}^n$ cette plus grande fonction convexe est nulle).

3.30. *Fonction maximale.* On suppose que $\mathbb{R}^n$ est muni du produit scalaire euclidien et on considère la *fonction maximale* $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ définie en $x \in \mathbb{R}^n$ par $f(x) = \max_{1 \leqslant i \leqslant n} x_i$.

1) $f \in \mathrm{C\overline{onv}}(\mathbb{R}^n)$.
2) La conjuguée f^* de f prend en $x^* \in \mathbb{R}^n$ la valeur
$$f^*(x^*) = \begin{cases} 0 & \text{si } x^* \geqslant 0 \text{ et } \sum_{i=1}^n x_i^* = 1, \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$
3) Le sous-différentiel $\partial f(x)$ de f en $x \in \mathbb{R}^n$ s'écrit
$$\partial f(x) = \operatorname{co}\{e^i : i \in I\},$$
où e^i est le i-ième vecteur de base de $\mathbb{R}^n$ et $I = \{j \in [1:n] : x_j = \max_i x_i\}$.
4) La fonction f est différentiable en x si, et seulement si, le maximum des x_i est atteint pour un seul indice i. Dans ce cas, $\nabla f(x) = e^i$.

3.31. *Valeur propre maximale.* On note $\mathcal{S}^n$ [resp. $\mathcal{S}^n_+$] l'ensemble des matrices d'ordre n symétriques [resp. symétriques semi-définies positives], que l'on munit du produit scalaire $\langle A, B \rangle = \operatorname{tr} AB$. On note $\lambda_{\max} : \mathcal{S}^n \to \mathbb{R}$ l'application valeur propre maximale.

1) La fonction $\lambda_{\max}$ est convexe.
2) La conjuguée de $\lambda_{\max}$ est donnée par
$$\lambda^*_{\max}(A^*) = \begin{cases} 0 & \text{si } A^* \in \mathcal{S}^n_+ \text{ et } \operatorname{tr} A^* = 1 \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$
3) Le sous-différentiel de $\lambda_{\max}$ est le compact donné par
$$\partial \lambda_{\max}(A) = \operatorname{co}\{vv^\mathsf{T} : \|v\|_2 = 1,\ Av = \lambda_{\max}(A) v\}.$$

4) Déduire de la formule du sous-différentiel que
   a) $\lambda_{\max}(\cdot)$ est différentiable en A si $\lambda_{\max}(A)$ est simple, et que dans ce cas $\nabla\lambda_{\max}(A) = vv^{\mathsf{T}}$, où $\pm v$ sont les uniques vecteurs propres unitaires correspondants à la valeur propre maximale ; retrouvez ce dernier résultat en utilisant le théorème des fonctions implicites (théorème C.14) ;
   b) $\partial\lambda_{\max}(0) = \{S \in \mathcal{S}^n_+ : \operatorname{tr} S = 1\}$;
   c) la dérivée directionnelle de $\lambda_{\max}$ en $A \in \mathcal{S}^n$ dans la direction $D \in \mathcal{S}^n$ s'écrit
   $$\lambda'_{\max}(A; D) = \lambda_{\max}(V^{\mathsf{T}} D V),$$
   où V est une matrice dont les colonnes forment une base orthonormale de l'espace propre associé à $\lambda_{\max}(A)$.

3.32. *Valeur propre maximale d'une matrice hermitienne.* On note $\mathcal{H}^n$ [resp. $\mathcal{H}^n_+$] l'ensemble des matrices d'ordre n hermitiennes [resp. hermitiennes semi-définies positives], que l'on munit du produit scalaire $\langle A, B\rangle = \operatorname{tr} AB$. L'écriture $A \succcurlyeq 0$ signifie que $A \in \mathcal{H}^n_+$. On note $\lambda_{\max} : \mathcal{H}^n \to \mathbb{R}$ l'application valeur propre maximale, qui est bien définie car les valeurs propres d'une matrice hermitenne sont réelles. Les résultats ci-dessous s'appliquent bien sûr aux matrices réelles symétriques, qui sont des matrices hermitiennes avec une partie imaginaire nulle.

1) Démontrez (B.17) et en déduire que la fonction $\lambda_{\max}$ est convexe.
2) La conjuguée de $\lambda_{\max}$ est donnée par
$$\lambda^*_{\max}(A^*) = \begin{cases} 0 & \text{si } A^* \succcurlyeq 0 \text{ et } \operatorname{tr} A^* = 1 \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases} \tag{3.73}$$
3) Le sous-différentiel de $\lambda_{\max}$ est le compact donné par
$$\partial\lambda_{\max}(A) = \operatorname{co}\{vv^{\mathsf{H}} : \|v\| = 1,\ Av = \lambda_{\max}(A)v\}. \tag{3.74}$$

3.33. *Distance à un convexe.* Soient $\mathbb{E}$ un espace vectoriel normé (norme notée $\|\cdot\|$) et C un ensemble convexe fermé non vide de $\mathbb{E}$. On considère la fonction $\mathrm{d}_C : \mathbb{E} \to \mathbb{R}$, la *distance à* C, définie par $\mathrm{d}_C(x) = \inf_{y\in C} \|x - y\|$.

1) d_C est convexe.

On suppose dorénavant que $\mathbb{E}$ est un espace euclidien (produit scalaire noté $\langle\cdot,\cdot\rangle$, mais la norme $\|\cdot\|$ n'est pas nécessairement celle associée à ce produit scalaire). On note $\bar{B}_D$ la boule-unité fermée pour la norme duale, $\mathrm{N}_C(x)$ le cône normal à C en x et $\bar{x}$ une projection d'un point x sur C (c'est-à-dire une solution du problème $\inf\{\|x-y\| : y \in C\}$, qui n'est pas nécessairement unique car la norme n'est pas nécessairement associée à un produit scalaire).

2) $\mathrm{d}^\infty_C = \|\,\mathrm{P}_{(C^\infty)^-}(\cdot)\|$
3) $\mathrm{d}^*_C = \mathcal{I}_{\bar{B}_D} + \sigma_C$.
4) $\partial\,\mathrm{d}_C(x) = \big\{x^* \in \bar{B}_D \cap \mathrm{N}_C(\bar{x}) : \langle x^*, x - \bar{x}\rangle = \|x - \bar{x}\|\big\}$.

On suppose à présent que la norme $\|\cdot\|$ est celle associée au produit scalaire $\langle\cdot,\cdot\rangle$.

5) Si $x \notin C$, alors d_C est différentiable en x et $\nabla\,\mathrm{d}_C(x) = (x-\bar{x})/\|x-\bar{x}\|$;
   si $x \in C^\circ$ (l'intérieur de C), alors d_C est différentiable en x et $\nabla\,\mathrm{d}_C(x) = 0$;
   si $x \in \partial C = C \setminus C^\circ$ (la frontière de C), alors $\partial\,\mathrm{d}_C(x) = \bar{B} \cap \mathrm{N}_C(x)$.
6) Montrez par un contre-exemple que si $P \subseteq \mathbb{E}$ n'est pas convexe, d_P n'est pas nécessairement différentiable sur le complémentaire de P.

3.34. *Constance du sous-différentiel.* Soit $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R}$ une fonction convexe et supposons que f soit constante sur un ensemble A. Alors ∂f est constant sur $A^\oplus$ et ce sous-différentiel commun est inclus dans celui de tout point de A.

3.35. *Ensembles de sous-niveau bornés.* Soient $\mathbb{E}$ un espace euclidien de dimension finie et $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ une application dont on considère les propriétés suivantes :

(i) f vérifie la *condition de croissance positive à l'infini* suivante

$$\liminf_{\|x\|\to\infty} \frac{f(x)}{\|x\|} := \lim_{r\to\infty} \inf_{x\notin B_r} \frac{f(x)}{\|x\|} > 0,$$

(ii) les ensembles de sous-niveau de f sont bornés,
(iii) f^* est continue en 0,
(iv) $\cup_{x\in\mathbb{E}} \partial f(x)$ est un voisinage de 0.

Montrez que

1) (i) $\Longrightarrow$ (ii), mais que la réciproque n'est pas nécessairement vraie,
2) si $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$, alors ($i$) $\Longleftrightarrow$ (ii) $\Longleftrightarrow$ (iii),
3) si $f \in \mathrm{C\overline{onv}}(\mathbb{E})$, alors ($i$) $\Longleftrightarrow$ (ii) $\Longleftrightarrow$ (iii) $\Longleftrightarrow$ (iv).

3.36. *Proximité d'une solution et petitesse d'un sous-gradient.* Soient $\mathbb{E}$ un espace euclidien de dimension finie et $f \in \mathrm{C\overline{onv}}(\mathbb{E})$. On suppose que l'ensemble $\mathcal{S}$ des minimiseurs de f est non vide et borné. Montrez que, quel que soit $r > 0$, il existe un voisinage V de $0 \in \mathbb{E}$ tel que $\mathrm{d}_{\mathcal{S}}(x) \leqslant r$ lorsque $x^* \in \partial f(x) \cap V$. Montrez par un contre-exemple que ce résultat ne tient plus si $\mathcal{S}$ n'est pas borné.

Remarque. Il n'y a pas de réciproque : x peut être proche de $\mathcal{S}$ sans qu'il y ait un petit sous-gradient en x. La valeur absolue $f = |\cdot|$ sur $\mathbb{R}$ en est un contre-exemple : $|f'(x)| = 1$ quel que soit $x \neq 0$.

3.37. *Croissance quadratique locale* (adapté de [468, 469]). Soient $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ deux espaces normés. On dit qu'une multifonction $T : \mathbb{E} \rightrightarrows \mathbb{F}$ est *localement radialement lipschitzienne de module* $L \geqslant 0$ en un point $x_0 \in \mathbb{E}$ s'il existe un voisinage V de x_0 tel que, pour tout $x \in V$ et pour tout $y \in T(x)$, on a $\mathrm{d}_{T(x_0)}(y) \leqslant L\|x - x_0\|$. On considère à présent, un espace euclidien $\mathbb{E}$ de dimension finie et une fonction $f \in \mathrm{C\overline{onv}}(\mathbb{E})$ ayant un ensemble de minimiseurs $\mathcal{S}$ non vide et borné. Montrez que les propriétés suivantes sont équivalentes ($L > 0$).

(i) ∂f^{-1} est localement radialement lipschitzienne de module L en 0,
(ii) il existe un voisinage V de $0 \in \mathbb{E}$ tel que $\mathrm{d}_{\mathcal{S}}(x) \leqslant L\|x^*\|$ lorsque $x^* \in \partial f(x) \cap V$,
(iii) il existe une constante $\alpha > 0$ et un rayon $r > 0$ tels que pour tout $x \in \mathcal{S} + \bar{B}_r$, on a $f(x) \geqslant \inf f + \alpha(\mathrm{d}_{\mathcal{S}}(x))^2$.

Si (i) ou (ii) a lieu et s'il y a un minimum unique, on peut prendre $\alpha = 1/(2L)$ dans (iii). Si (iii) a lieu, on peut prendre $L = 1/\alpha$ dans (i) ou (ii).

3.38. *Point proximal limite.* Soient $\mathbb{E}$ un espace euclidien de dimension finie, $f \in \mathrm{C\overline{onv}}(\mathbb{E})$ et $r > 0$. On note $x_p(r)$ le point proximal de $x \in \mathbb{E}$, défini comme l'unique solution de

$$\inf_{y\in\mathbb{E}} \left(f(y) + \frac{1}{2r}\|y - x\|^2 \right).$$

Montrez que lorsque $r \uparrow \infty$:

(i) $\|x_p(r) - x\|$ croît,
(ii) $f(x_p(r))$ décroît,
(iii) si $\arg\min f \neq \varnothing$, $x_p(r)$ converge vers la projection de x sur $\arg\min f$.

3.39. *Proximalité pondérée.* Cet exercice propose d'étendre la notion de point proximal au cas d'une pénalisation quadratique générale. Soient $\mathbb{E}$ un espace euclidien (produit scalaire $\langle\cdot,\cdot\rangle$ et norme associée $\|\cdot\|$) et $f \in \mathrm{C\overline{onv}}(\mathbb{E})$. On se donne un opérateur auto-adjoint défini positif M auquel on associe un produit scalaire $\langle\cdot,\cdot\rangle_M = \langle M\cdot,\cdot\rangle$

et une norme $\|\cdot\|_M = \langle\cdot,\cdot\rangle_M^{1/2}$. Pour x donné dans $\mathbb{E}$, le point proximal, toujours noté x_p, est ici défini comme l'unique solution de

$$\inf_{y\in\mathbb{E}} \left(f(y) + \frac{1}{2}\|y-x\|_M^2 \right). \tag{3.75}$$

On note $P_{f,M} : \mathbb{E} \to \mathbb{E} : x \mapsto x_p$ l'application proximale pondérée par M. Le sous-différentiel ∂f est calculé par rapport au produit scalaire non pondéré $\langle\cdot,\cdot\rangle$. Montrez que

(*i*) $\tilde{x} = P_{f,M}(x) \iff \exists\, \tilde{g} \in \partial f(\tilde{x}) : \tilde{x} = x - M^{-1}\tilde{g}$,
(*ii*) $I - P_{f,M} = M^{-1} \circ P_{f^*,M^{-1}} \circ M$,
(*iii*) pour tout x et $y \in \mathbb{E}$, $\langle y_p - x_p, y - x\rangle_M \geqslant \|y_p - x_p\|_M^2$,
(*iv*) pour tout x et $y \in \mathbb{E}$, $\|y_p - x_p\|_M^2 + \|g_p^y - g_p^x\|_{M^{-1}}^2 \leqslant \|y-x\|_M^2$, où $g_p^x = M^{-1}(x-x_p)$ et $g_p^y = M^{-1}(y-y_p)$.

3.40. *Régularisée de Moreau-Yosida d'une fonction quadratique convexe.* On suppose que $f : x \in \mathbb{E} \mapsto f(x) = \frac{1}{2}\langle Ax, x\rangle - \langle b, x\rangle$ avec A symétrique définie positive et on considère sa régularisée de Moreau-Yosida

$$x \in \mathbb{E} \mapsto \tilde{f}(x) = \inf_{y\in\mathbb{E}} \left(f(y) + \frac{1}{2}\|y-x\|_M^2 \right),$$

où $\|\cdot\|_M = \langle M\cdot,\cdot\rangle^{1/2}$ et M est une matrice symétrique définie positive. Montrez que $\tilde{f}$ est quadratique et que sa hessienne s'écrit $\nabla^2\tilde{f} = (A^{-1} + M^{-1})^{-1}$.

4 Conditions d'optimalité

[Cette méthode] *ne trompe jamais et peut s'étendre à des questions très belles.*

P. de Fermat (1601-1665).

On ne trouvera point de Figures dans cet Ouvrage. Les méthodes que j'y expose ne demandent ni constructions, ni raisonnements géométriques ou méchaniques, mais seulement des opérations algébriques, assujetties à une marche régulière et uniforme. Ceux qui aiment l'Analyse verront avec plaisir la Méchanique en devenir une nouvelle branche, et me sauront gré d'en avoir étendu ainsi le domaine.

J.-L. de la Grange. *Méchanique Analytique.* [345 ; 1788, pages XI-XII]

Considérons le problème d'optimisation sous forme générale

$$(P_X) \quad \begin{cases} \min f(x) \\ x \in X, \end{cases}$$

dans lequel on minimise une fonction $f : X \to \mathbb{R}$ définie sur une partie X d'un espace euclidien $\mathbb{E}$. On note $\langle \cdot, \cdot \rangle$ le produit scalaire de cet espace vectoriel et

$$n := \dim \mathbb{E}$$

sa dimension (finie).

Rappelons quelques notions relatives au problème (P_X), qui ont été introduites aux sections 1.1 et 1.2 et qui seront continuellement utilisées dans ce chapitre. L'ensemble X sur lequel on minimise f est appelé l'*ensemble admissible* du problème. Un *minimum* (*global*) de ce problème est un point $x_* \in X$ tel que

$$\forall x \in X : \qquad f(x_*) \leqslant f(x). \tag{4.1}$$

On dit que $x_* \in X$ est un *minimum local* de (P_X) s'il existe un voisinage V de x_* tel que

$$\forall x \in X \cap V : \qquad f(x_*) \leqslant f(x). \tag{4.2}$$

On parle de minimum global (resp. local) *strict* si l'on a inégalité stricte dans l'expression (4.1) (resp. (4.2)), lorsque $x \neq x_*$.

Les *conditions d'optimalité* sont des équations, des inéquations ou des propriétés que vérifient les solutions de (P_X) (*conditions nécessaires*, CN) ou qui assurent à un point d'être solution de (P_X) (*conditions suffisantes*, CS). Elles traduisent ainsi l'expression (4.2) de l'optimalité locale en une forme analytique plus directement utilisable. Ces conditions sont utiles pour de nombreuses raisons, par exemple :

- pour vérifier l'optimalité éventuelle d'un point $x \in X$, voir si c'est un minimum, un maximum ou un point stationnaire (voir plus loin pour la définition de ce terme),
- pour calculer analytiquement des solutions de (P_X),
- pour mettre en œuvre des méthodes numériques permettant de trouver des solutions (P_X),
- pour définir des tests d'arrêt des itérations dans les algorithmes de résolution de (P_X).

On parlera de *conditions du premier ordre* (notées CN1 ou CS1, selon qu'il s'agit de conditions nécessaires ou suffisantes) lorsque celles-ci ne font intervenir que les dérivées premières de f et des fonctions définissant l'ensemble admissible. Quant aux *conditions du second ordre* (notées CN2 ou CS2), elles ne font intervenir que les dérivées premières et secondes de ces fonctions.

Nous commencerons par une condition nécessaire d'optimalité du premier ordre très générale puisqu'elle concerne le problème (P_X) ; elle est de nature géométrique (section 4.1). C'est cette condition qui sera ensuite traduite en une forme analytique pour les problèmes sans contrainte (section 4.2), les problèmes avec contraintes d'égalité (section 4.3), les problèmes avec contraintes d'égalité et d'inégalité (section 4.4) et enfin les problèmes avec contraintes générales (section 4.5). Dans ces deux dernières sections, c'est le lemme de Farkas qui permet de faire cette traduction. Les résultats obtenus dans ce dernier cas permettent de retrouver les résultats précédents. Dès lors, le lecteur pressé et courageux pourra passer directement de la section 4.1 à la section 4.5. Rien ne sera perdu quant au contenu, mais on gagnera en compréhension en se penchant sur les situations plus simples décrites aux sections 4.2, 4.3 et 4.4.

Connaissances supposées. Notion de cône dual et lemme de Farkas. Les conditions du deuxième ordre pour le problème avec contraintes d'égalité et d'inégalité (section 4.4.4) requièrent la connaissance de la dualité linéaire, qui ne sera vue qu'au chapitre 15 ! Cette dernière section peut être passée en première lecture.

4.1 Une condition nécessaire d'optimalité géométrique

Ce sont les conditions nécessaires d'optimalité qui sont les plus difficiles à établir. Ceci est dû au fait que l'on procède par linéarisation de l'ensemble admissible, ce qui conduit au *cône tangent* (section 4.1.1) – jusqu'ici tout va bien – mais que ce cône tangent est *approché* par le *cône linéarisant*, obtenu en linéarisant les fonctions qui décrivent l'ensemble admissible. Cette approximation bien utile n'est pas toujours adéquate et il faut ce que l'on appellera des *conditions de qualification* pour que cette démarche puisse aboutir.

Les conditions suffisantes d'optimalité s'obtiennent, quant à elles, généralement sans difficulté ; soit à partir des conditions nécessaires du premier ordre, lorsque le

problème est convexe (il faudra spécifier ce que l'on entend par là), soit en renforçant légèrement les conditions nécessaires du second ordre dans le cas général.

4.1.1 Cônes tangent et normal

Dans cette section, on suppose que $\mathbb{E}$ désigne un espace vectoriel normé de dimension finie. Sa norme est notée $\|\cdot\|$.

Le cône tangent est un concept essentiel qui aide à l'écriture des conditions d'optimalité. Il sert à linéariser l'ensemble admissible au point optimal x_*, comme on le fait avec le critère en optimisation sans contrainte pour exprimer l'optimalité de x_* par l'équation $f'(x_*) = 0$. Comme nous le verrons (proposition 4.3), la notion de cône tangent définie ci-après étend aux ensembles quelconques celle introduite pour les ensembles convexes à la section 2.5.7. Nous utiliserons essentiellement la notion de tangence suivante. On note

$$\mathbb{R}_{++} := \{t \in \mathbb{R} : t > 0\}.$$

Définitions 4.1 (cône tangent) Soient $X \subseteq \mathbb{E}$ et $x \in \mathbb{E}$. On dit que le vecteur $d \in \mathbb{E}$ est *tangent* à X en x s'il existe une suite $\{d_k\} \subseteq \mathbb{E}$ et une suite $\{t_k\} \subseteq \mathbb{R}_{++}$ telles que

$$d_k \to d, \quad t_k \downarrow 0, \quad x + t_k d_k \in X. \tag{4.3}$$

On note $\mathrm{T}_x X$ ou $\mathrm{T}_X(x)$ l'ensemble des vecteurs tangents à X en x et on l'appelle le *cône tangent*. □

Pour le distinguer d'autres notions de cône tangent, celui de la définition précédente est parfois appelé le *cône contingent* [67 ; § 2.2.4].

La définition précédente a une interprétation géométrique simple : pour que la direction d soit tangente à X en x, il faut qu'elle soit limite de directions d_k, telles que $x + \mathbb{R}_{++} d_k$ rencontre X en un point qui se rapproche de x lorsque $k \to \infty$. Le passage à la limite est essentiel, sous peine d'appauvrir radicalement $\mathrm{T}_x X$ et de le rendre ainsi inutilisable. Il ne suffirait pas en effet de prendre comme cône tangent, ce que l'on nomme le *cône des directions admissibles* en x, qui est défini et noté

$$\mathrm{T}_x^a X := \{d \in \mathbb{E} : x + td \in X \text{ pour tout } t > 0 \text{ petit}\}. \tag{4.4}$$

Si ce cône nous a servi de concept de départ pour définir le cône tangent à un ensemble convexe (définition 2.47), il est de peu d'utilité ici. Par exemple, si X est la sphère unité de $\mathbb{R}^n$ et x un point de celle-ci, $\mathrm{T}_x^a X = \varnothing$ alors que $\mathrm{T}_x X$ est un sous-espace vectoriel de dimension $n - 1$. En l'absence de convexité, le cône tangent diffère donc en général de $\mathrm{T}_x^a X$ ou de son adhérence.

La définition 4.1 d'une direction tangente est facile à interpréter, mais elle n'est pas la plus souvent utilisée. Il s'avérera plus commode de faire jouer le rôle principal à la suite $\{x_k\}$ définie par $x_k = x + t_k d_k$, plutôt qu'à la suite $\{d_k\}$. On voit aisément que

$$d \in \mathrm{T}_x X \quad \Longleftrightarrow \quad \exists\, \{x_k\} \subseteq X, \quad \exists\, \{t_k\} \downarrow 0 : \quad \frac{x_k - x}{t_k} \to d. \tag{4.5}$$

Forcément, $x_k \to x$. Voici un premier exemple d'utilisation de cette définition équivalente.

Proposition 4.2 (cône tangent fermé) *Le cône tangent est un fermé.*

DÉMONSTRATION. Soit $\{d_k\} \subseteq \mathrm{T}_x X$, avec $d_k \to d$. Il faut montrer que $d \in \mathrm{T}_x X$. Pour tout $k \geqslant 1$, il existe une suite $\{x_{k,j}\}_j \subseteq X$ et une suite $\{t_{k,j}\}_j \downarrow 0$ telles que $(x_{k,j} - x)/t_{k,j} \to d_k$ lorsque $j \to \infty$. On construit à présent des suites par le procédé diagonal. Pour tout $i \geqslant 1$, on détermine d'abord k_i tel que $\|d_{k_i} - d\| \leqslant \frac{1}{i}$ et ensuite j_i tel que $\|(x_{k_i,j_i} - x)/t_{k_i,j_i} - d_{k_i}\| \leqslant \frac{1}{i}$ et $t_{k_i,j_i} \leqslant \frac{1}{i}$. Clairement $\{x_{k_i,j_i}\}_i \subseteq X$, $t_{k_i,j_i} \downarrow 0$ et $(x_{k_i,j_i} - x)/t_{k_i,j_i} \to d$ lorsque $i \to \infty$, si bien que $d \in \mathrm{T}_x X$. □

La proposition suivante montre que la notion de cône tangent introduite ici généralise aux ensembles quelconques celle introduite à la section 2.5.7 pour les ensembles convexes.

Proposition 4.3 (cône tangent à un convexe) *On a*

$$\mathrm{T}_x X \subseteq \overline{\mathbb{R}_+(X - x)}, \tag{4.6}$$

avec égalité si X est un ensemble convexe et $x \in X$, auquel cas $\mathrm{T}_x X$ est convexe.

DÉMONSTRATION. L'inclusion est claire, car une direction tangente est limite d'éléments de la forme $(x_k - x)/t_k \in \mathbb{R}_{++}(X - x)$.

Supposons à présent que X soit convexe et que $x \in X$. Comme le cône tangent est fermé (proposition 4.2), l'égalité sera prouvée en (4.6) si l'on montre que $\mathbb{R}_+(X - x) \subseteq \mathrm{T}_x X$. Soient $y \in X$ et $\alpha \geqslant 0$; il s'agit de montrer que $\alpha(y - x) \in \mathrm{T}_x X$. On prend une suite $\{t_k\} \downarrow 0$ formée de scalaires inférieurs à $1/\alpha$ (à $+\infty$ si $\alpha = 0$). Alors $x_k := x + t_k\alpha(y - x) = (1 - t_k\alpha)x + t_k\alpha y \in X$ parce que x et $y \in X$, ensemble supposé convexe. Il reste à observer que $(x_k - x)/t_k$ est le vecteur constant $\alpha(y - x)$, si bien que celui-ci est dans $\mathrm{T}_x X$.

La convexité de $\mathrm{T}_x X$ lorsque X est convexe et $x \in X$ se déduit de celle de $\overline{\mathbb{R}_+(X - x)}$. □

La proposition précédente montre que la définition 4.1 du cône tangent coïncide avec la définition 2.48 lorsque X est convexe et $x \in X$. Cependant, si X n'est pas convexe, $\mathrm{T}_x X$ n'est pas nécessairement convexe. Voici un exemple.

Exemple 4.4 ($\mathrm{T}_x X$ non convexe) L'ensemble non convexe $X := \{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 : |x_1| \leqslant |x_2|\}$ a son cône tangent en $(0, 0)$ qui s'écrit $\mathrm{T}_{(0,0)} X = \{d \in \mathbb{R}^2 : |d_1| \leqslant |d_2|\}$, Celui-ci n'est pas convexe. □

On vérifie que

$$\begin{aligned} x \notin \overline{X} &\implies \mathrm{T}_x X = \varnothing, \\ x \in \operatorname{int} X &\implies \mathrm{T}_x X = \mathbb{E}, \\ x \in \operatorname{intr} X &\implies \mathrm{T}_x X = (\operatorname{aff} X) - (\operatorname{aff} X). \end{aligned}$$

Les cas non triviaux se présentent donc lorsque x est sur la frontière de X. On a représenté à la figure 4.1 quelques exemples de cônes tangents.

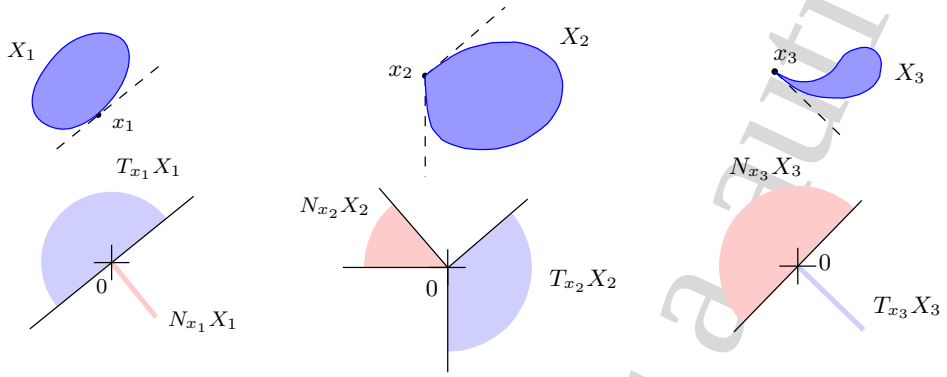


Fig. 4.1. Cônes tangent (en bleu clair) et normal (en rose) à quelques ensembles (en haut)

On verra que si X est donné par des contraintes fonctionnelles d'égalité et d'inégalité et si des *conditions de qualification de contraintes* sont vérifiées, le cône tangent se calcule aisément en utilisant les gradients des contraintes fonctionnelles actives en x (voir la section 4.4.2).

On note que $\mathrm{T}_x X$ ne dépend de X que dans un voisinage de x : si l'on modifie X en dehors d'un voisinage de x, on ne change pas $\mathrm{T}_x X$ (il suffit de ne retenir dans la propriété (4.5) que les x_k qui sont dans ce voisinage). D'autre part, $\mathrm{T}_x X$ ne dépend pas de la manière utilisée pour définir X. En particulier, si X est défini par des contraintes fonctionnelles (voir plus loin), le cône tangent ne dépend pas du choix des fonctions utilisées pour le définir.

Définitions 4.5 (cône normal) Soient $\mathbb{E}$ un espace euclidien (produit scalaire noté $\langle \cdot, \cdot \rangle$), $X \subseteq \mathbb{E}$ et $x \in \mathbb{E}$. On dit que $p \in \mathbb{E}$ est *normal* à X en x si

$$\forall d \in \mathrm{T}_x X \ : \quad \langle p, d \rangle \leqslant 0. \tag{4.7}$$

On note $\mathrm{N}_x X$ l'ensemble des vecteurs normaux à X en x et on l'appelle le *cône normal*. □

Cette définition du cône normal est simple mais un peu restrictive selon Rockafellar [471 ; 1993 ; p. 193], qui l'appelle *cône normal régulier* ; elle suffira pour notre propos.

Clairement, le cône normal est le dual négatif du cône tangent :

$$\mathrm{N}_x X = (\mathrm{T}_x X)^- = -(\mathrm{T}_x X)^+ \tag{4.8}$$

et, contrairement à $\mathrm{T}_x X$, $\mathrm{N}_x X$ est donc toujours convexe (point 1 de la proposition 2.38). D'après le point 5 de la proposition 2.38, un cône est contenu dans son bidual et donc

$$\mathrm{T}_x X \subseteq (\mathrm{N}_x X)^-. \tag{4.9}$$

On montre que (voir l'exercice 2.31)

$$X \text{ convexe} \quad \Longrightarrow \quad \mathrm{T}_x X = (\mathrm{N}_x X)^-.$$

Si X n'est pas convexe, $\mathrm{T}_x X$ peut ne pas être convexe (exemple 4.4) ; donc l'égalité ci-dessus peut ne pas avoir lieu car $(\mathrm{N}_x X)^-$ est toujours convexe (point 1 de la proposition 2.38). Remarquons aussi que, lorsque X est convexe, on retrouve le cône normal défini à la section 2.5.3 (voir l'exercice 4.2).

4.1.2 Condition nécessaire de Peano-Kantorovitch

Commençons donc par considérer le problème général

$$(P_X) \quad \begin{cases} \min f(x) \\ x \in X, \end{cases} \tag{4.10}$$

où X est une partie de l'espace vectoriel $\mathbb{E}$. La condition nécessaire d'optimalité du premier ordre suivante met en évidence l'utilité des notions de cônes tangent et *normal*.

Théorème 4.6 (CN1 de Peano-Kantorovitch) *Si x_* est un minimum local de (P_X) et si f est dérivable en x_*, on a*

$$\forall d \in \mathrm{T}_{x_*} X \ : \quad f'(x_*) \cdot d \geqslant 0. \tag{4.11}$$

Ceci s'écrit aussi

$$\boxed{\nabla f(x_*) \in (\mathrm{T}_{x_*} X)^+} \quad \textit{ou} \quad \boxed{\nabla f(x_*) + \mathrm{N}_{x_*} X \ni 0,} \tag{4.12}$$

où $\nabla f(x_*)$ est le gradient de f en x_* pour le produit scalaire de $\mathbb{E}$, $(\cdot)^+$ désigne le dual pour ce même produit scalaire et $\mathrm{N}_{x_*} X$ est le cône normal à X en x_*.

Démonstration. Soit $d \in \mathrm{T}_{x_*} X$ non nul (la relation (4.11) est triviale si $d = 0$). Alors il existe des suites $\{x_k\} \subseteq X$ et $\{t_k\} \downarrow 0$ telles que $d_k := \frac{x_k - x_*}{t_k} \to d$. Pour k grand, $x_k = x_* + t_k d_k \in X$ est voisin de x_*, si bien que par l'optimalité locale,

$$\text{pour } k \text{ grand} : \quad f(x_* + t_k d_k) \geqslant f(x_*).$$

Si f est dérivable en x_*, $f(x_* + t_k d_k) = f(x_*) + f'(x_*) \cdot (t_k d_k) + o(\|t_k d_k\|)$, donc

$$0 \leqslant f'(x_*) \cdot d_k + \frac{o(\|t_k d_k\|)}{t_k} = f'(x_*) \cdot d_k + \frac{o(\|t_k d_k\|)}{\|t_k d_k\|} \|d_k\|.$$

En passant à la limite quand $k \to \infty$, on obtient (4.11). Le reste s'en déduit. □

La démarche qui sera suivie dans ce chapitre pour obtenir des conditions nécessaires d'optimalité dans le cas où X est donné par des contraintes fonctionnelles sera de trouver une expression de (4.12) plus accessible au calcul. Dans chaque cas, nous aurons à calculer le cône normal $\mathrm{N}_{x_*} X$ et donc le cône tangent $\mathrm{T}_{x_*} X$.

4.1.3 Problème avec convexité

Lorsque l'ensemble admissible est convexe, on peut écrire une condition d'optimalité du premier ordre sans utiliser la notion de cône tangent ; c'est ce que nous faisons dans cette section. Cette condition ressemble très fort à la CN1 générale (4.11), quoique plus simple à écrire et à démontrer. Elle ne fait pas intervenir le cône tangent, comme nous l'annoncions, mais le *cône des directions admissibles* défini par (4.4). Bien que ce dernier soit plus petit que $\mathrm{T}_{x_*} X$, il n'y a pas de perte d'information lorsque f est dérivable en x_*, parce que son adhérence est $\mathrm{T}_{x_*} X$ (voir la définition 2.48) et que $d \mapsto f'(x_*) \cdot d$ est continue.

Proposition 4.7 (CN1 et CS1 en présence de convexité) *Supposons que X soit convexe et que f ait des dérivées directionnelles en un point $x_* \in X$. Si x_* est un minimum local de (P_X), on a*

$$\forall x \in X \ : \quad f'(x_*; x - x_*) \geqslant 0. \tag{4.13}$$

Inversement, si f est convexe sur le convexe X et si (4.13) a lieu, alors x_* est un minimum global de (P_X).

Démonstration. Pour $t > 0$ petit et $x \in X$, $x_* + t(x - x_*) \in X$ (convexité de X) et si x_* est un minimum local de (P_X), on a

$$\frac{f(x_* + t(x - x_*)) - f(x_*)}{t} \geqslant 0.$$

En passant à la limite lorsque $t \downarrow 0$, on obtient (4.13).

Si f est convexe sur X, on a pour tout $x \in X$ (proposition 3.18) :

$$f(x) \geqslant f(x_*) + f'(x_*; x - x_*).$$

Si (4.13) est vérifiée, on a alors $f(x) \geqslant f(x_*)$, ce qui montre que x_* est un minimum global de f sur X. □

La discussion et le résultat de cette section conduisent naturellement à la définition suivante de problème (P_X) convexe.

Définition 4.8 ((P_X) convexe) On dit qu'un problème d'optimisation de la forme (P_X) définie en (4.10) est *convexe* si son ensemble admissible X est une partie convexe de l'espace vectoriel $\mathbb{E}$ et si son critère f est convexe sur X. □

4.2 Problème sans contrainte

Le problème considéré dans cette section ne présente pas de contrainte. On l'écrit

$$\boxed{\min_{x \in \mathbb{E}} f(x),} \tag{4.14}$$

où $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R}$ est supposée définie sur une espace euclidien $\mathbb{E}$.

4.2.1 Condition de Fermat

Pour le problème sans contrainte (4.14), l'ensemble admissible $X = \mathbb{E}$ est convexe. On déduit alors immédiatement de la proposition 4.7 une condition nécessaire d'optimalité du premier ordre et, pour les problèmes convexes, une condition suffisante d'optimalité du premier ordre.

Théorème 4.9 (CN1 de Fermat, CS1) *Supposons que $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R}$ soit dérivable en $x_* \in \mathbb{E}$. Si f a un minimum local en x_*, alors*

$$f'(x_*) = 0 \quad ou \quad \nabla f(x_*) = 0. \tag{4.15}$$

Inversement, si f est convexe et si (4.15) a lieu, alors x_* est un minimum global de f sur $\mathbb{E}$.

4.2.2 Conditions d'optimalité du second ordre

Les deux résultats suivants donnent des conditions nécessaires puis des conditions suffisantes du second ordre. Dans ces propositions, la hessienne $\nabla^2 f(x_*)$ et sa (semi-)définie positivité sont associées au produit scalaire que l'on s'est donné sur $\mathbb{E}$. Une solution x_* vérifiant les conditions suffisantes d'optimalité du second ordre de la proposition 4.11 est appelé un *minimum fort* du problème (4.14).

Proposition 4.10 (CN2) *Supposons que x_* soit un minimum local de f sur $\mathbb{E}$ et que f soit dérivable dans un voisinage de x_* et deux fois dérivable en x_*. Alors*

$$\nabla f(x_*) = 0 \quad et \quad \nabla^2 f(x_*) \text{ est semi-définie positive.}$$

Démonstration. Soient $d \in \mathbb{E}$, $\{t_k\} \subseteq \mathbb{R}$ une suite telle que $t_k \downarrow 0$ et $x_k := x_* + t_k d$. Avec la régularité supposée de f on a (voir le théorème C.18)

$$f(x_k) = f(x_*) + f'(x_*) \cdot (x_k - x_*) + \frac{1}{2} f''(x_*) \cdot (x_k - x_*)^2 + o(\|x_k - x_*\|^2). \tag{4.16}$$

Comme $f'(x_*) = 0$ et que $f(x_k) \geqslant f(x_*)$ pour k suffisamment grand, on voit que

$$0 \leqslant \frac{1}{2} f''(x_*) \cdot (t_k d)^2 + o(\|t_k d\|^2), \quad \text{pour } k \text{ grand.}$$

En divisant par $t_k^2 > 0$ et en faisant tendre $k \to \infty$, on en déduit que $0 \leqslant \frac{1}{2} f''(x_*) \cdot d^2 = \langle \nabla^2 f(x_*) d, d \rangle$. Donc $\nabla^2 f(x_*)$ est semi-définie positive. □

Proposition 4.11 (CS2) *Si f est dérivable dans le voisinage d'un point x_* et deux fois dérivable en x_* et si*

$$\nabla f(x_*) = 0 \quad \text{et} \quad \nabla^2 f(x_*) \text{ est définie positive,}$$

alors x_* est un minimum local strict de f.

Démonstration. On raisonne par l'absurde. Si le résultat n'est pas vrai, il existe une suite $\{x_k\} \subseteq \mathbb{E}$ telle que $x_k \to x_*$, $x_k \neq x_*$ et $f(x_k) \leqslant f(x_*)$. En extrayant une sous-suite au besoin, on peut supposer qu'avec $t_k := \|x_k - x_*\| \neq 0$,

$$\frac{x_k - x_*}{t_k} \to d.$$

Clairement, $d \neq 0$.

De (4.16) et $\nabla f(x_*) = 0$, on déduit que

$$0 \geqslant \frac{1}{2} f''(x_*) \cdot (x_k - x_*)^2 + o(\|x_k - x_*\|^2).$$

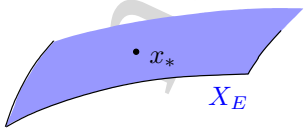
En divisant par t_k^2 et en passant à la limite, on obtient $0 \geqslant f''(x_*) \cdot d^2 = \langle \nabla^2 f(x_*) d, d \rangle$. Comme $d \neq 0$, ceci est en contradiction avec la définie positivité supposée de $\nabla^2 f(x_*)$. □

On peut donner une démonstration plus courte du résultat précédent. L'avantage de celle que nous avons utilisée est d'encore fonctionner pour les problèmes avec contraintes. Ce fut donc un bon entraînement.

On peut donner une condition suffisante d'optimalité *diffuse* (voir l'exercice 4.4 pour un énoncé précis) : si $\nabla f(x_*) = 0$ et $\nabla^2 f(x)$ est semi-définie positive pour x voisin de x_*, alors x_* est un minimum local de (4.14). On peut donc relaxer l'hypothèse de définie positivité de $\nabla^2 f(x_*)$ pourvu que l'on ait la *semi*-définie positivité de la hessienne *dans un voisinage* de x_*. Sous ces hypothèses, x_* n'est plus nécessairement un minimum local *strict*, comme le montre le cas d'un fonction constante.

4.3 Problème avec contraintes d'égalité

On considère dans cette section un problème d'optimisation dans lequel l'ensemble admissible n'est pas l'espace $\mathbb{E}$ tout entier mais une partie X_E de celui-ci, définie par un nombre fini de contraintes d'égalité :



$$X_E := \{x \in \mathbb{E} : c(x) = 0\}.$$

Ces contraintes sont donc spécifiées au moyen d'une fonction

$$c : \mathbb{E} \to \mathbb{F},$$

où $\mathbb{F}$ est également un espace euclidien (de dimension finie) dont le produit scalaire est aussi noté $\langle \cdot, \cdot \rangle$. Les dimensions des espaces sont notées

$$n := \dim \mathbb{E} \qquad \text{et} \qquad m := \dim \mathbb{F}.$$

Il sera souvent approprié de supposer qu'en la solution x_* recherchée, la *jacobienne* $c'(x_*)$ de la contrainte vérifie

$$c'(x_*) \text{ est surjective.}$$

Ceci requiert certainement d'avoir $m \leqslant n$, c'est-à-dire d'avoir moins de contraintes que de variables à optimiser. Lorsque cette hypothèse est vérifiée, X_E est, dans un voisinage de x_*, une *variété* (concept de base de la géométrie différentielle que l'on peut voir comme une surface ayant des propriétés de représentation particulières) de dimension $n - m$ et l'image qui en est donnée dans la figure ci-dessus en est une idéalisation acceptable lorsque $n = 3$ et $m = 1$. Le problème d'optimisation est quant à lui noté

$$(P_E) \quad \begin{cases} \min f(x) \\ c(x) = 0, \end{cases}$$

où $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R}$ en est le critère.

L'adaptation au problème (P_E) de la définition 4.8 de problème (P_X) convexe conduit à la définition suivante.

Définition 4.12 ((P_E) convexe) On dit que le problème (P_E) est *convexe* si son ensemble admissible X_E est convexe et si son critère f est convexe sur X_E. □

Il est plus courant cependant de requérir l'affinité de X_E pour que le problème (P_E) soit convexe, ce que n'assure pas la définition précédente. Comme le montre la proposition suivante, c'est ce qui se produit lorsque c_E est affine.

Proposition 4.13 (convexité de X_E) *Si c est affine, alors X_E est un sous-espace affine (donc un convexe).*

Démonstration. Soient x_0 et $x_1 \in X_E$ et $t \in \mathbb{R}$. Il s'agit de montrer que $(1-t)x_0 + tx_1 \in X_E$, c'est-à-dire que $c((1-t)x_0 + tx_1) = 0$. On a

$$\begin{aligned} c((1-t)x_0 + tx_1) &= (1-t)c(x_0) + tc(x_1) \qquad [\text{affinité de } c] \\ &= 0 \qquad [c(x_0) = 0 \text{ et } c(x_1) = 0]. \end{aligned}$$

□

Mais X_E peut être un sous-espace affine sans que c soit affine. C'est le cas, par exemple, de $X_E = \{0\} \subseteq \mathbb{R}$ défini par la contrainte $c : x \in \mathbb{R} \mapsto x + x^3 \in \mathbb{R}$.

4.3.1 Conditions de Lagrange

Pour expliciter la condition d'optimalité (4.12) au cas du problème (P_E), il faut calculer le cône tangent à son ensemble admissible X_E.

Proposition 4.14 (cône tangent à X_E) *Supposons que $c : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ soit dérivable en $x \in X_E$. Alors*

$$\mathrm{T}_x\, X_E \subseteq \mathcal{N}(c'(x)). \tag{4.17}$$

Si, de plus, $c'(x)$ est surjective et si c est C^1 dans un voisinage de x, alors l'égalité a lieu en (4.17).

Démonstration. Soit $d \in \mathrm{T}_x\, X_E$. Alors il existe des suites $\{x_k\} \subseteq X_E$ et $\{t_k\} \subseteq \mathbb{R}_{++}$ telles que l'on ait (4.5). Comme c est dérivable en $x \in X_E$, on a

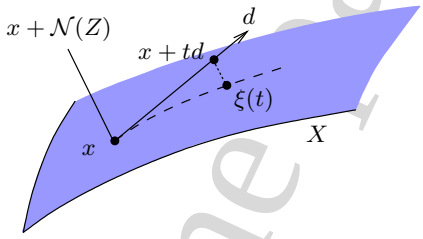
$$0 = c(x_k) = c'(x) \cdot (x_k - x) + o(\|x_k - x\|).$$

En divisant par t_k et en passant à la limite lorsque $t_k \downarrow 0$, on trouve que $d \in \mathcal{N}(c'(x))$.

Supposons à présent que $c'(x)$ soit surjective et que c soit C^1 dans un voisinage de x. Soit $d \in \mathcal{N}(c'(x))$. Pour montrer que $d \in \mathrm{T}_x\, X_E$, il faut construire des suites $\{x_k\} \subseteq X_E$ et $\{t_k\} \subseteq \mathbb{R}$ vérifiant (4.5). La suite $\{x_k\}$ s'obtiendra en échantillonnant un chemin $\xi : t \mapsto \xi(t)$ de X_E passant par x et admettant d comme tangente en x. Soit $A := c'(x)$ la jacobienne de c en x. Comme A est surjective, il existe un espace vectoriel $\mathbb{G}$ et une application linéaire $Z : \mathbb{E} \to \mathbb{G}$, tels que

$$\begin{pmatrix} A \\ Z \end{pmatrix} : \mathbb{E} \to \mathbb{F} \times \mathbb{G} \text{ soit bijective.} \tag{4.18}$$

On peut, par exemple, prendre pour Z le projecteur orthogonal de $\mathbb{E}$ sur $\mathbb{G} = \mathcal{N}(A)$. Observons que $\mathcal{N}(A)$ et $\mathcal{N}(Z)$ sont alors deux sous-espaces vectoriels *supplémentaires*. On détermine $\xi(t)$ dans X_E, qui vérifie donc $c(\xi(t)) = 0$, en l'écrivant comme la somme de $x + td \in x + \mathcal{N}(A)$ et d'un déplacement dans $\mathcal{N}(Z)$, donc $Z(\xi(t) - x - td) = 0$; voir la figure ci-dessous. Ceci justifie le fait de vouloir annuler la fonction $F : \mathbb{E} \times \mathbb{R} \to \mathbb{F} \times \mathbb{G}$ définie par



$$F(\xi, t) = \begin{pmatrix} c(\xi) \\ Z(\xi - x - td) \end{pmatrix}.$$

Clairement $F(x, 0) = 0$. Par ailleurs, F est de classe C^1 dans un voisinage de $(x, 0)$ et $F'_\xi(x, 0)$ est l'application linéaire de (4.18), qui est inversible. On peut alors appliquer le théorème des fonctions implicites (théorème C.14) : il existe une fonction $t \in \mathbb{R} \mapsto \xi(t) \in \mathbb{E}$ définie dans un voisinage de 0, de classe C^1, telle que

$$\begin{cases} F(\xi(t),t) = 0, & \text{pour tout } t \text{ voisin de } 0 \\ \xi(0) = x. \end{cases}$$

En dérivant $F(\xi(t),t) = 0$ en $t = 0$ (théorèmes C.5 et C.6), on trouve

$$\begin{pmatrix} A \\ Z \end{pmatrix} \xi'(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ Zd \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A \\ Z \end{pmatrix} d,$$

car $Ad = 0$. L'inversibilité de la matrice de (4.18) permet d'en déduire que $\xi'(0) = d$, une propriété que l'on recherchait. On peut alors construire les suites désirées :

$$t_k \downarrow 0, \quad x_k := \xi(t_k) \in X_E \to x, \quad \frac{x_k - x}{t_k} = \frac{\xi(t_k) - \xi(0)}{t_k} \to \xi'(0) = d.$$

Donc $d \in \mathrm{T}_x X_E$. □

Avoir l'égalité en (4.17) est souhaitable, comme le montrera l'établissement des conditions d'optimalité dans le théorème 4.17 ci-dessous. Ceci motive l'introduction de la notion suivante.

Définition 4.15 On dit que la contrainte c est *qualifiée* en $x \in X_E$ pour représenter X_E si c est dérivable en x et si

$$\mathrm{T}_x X_E = \mathcal{N}(c'(x)). \tag{4.19}$$

□

Remarques 4.16 Voici quelques remarques sur cette définition importante.

1. D'après la proposition 4.14, la surjectivité de $c'(x)$ est une condition *suffisante* de qualification de la contrainte de (P_E). D'autres conditions suffisantes seront données à la section 4.4.2.
2. Insistons sur la signification de (4.19). Dans son membre de gauche on trouve un ensemble qui ne dépend que de X_E, pas de la contrainte c qui a été utilisée pour le décrire. C'est l'inverse dans le membre de droite, qui fait directement intervenir c. L'ensemble admissible $X_E = \{x \in \mathbb{E} : c(x) = 0\}$ peut être représenté par différentes fonctions c. On peut donc voir la condition de qualification (4.19) comme un critère permettant de sélectionner les fonctions c qui représentent correctement X_E.
3. Par exemple, au lieu d'utiliser c, on pourrait utiliser

$$\tilde{c} : \mathbb{E} \to \mathbb{R}, \qquad \text{définie par } \tilde{c}(x) = \frac{1}{2}\|c(x)\|^2,$$

puisque $\tilde{c}(x) = 0$ si, et seulement si, $c(x) = 0$. Ceci paraît attrayant puisque l'on a remplacé toutes les contraintes d'égalité, en nombre potentiellement grand, par une seule contrainte. Cependant, la contrainte $\tilde{c}$ a encore moins de chance d'être qualifiée que c puisque $\nabla\tilde{c}(x) = c'(x)^* c(x) = 0$ en un point $x \in X_E$ et donc $\mathcal{N}(\tilde{c}'(x)) = \mathbb{E}$, qui est le plus souvent trop grand.

4. Il y a en fait un lien subtil entre la condition suffisante de qualification de la contrainte c, qu'est la surjectivité de sa jacobienne $c'(x)$, et la *stabilité* de X_E par rapport à de petites perturbations de c. Ainsi, avec la fonction $\tilde{c}$ définie au point 3, si $X_E \neq \varnothing$, $X_{E,\varepsilon} := \{x \in \mathbb{E} : \tilde{c}(x) = \varepsilon\}$ a des chances d'être non vide si $\varepsilon \geqslant 0$, alors que $X_{E,\varepsilon} = \varnothing$ si $\varepsilon < 0$, si bien que l'on peut dire que $\tilde{c}$ ne fournit pas une représentation stable de X_E. Plus généralement, si c est de classe C^1, l'hypothèse de surjectivité de la jacobienne $c'(x)$ assure que, pour des $p \in \mathbb{R}^{m_E}$ voisins de zéro, l'ensemble perturbé $\{x : \mathbb{R}^n : c(x)+p = 0\}$ n'est pas vide (c'est une conséquence du théorème des fonctions implicites, le théorème C.14). On dit alors que l'ensemble X_E est *stable* par rapport à des perturbations de la contrainte c.

5. La non-surjectivité de $c'(x)$ peut avoir diverses origines. Cela peut provenir de contraintes redondandes, superflues, qui peuvent parfois être éliminées, mais qui n'empêchent pas pour autant la qualification de la contrainte. Par exemple, si une contrainte $c : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ est qualifiée pour représenter X_E et si on la double en $d := (c, c) : \mathbb{E} \to \mathbb{F} \times \mathbb{F}$, la contrainte $d(x) = 0$ est encore qualifiée pour représenter X_E puisque $\mathcal{N}(d'(x)) = \mathcal{N}(c'(x)) = \mathrm{T}_x X_E$, alors que $d'(x)$ n'est pas surjective.

   Plus malencontreux est le cas où le terme linéaire de c est nul, comme au point 3 ci-dessus ou, plus simplement, comme lorsque l'ensemble admissible $X_E = \{0\}$ est défini par $c(x) = 0$ avec $c(x) = x^2$. Cette contrainte c n'est tout simplement pas qualifiée en $x = 0 \colon \mathrm{T}_0 X_E = \{0\} \neq \mathcal{N}(c'(0)) = \mathbb{R}$. □

Nous avons à présent établi tout ce qu'il faut pour traduire l'*expression géométrique de l'optimalité*, celle donnée par (4.12), en des conditions nécessaires d'optimalité du premier ordre plus aisément utilisables, ce que l'on peut voir comme une *expression analytique de l'optimalité*.

Théorème 4.17 (CN1 de Lagrange) *Soit x_* une solution locale de (P_E). Supposons que f et c soient dérivables en x_* et que la contrainte c soit qualifiée en x_* au sens de la définition 4.15. Alors, il existe un vecteur $\lambda_* \in \mathbb{F}$ tel que*

$$\nabla f(x_*) + c'(x_*)^* \lambda_* = 0, \tag{4.20}$$

où $\nabla f(x_*)$ est le gradient de f en x_* et $c'(x_*)^* : \mathbb{F} \to \mathbb{E}$ est l'opérateur adjoint de la jacobienne $c'(x_*)$ pour les produits scalaires donnés sur $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$. Le vecteur λ_* vérifiant (4.20) est unique si $c'(x_*)$ est surjective.

Démonstration. On a successivement

$$\begin{aligned}
\nabla f(x_*) &\in (\mathrm{T}_{x_*} X_E)^+ && [(4.12)] \\
&= \mathcal{N}(c'(x_*))^+ && [\text{qualification des contraintes en } x_*] \\
&= \mathcal{N}(c'(x_*))^\perp && [\mathcal{N}(c'(x_*)) \text{ est un sous-espace vectoriel}] \\
&= \mathcal{R}(c'(x_*)^*) && [(A.6) \text{ ou la proposition } 2.40].
\end{aligned}$$

Il existe donc un vecteur $\lambda_* \in \mathbb{F}$ tel que l'on ait (4.20). Lorsque $c'(x_*)$ est surjective, $c'(x_*)^*$ est injective et il ne peut y avoir deux λ_* différents vérifiant (4.20). □

Le vecteur λ_* est appelé le *multiplicateur de Lagrange* et la formule (4.20) porte le nom de *règle du multiplicateur de Lagrange*. On notera bien que le multiplicateur est un élément de $\mathbb{F}$, l'espace d'arrivée de c (en dimension infinie, λ appartiendrait au dual de $\mathbb{F}$, qui est ici identifié à $\mathbb{F}$ lui-même grâce au produit scalaire dont il est muni). On dit aussi que λ_* est la *solution duale* du problème (P_E). Alors x_* est appelée *solution primale* et (x_*, λ_*) *solution primale-duale*. On appelle *point stationnaire* du problème (P_E) un point x_* vérifiant ses conditions nécessaires d'optimalité du premier ordre :

$$\begin{cases} \nabla f(x_*) + c'(x_*)^* \lambda_* = 0 \\ c(x_*) = 0, \end{cases} \tag{4.21}$$

pour un certain multiplicateur $\lambda_* \in \mathbb{F}$. La valeur $f(x_*)$ du critère en un point stationnaire x_* est appelée une *valeur critique* du problème.

En pratique, il est souvent commode de retrouver le système d'optimalité (4.21) en introduisant le *lagrangien* du problème qui est la fonction

$$\ell : \mathbb{E} \times \mathbb{F} \to \mathbb{R}$$

définie par

$$\ell(x, \lambda) := f(x) + \langle \lambda, c(x) \rangle.$$

Le nom de multiplicateur attribué à λ vient d'ailleurs du fait qu'il multiplie les contraintes dans le lagrangien (par l'intermédiaire du produit scalaire de $\mathbb{F}$). Cette fonction jouera un rôle essentiel dans tout cet ouvrage, et par conséquent il en sera de même du multiplicateur de Lagrange. Les conditions nécessaires d'optimalité du premier ordre s'écrivent alors

$$\begin{cases} \nabla_x \ell(x_*, \lambda_*) = 0 \\ c(x_*) = 0 \end{cases} \qquad \text{ou} \qquad \nabla_{(x,\lambda)} \ell(x_*, \lambda_*) = 0. \tag{4.22}$$

Il est utile de spécifier ces conditions d'optimalité lorsque $\mathbb{E} = \mathbb{R}^n$, $\mathbb{F} = \mathbb{R}^m$ et que l'on munit ces espaces du produit scalaire euclidien $\langle u, v \rangle = u^\mathsf{T} v = \sum_i u_i v_i$. Il y a alors n variables $x_1, \ldots, x_n$ à optimiser et les m contraintes du problème (P_E) sont données explicitement au moyen de m fonctions $c_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$:

$$c_1(x_1, \ldots, x_n) = 0, \quad \ldots, \quad c_m(x_1, \ldots, x_n) = 0.$$

Le lagrangien du problème s'écrit

$$\ell(x, \lambda) = f(x) + \lambda^\mathsf{T} c(x) = f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i c_i(x).$$

Observons que le multiplicateur de Lagrange $\lambda \in \mathbb{R}^m$ a autant de composantes qu'il y a de contraintes ; chacune des composantes λ_i étant associée à une contrainte c_i ; on dit d'ailleurs que le multiplicateur λ_i est associé à la contrainte c_i. Si l'on note $A_* := c'(x_*)$ la *jacobienne* de c en x_*, qui est la matrice $m \times n$ définie par

$$(A_*)_{ij} := \frac{\partial c_i(x)}{\partial x_j}, \quad 1 \leqslant i \leqslant m, \quad 1 \leqslant j \leqslant n,$$

et $\nabla \varphi(x)$ le gradient de φ ($\varphi = f$ ou c_i) pour le produit scalaire euclidien, c'est-à-dire le vecteur de ses dérivées partielles, les conditions d'optimalité (4.22) s'écrivent

$$\begin{cases} \nabla f(x_*) + A_*^{\mathsf{T}} \lambda_* = 0 \\ c(x_*) = 0 \end{cases} \quad \text{ou} \quad \begin{cases} \nabla f(x_*) + \sum_{i=1}^m (\lambda_*)_i \nabla c_i(x_*) = 0 \\ c(x_*) = 0. \end{cases} \tag{4.23}$$

Les multiplicateurs de Lagrange sont modifiés par un changement du produit scalaire de $\mathbb{F}$, mais pas par un changement du produit scalaire de $\mathbb{E}$. En effet, supposons que l'on prenne sur $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ les produits scalaires suivants

$$\begin{aligned} (x, x') \in \mathbb{E} \times \mathbb{E} \mapsto \langle\!\langle x, x' \rangle\!\rangle_{\mathbb{E}} = \langle S_{\mathbb{E}} x, x' \rangle_{\mathbb{E}}, \\ (y, y') \in \mathbb{F} \times \mathbb{F} \mapsto \langle\!\langle y, y' \rangle\!\rangle_{\mathbb{F}} = \langle S_{\mathbb{F}} y, y' \rangle_{\mathbb{F}}, \end{aligned}$$

où $S_{\mathbb{E}} : \mathbb{E} \to \mathbb{E}$ [resp. $S_{\mathbb{F}} : \mathbb{F} \to \mathbb{F}$] est un opérateur auto-adjoint et défini positif pour le produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathbb{E}}$ [resp. $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathbb{F}}$]. Le gradient de f en x_* dans (4.20) devient $S_{\mathbb{E}}^{-1} \nabla f(x_*)$ par (C.7) et l'adjoint de la jacobienne de c en x_* devient $S_{\mathbb{E}}^{-1} c'(x_*)^* S_{\mathbb{F}}$ par (A.10), si bien que les multiplicateurs λ_* sont modifiés par ces changements de produits scalaires comme suit

$$S_{\mathbb{F}}^{-1} \lambda_*.$$

Les multiplicateurs sont donc modifiés par un changement de produit scalaire sur $\mathbb{F}$ comme le sont les gradients d'une fonction définie sur $\mathbb{F}$ (voir (C.7)), ce qui anticipe l'interprétation marginaliste des multiplicateurs optimaux qui sera donnée à la section 4.6.1.

Remarques 4.18 1. L'hypothèse (4.19) de qualification des contraintes se retrouvera plus loin sous des versions adaptées à des ensembles admissibles différemment définis. On ne peut pas s'en passer, comme le montre l'exemple illustré à la figure 4.2, dans lequel l'ensemble admissible est réduit à l'unique point

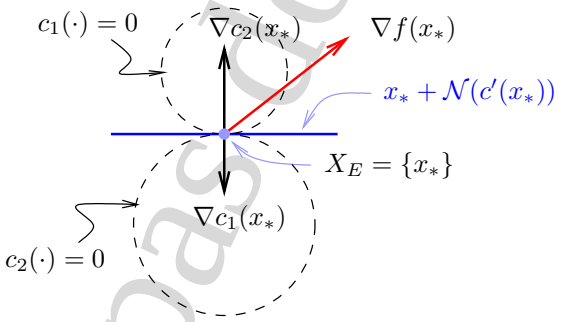


Fig. 4.2. Contraintes d'égalité non qualifiées

d'intersection de deux cercles tangents. Le problème de minimiser une fonction sur un tel ensemble admissible a évidemment une solution (c'est l'unique point admissible), mais la contrainte n'est pas qualifiée, car $\mathrm{T}_{x_*} X_E = \{0\}$, alors que $\mathcal{N}(c'(x_*)) = \mathcal{N}(\nabla c_1(x_*)^{\mathsf{T}}) \cap \mathcal{N}(\nabla c_2(x_*)^{\mathsf{T}})$ est un sous-espace vectoriel de dimension un.

Par ailleurs, si le critère a en x_* un gradient $\nabla f(x_*)$ comme celui représenté dans la figure, ce gradient n'est pas combinaison linéaire des gradients des contraintes

(ceux-ci n'engendrent pas $\mathbb{R}^2$ tout entier car ils sont colinéaires). Dans ce cas, on ne peut pas trouver un multiplicateur $\lambda_* \in \mathbb{R}^2$ qui vérifie la première équation du système de droite dans (4.23). Dès lors, il n'y a pas de système d'optimalité.

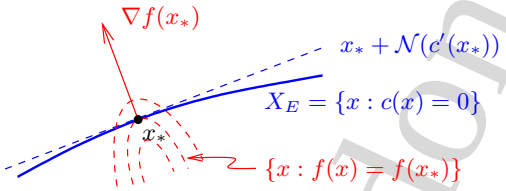
Les problèmes d'optimisation sans système d'optimalité sont difficiles à résoudre et la plupart des algorithmes se fourvoient en s'y attaquant. Nous avons dit que ce manque de qualification n'est pas intrinsèquement lié à l'ensemble admissible, mais à la façon de le décrire par la contrainte c. Quand on se trouve en face d'un problème à la contrainte non qualifiée, il faut donc essayer d'en trouver une autre équivalente et qui soit qualifiée.

Dans l'exemple trivial de la figure 4.2, il suffirait évidemment de prendre la contrainte $\tilde{c}(x) = x - x_*$, qui est qualifiée puisque $\mathcal{N}(\tilde{c}'(x_*)) = \mathcal{N}(I) = \{0\}$. La contrainte $\tilde{c}(x) = 0$, équivalente à $x = x_*$, manifesterait alors clairement la trivialité de ce problème.

2. On peut retrouver la condition nécessaire d'optimalité du premier ordre des problèmes sans contrainte en utilisant le théorème 4.17 pour le problème équivalent

$$\begin{cases} \min f(x) + x_{n+1} \\ x_{n+1} = 0. \end{cases}$$

3. Comme on l'a vu dans la démonstration du théorème 4.17, en présence de qualification, l'expression géométrique (4.12) de l'optimalité s'exprime par



$$\nabla f(x_*) \in \mathcal{N}(c'(x_*))^\perp.$$

Autrement dit, le gradient de f en x_* pour le produit scalaire de $\mathbb{E}$ est orthogonal (au sens du même produit scalaire) à l'espace tangent à l'ensemble admissible $X_E = \{x \in \mathbb{E} : c(x) = 0\}$ en x_*. On peut aussi dire que l'espace tangent en x_* à la variété $\{x \in \mathbb{E} : f(x) = f(x_*)\}$ (qui en est bien une si $\nabla f(x_*) \neq 0$) contient l'espace tangent en x_* à l'ensemble admissible $\{x \in \mathbb{E} : c(x) = 0\}$. Cette expression géométrique se traduit directement dans l'expression analytique (4.20) de l'optimalité, grâce à la relation d'algèbre linéaire

$$\mathcal{N}(A)^\perp = \mathcal{R}(A^*),$$

où A est un opérateur linéaire (voir (A.6), que l'on peut d'ailleurs déduire du lemme de Farkas – proposition 2.40).

L'ensemble des multiplicateurs optimaux λ_* associés à un point stationnaire x_* est l'ensemble noté et défini par

$$\Lambda_* := \{\lambda_* \in \mathbb{F} : \nabla f(x_*) + c'(x_*)^* \lambda_* = 0\}.$$

Il s'agit donc d'un sous-espace affine (non vide par définition de la stationnarité). Celui-ci est réduit à un singleton (unicité du multiplicateur optimal associé à x_*) si, et seulement si, $c'(x_*)$ est surjective.

Proposition 4.19 (unicité du multiplicateur optimal) *Soit x_* un point stationnaire du probleme (P_E), dont on note Λ_* l'ensemble des multiplicateurs optimaux associés. Alors Λ_* est un singleton si, et seulement si, $c'(x_*)$ est surjective.*

Comme dans le cas sans contrainte, on obtient facilement une condition suffisante d'optimalité si le problème (P_E) est convexe.

Proposition 4.20 (CS1 pour problème convexe) *Supposons que le problème (P_E) soit convexe au sens de la définition 4.12, que $x_* \in \mathbb{E}$ vérifie la contrainte de (P_E), que f soit dérivable en x_* et qu'il existe un multiplicateur $\lambda_* \in \mathbb{F}$ tel que (x_*, λ_*) vérifie (4.21). Alors, x_* est un minimum global de (P_E).*

Démonstration. Comme f est convexe et l'ensemble admissible de (P_E) est convexe, il suffit, d'après la proposition 4.7, de montrer que

$$\forall\, x \in X_E : \quad \langle \nabla f(x_*), x - x_* \rangle \geqslant 0.$$

En utilisant, la première condition d'optimalité de (4.21), cela revient à montrer que

$$\forall\, x \in X_E : \quad \langle \lambda_*, c'(x_*)(x - x_*) \rangle \leqslant 0.$$

On conclut en observant que, pour $x \in X_E$:

$$c'(x_*)(x - x_*) = \lim_{t \downarrow 0} \frac{1}{t} \left[c(x_* + t(x - x_*)) - c(x_*) \right] = 0,$$

car $c(x_*) = 0$ (parce que $x_* \in X_E$) et $c(x_* + t(x - x_*)) = 0$ (parce que $x_* + t(x - x_*) = (1-t)x_* + tx \in X_E$ pour $t \in]0, 1]$, par la convexité supposée de X_E, x et $x_* \in X_E$). □

4.3.2 Conditions d'optimalité du second ordre

Commençons par donner des conditions nécessaires d'optimalité du second ordre, lorsque l'on suppose l'existence de multiplicateurs. Si (x_*, λ_*) est une solution primale-duale de (P_E), on note

$$L_* := \nabla^2_{xx} \ell(x_*, \lambda_*),$$

la hessienne du lagrangien en (x_*, λ_*) par rapport à x.

Théorème 4.21 (CN2) *Soit $x_* \in \mathbb{E}$ un minimum local de (P_E). Supposons que f et c soient dérivables dans un voisinage de x_* et deux fois dérivables en x_*. S'il existe un multiplicateur $\lambda_* \in \mathbb{F}$ tel que la condition de Lagrange (4.20) soit satisfaite, alors*

$$\forall d \in \mathrm{T}_{x_*} X_E \ : \quad \langle L_* d, d\rangle \geqslant 0. \tag{4.24}$$

Démonstration. Soit $d \in \mathrm{T}_{x_*} X_E$. Alors il existe des suites $\{x_k\} \subseteq \mathbb{E}$ et $\{t_k\} \subseteq \mathbb{R}$ telles que

$$x_k \in X_E, \quad t_k \downarrow 0, \quad \frac{x_k - x}{t_k} \to d.$$

D'après la régularité de f et c et (4.20), on a

$$\ell(x_k, \lambda_*) = \ell(x_*, \lambda_*) + \frac{1}{2}\ell''_{xx}(x_*, \lambda_*) \cdot (x_k - x_*)^2 + o(\|x_k - x_*\|^2).$$

Mais $\ell(x_*, \lambda_*) = f(x_*)$ et $\ell(x_k, \lambda_*) = f(x_k) \geqslant f(x_*)$, pour k assez grand, si bien que pour k grand :

$$0 \leqslant \frac{1}{2}\ell''_{xx}(x_*, \lambda_*) \cdot (x_k - x_*)^2 + o(\|x_k - x_*\|^2).$$

En divisant par t_k^2 et en passant à la limite lorsque $k \to \infty$, on trouve l'inégalité recherchée :

$$\ell''_{xx}(x_*, \lambda_*) \cdot d^2 = \langle L_* d, d\rangle \geqslant 0.$$

□

L'inégalité dans (4.24) ne tient plus nécessairement pour des $d \in \mathcal{N}(c'(x_*)) \setminus \mathrm{T}_{x_*} X_E$, donc même si la condition de Lagrange (4.20) est vérifiée pour un certain $\lambda_* \in \mathbb{F}$. Ce cas se présente si $\mathbb{E} = \mathbb{F} = \mathbb{R}^2$, $f(x) = -x_1^2$ et $c(x) = (x_2 - x_1^2, x_2 + x_1^2)$: l'équation de Lagrange est vérifiée avec le multiplicateur nul, mais $L_* = -2e_1 e_1^{\mathsf{T}}$ n'est pas semi-défini positive sur le noyau de $c'(x_*)$, qui est $\mathbb{R}e_1$.

La condition (4.24) n'est pas très utile si l'on ne dispose pas d'une forme explicite simple de $\mathrm{T}_{x_*} X_E$. On peut en obtenir une en ajoutant l'hypothèse de qualification de la contrainte (4.19). Dans ce cas, l'existence du multiplicateur est assurée et cela conduit au résultat suivant, qui est celui qui est le plus souvent utilisé. Évidemment cette hypothèse supplémentaire est satisfaite si $c'(x_*)$ est surjective (proposition 4.14).

Corollaire 4.22 *Soit $x_* \in \mathbb{E}$ un minimum local de (P_E), Supposons que f et c soient dérivables dans un voisinage de x_*, deux fois dérivables en x_* et que la contrainte c soit qualifiée en x_* au sens de la définition 4.15. Alors, il existe un multiplicateur $\lambda_* \in \mathbb{F}$ tel que l'on ait (4.21). De plus, L_* est semi-définie positive sur $\mathcal{N}(c'(x_*))$, c'est-à-dire*

$$\forall d \in \mathcal{N}(c'(x_*)) \ : \quad \langle L_* d, d\rangle \geqslant 0. \tag{4.25}$$

Les conditions nécessaires du second ordre de la proposition précédente présentent deux éléments nouveaux par rapport à celles de la proposition 4.10, relatives aux problèmes sans contrainte :

- d'une part, ce n'est pas la hessienne de f qui y intervient, mais celui du lagrangien,

- d'autre part, cette hessienne n'est pas « semi-définie positive dans tout l'espace », mais seulement « semi-défini positif dans un sous-espace vectoriel », à savoir le noyau de $c'(x_*)$.

Comme l'a montré la démonstration du théorème 4.21, ceci est dû, d'une part, au fait que c'est $\nabla_x \ell(x_*, \lambda_*)$ qui s'annule et pas $\nabla f(x_*)$ et, d'autre part, au fait que l'on n'a de l'information sur la minimalité de f que pour des points proches de x_* qui sont dans l'ensemble admissible (pas dans l'espace tout entier).

Le résultat suivant donne des conditions *suffisantes* d'optimalité du second ordre pour le problème (P_E), qui sont à peine plus fortes que les CN2 : le lien entre les CN2 et les CS2 rappelle celui que l'on avait en optimisation sans contrainte (comparez avec les propositions 4.10 et 4.11). On peut donc dire que les CN2 obtenues au théorème 4.21 ne sont pas trop faibles ; il n'y en a pas trop peu.

Une solution x_* vérifiant les CS2 de la proposition 4.23 est appelée un *minimum fort* du problème (P_E).

Proposition 4.23 (CS2) *Supposons que f et c soient dérivables dans un voisinage de $x_* \in \mathbb{E}$ et deux fois dérivables en x_*. Supposons que $c(x_*) = 0$ et qu'il existe $\lambda_* \in \mathbb{F}$ tel que l'on ait*

$$\nabla_x \ell(x_*, \lambda_*) = 0,$$

$$\forall d \in \mathrm{T}_{x_*} X_E \setminus \{0\} : \quad \langle L_* d, d\rangle > 0. \tag{4.26}$$

Alors x_* est un minimum local strict de (P_E).

Démonstration. On raisonne par l'absurde. Si le résultat est faux, il existe une suite $\{x_k\} \subseteq X_E$ telle que $x_k \to x_*$, $x_k \neq x_*$ et $f(x_k) \leqslant f(x_*)$. En extrayant une sous-suite au besoin, on peut supposer qu'avec $t_k := \|x_k - x_*\| \neq 0$, on a

$$\frac{x_k - x_*}{t_k} \to d.$$

Donc $d \in \mathrm{T}_{x_*} X_E \setminus \{0\}$.

Comme dans la démonstration du théorème 4.21, on peut écrire

$$f(x_k) = f(x_*) + \frac{1}{2}\ell''_{xx}(x_*, \lambda_*) \cdot (x_k - x_*)^2 + o(\|x_k - x_*\|^2).$$

L'inégalité $f(x_k) \leqslant f(x_*)$ implique alors que

$$0 \geqslant \frac{1}{2}\ell''_{xx}(x_*, \lambda_*) \cdot (x_k - x_*)^2 + o(\|x_k - x_*\|^2).$$

En passant à la limite dans l'inégalité ci-dessus, après avoir divisé par t_k^2, on trouve

$$\langle L_* d, d\rangle \leqslant 0,$$

ce qui contredit les hypothèses puisque $d \in \mathrm{T}_{x_*} X_E \setminus \{0\}$. □

La conclusion de la proposition 4.23 reste vraie si l'on remplace (4.26) par la condition plus forte

$$\forall d \in \mathcal{N}(c'(x_*)) \setminus \{0\} : \quad \langle L_* d, d\rangle > 0. \tag{4.27}$$

C'est essentiellement cette condition plus forte qui est utilisée. On peut en donner une forme matricielle compacte en introduisant une base de $\mathbb{E}$ que l'on peut alors identifier à $\mathbb{R}^n$, en représentant le produit scalaire de $\mathbb{E} \equiv \mathbb{R}^n$ par $\langle u, v\rangle = u^\mathsf{T} Q v$ (avec $Q \succ 0$) et se donnant une matrice Z_*^- de type $n \times (n-m)$ dont les colonnes forment une base de $\mathcal{N}(c'(x_*))$ (ce qui est possible lorsque $c'(x_*)$ est surjective). Alors (4.27) revient à dire que la matrice d'ordre $n-m$

$$Z_*^{-\mathsf{T}} Q L_* Z_*^- \succ 0.$$

Lorsque $Q = I$ ($\langle\cdot,\cdot\rangle$ est alors le produit scalaire euclidien de $\mathbb{R}^n$), la matrice ci-dessus, à savoir $Z_*^{-\mathsf{T}} L_* Z_*^-$, est appelée la *hessienne réduite du lagrangien*.

4.3.3 Calcul pratique des solutions de (P_E)

Le théorème 4.17 nous apprend que, sous certaines conditions, une solution locale de (P_E) est un point stationnaire de ce problème. Pour calculer les solutions de (P_E), on pourra donc, dans un premier temps, calculer les solutions du système d'optimalité (4.21). On notera que ce système est formé de $(n+m)$ équations aux $(n+m)$ inconnues (x_*, λ_*) et qu'il y a donc un sens à en calculer les solutions.

Grâce aux conditions d'optimalité, on a transformé le problème d'optimisation (P_E) en un problème de résolution d'un système d'équations non linéaires, ce qui nous est plus familier. Dans certain cas (par exemple lorsque le problème est de petite taille), on pourra chercher à le résoudre analytiquement, mais le plus souvent, il faudra utiliser des algorithmes spécifiques qui tiennent compte de la structure de (4.21). C'est ce que fait par exemple la méthode newtonienne du chapitre 14.

Cependant, toutes les solutions de (4.21) ne sont pas solutions de (P_E). Par définition, ce ne sont que des points stationnaires. Pour déterminer si un point stationnaire est solution de (P_E), on utilisera les conditions d'optimalité du second ordre, de la manière suivante :

- si la condition nécessaire (4.25) n'est pas vérifiée au point stationnaire, alors celui-ci n'est pas une solution locale de (P_E) (ou une autre hypothèse du corollaire 4.22 n'est pas vérifiée) ;
- si la condition suffisante (4.26) ou (4.27) est vérifiée au point stationnaire (ainsi que les autres hypothèses de la proposition 4.23), alors celui-ci est un minimum local strict de (P_E).

Ces deux cas recouvrent un grand nombre de situations, mais pas toutes, car les conditions (4.25) et (4.26) ne sont pas identiques. Le cas est indéterminé lorsqu'en un point stationnaire on a (4.25), mais pas (4.26). Alors les résultats vus ci-dessus ne sont pas suffisants et il faudra recourir à des conditions d'optimalité d'ordre supérieur pour pouvoir dire si le point stationnaire est solution de (P_E).

L'approche décrite ci-dessus est systématique (voir l'épigraphe de Lagrange en début de ce chapitre) et donc très souvent utilisée en pratique. Cependant, il ne faudra pas négliger d'utiliser l'intuition ou la familiarité avec un problème particulier pour en déterminer les solutions de manière plus rapide, plus astucieuse.

4.4 Problème avec contraintes d'égalité et d'inégalité

Dans cette section, on considère le problème

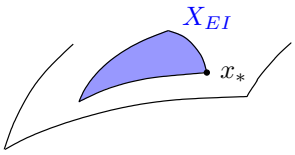
$$(P_{EI}) \quad \begin{cases} \min f(x) & \\ c_i(x) = 0, & i \in E \\ c_i(x) \leqslant 0, & i \in I, \end{cases}$$

où f et les c_i sont des fonctions définies sur un espace euclidien $\mathbb{E}$ (produit scalaire noté $\langle \cdot, \cdot \rangle$) à valeurs dans $\mathbb{R}$ et où E et I forment une partition de $\{1, \ldots, m\}$ ($E \cup I = [1:m]$ et $E \cap I = \varnothing$). On note

$$m_E := |E| \qquad \text{et} \qquad m_I := |I|$$

le cardinal des ensembles E et I (donc $m = m_E + m_I$). Les contraintes sont donc données par une fonction $c : \mathbb{E} \to \mathbb{R}^m$. On supposera que $\mathbb{R}^m$ est muni du produit scalaire euclidien. On ne prend pas un espace euclidien arbitraire pour l'espace d'arrivée de c car il faudrait donner un sens à l'inégalité de (P_{EI}), ce qui compliquerait singulièrement l'analyse. Si $v \in \mathbb{R}^m$, on note v_E (resp. v_I) le vecteur de $\mathbb{R}^{m_E}$ (resp. $\mathbb{R}^{m_I}$) formé des composantes v_i de v avec $i \in E$ (resp. $i \in I$). De même on notera c_E et c_I les fonctions définissant les contraintes d'égalité et d'inégalité, respectivement.

Dans cette section, on note



$$X_{EI} := \{x \in \mathbb{E} : c_E(x) = 0, c_I(x) \leqslant 0\} \qquad (4.28)$$

l'ensemble admissible de (P_{EI}). Si en un point admissible x_*, $c'(x_*)$ est surjective, cet ensemble se présente autour de x_* comme une partie de la variété $\{x \in \mathbb{E} : c_E(x) = 0\}$ formée des points qui vérifient aussi l'inégalité $c_I(x) \leqslant 0$. Une image idéalisée de cet ensemble pourrait être celle donnée dans la figure ci-dessus, qui correspond à $n = 3$, $m_E = 1$ et $m_I = 3$. Notons que rien n'impose que la solution soit sur la frontière de X_{EI} comme dans la figure, mais c'est dans ce cas que le problème est le plus complexe à analyser.

L'adaptation au problème (P_{EI}) de la définition 4.8 de problème (P_X) convexe conduit à la définition suivante.

Définition 4.24 ((P_{EI}) convexe) On dit que le problème (P_{EI}) est *convexe* si son ensemble admissible X_{EI} est convexe et si son critère f est convexe sur X_{EI}. □

Proposition 4.25 (convexité de X_{EI}) *Si la contrainte d'égalité c_E est affine, si les contraintes d'inégalité c_i ($i \in I$) sont convexes, alors X_{EI} est convexe.*

Démonstration. L'ensemble admissible s'écrit comme une intersection de convexes (il est donc convexe). En effet,

$$X_{EI} = \{x \in \mathbb{E} : c_E(x) = 0\} \cap \{x \in \mathbb{E} : c_I(x) \leqslant 0\}.$$

Le premier est un sous-espace affine par l'affinité de c_E (proposition 4.13), donc un convexe. Le second est l'intersection des ensembles $\{x \in \mathbb{E} : c_i(x) \leqslant 0\}$, pour $i \in I$, qui sont convexes comme ensembles de sous-niveau de fonctions convexes. □

Mais X_{EI} peut être convexe sans que c_E soit affine et les $\{c_i\}_{i\in I}$ soient convexes. Par exemple $\{x \in \mathbb{R} : x + x^3 \leqslant 0\}$ est convexe, alors que $x \mapsto x + x^3$ n'est pas convexe.

Définition 4.26 On dit que c_i est *active* en x si $c_i(x) = 0$. On note

$$I^0(x) := \{i \in I : c_i(x) = 0\}$$

l'ensemble des indices des contraintes d'inégalité actives en x. On adopte les notations simplifiées $I^0_x := I^0(x)$ et $I^0_* := I^0(x_*)$. □

Les problèmes d'optimisation avec contraintes d'inégalité sont considérablement plus difficiles à analyser et à résoudre numériquement qu'un problème avec contraintes d'égalité. Un calcul analytique, sur papier, est rarement possible et d'ailleurs souvent difficile lui aussi. Lorsqu'il n'y a que des contraintes d'égalité, la compréhension du problème repose sur l'analyse mathématique classique, en particulier, nous l'avons vu, sur le théorème des fonctions implicites (théorème C.14), alors que la présence d'inégalité requiert l'utilisation d'outils spécifiques, essentiellement, nous le verrons, ceux de l'analyse convexe. Par ailleurs, numériquement, la difficulté principale provient du fait que, d'une manière ou d'une autre, le calcul de la solution détermine forcément les contraintes qui y sont actives. Si celles-ci étaient connues, on pourrait se ramener au cas des problèmes avec seulement des contraintes d'égalité lisses. Or il y a 2^{m_I} manières de rendre les m_I contraintes d'inégalité actives. C'est à ce nombre exponentiel que l'on fait allusion lorsque l'on parle de la *combinatoire* des problèmes avec contraintes d'inégalité. Celle-ci est redoutable et en rapport direct avec la *conjecture* $\mathsf{P} = \mathsf{NP}$, puisqu'un problème d'optimisation quadratique non convexe (c.-à-d., un problème avec un critère quadratique non convexe et des contraintes affines) est NP-ardu (section 5.2.3). On est donc en présence d'un problème pour lequel il est vraisemblable que le *principe de conservation des ennuis* s'applique ; on veut dire par là que la difficulté du problème ne peut être éliminée en lui trouvant une autre formulation équivalente. Ainsi, on pourrait penser simplifier le problème en reformulant les contraintes d'inégalité par l'une des contraintes d'égalité apparemment plus simples et équivalentes suivantes

$$\max(0, c_I(x)) = 0 \quad \text{ou} \quad \|\max(0, c_I(x))\|^2 = 0.$$

Cependant le première contrainte est non lisse et la seconde, bien qu'une fois différentiable, n'est en général pas qualifiée dans un sens discuté ci-dessus (après la définition 4.15).

4.4.1 Conditions de Karush, Kuhn et Tucker

Pour particulariser la condition nécessaire d'optimalité du théorème 4.6 et sa formule $\nabla f(x_*) \in (\mathrm{T}_x X_{EI})^+$ au cas où l'ensemble admissible X_{EI} est donné par des

contraintes fonctionnelles d'égalité et d'inégalité, on doit préciser comment s'écrit le *cône tangent*

$$\mathrm{T}_x\, X_{EI}$$

à partir des fonctions c_E et c_I définissant les contraintes. La proposition 4.27 montre que $\mathrm{T}_x\, X_{EI}$ est inclus dans le cône obtenu par linéarisation des contraintes actives en x, appelé *cône linéarisant* et noté

$$\mathrm{T}'_x\, X_{EI} := \{d \in \mathbb{E} : c'_E(x) \cdot d = 0,\ c'_{I^0_x}(x) \cdot d \leqslant 0\}.$$

Proposition 4.27 (cône tangent à X_{EI}) *Supposons que $c_{E\cup I^0_x}$ soit dérivable en $x \in X_{EI}$. Alors*

$$\mathrm{T}_x\, X_{EI} \subseteq \mathrm{T}'_x\, X_{EI}. \tag{4.29}$$

Démonstration. Soit $d \in \mathrm{T}_x\, X_{EI}$. Alors il existe des suites $\{x_k\} \subseteq X_{EI}$ et $\{t_k\} \downarrow 0$ telles que

$$\frac{x_k - x}{t_k} \to d.$$

Pour $i \in E \cup I^0_x$, on a $c_i(x) = 0$ et donc

$$c_i(x_k) = c'_i(x) \cdot (x_k - x) + o(\|x_k - x\|).$$

Pour $i \in E$, $c_i(x_k) = 0$ et donc

$$c'_i(x) \cdot \frac{(x_k - x)}{t_k} = \frac{o(\|x_k - x\|)}{t_k}.$$

À la limite, on trouve $c'_E(x) \cdot d = 0$. De la même manière, pour $i \in I^0_x$, en utilisant le fait que $c_i(x_k) \leqslant 0$, on trouve : $c'_i(x) \cdot d \leqslant 0$. □

En général, on n'a pas égalité en (4.29). Ceci avait déjà été observé lorsqu'il n'y avait que des contraintes d'égalité (voir les commentaires sur la figure 4.2). La figure 4.3 donne un exemple avec des contraintes d'inégalité seulement : on y a représenté l'ensemble $X = \{x \in \mathbb{R}^2 : 0 \leqslant x_2 \leqslant x_1^3\}$ et les deux cônes $\mathrm{T}_x\, X$ et $\mathrm{T}'_x\, X$ en $x = (0, 0)$. Le vecteur $d = (-1, 0)$ est dans $\mathrm{T}'_{(0,0)}\, X$ mais pas dans $\mathrm{T}_{(0,0)}\, X$. Le cas se présente également lorsque $X = \{x \in \mathbb{R}^2 : x_1^2 \leqslant x_2^2\}$ (exemple 4.4), puisque $\mathrm{T}_{(0,0)}\, X = \{d \in \mathbb{R}^2 : |d_1| \leqslant |d_2|\}$ alors que $\mathrm{T}'_{(0,0)}\, X = \mathbb{R}^2$. On notera d'ailleurs que $\mathrm{T}'_x\, X$ est convexe (c'est un polyèdre convexe), tandis que $\mathrm{T}_x\, X$ ne l'est pas nécessairement.

Par ailleurs, l'égalité $\mathrm{T}_x\, X_{EI} = \mathrm{T}'_x\, X_{EI}$ est souhaitable car, comme on le verra, le calcul de $(\mathrm{T}'_x\, X_{EI})^+$ est aisé alors qu'en toute généralité celui de $(\mathrm{T}_x\, X_{EI})^+$ ne l'est pas. Comme c'est ce dernier qui intervient dans la condition d'optimalité (4.12) que l'on veut exprimer en termes plus faciles à utiliser, on a tout intérêt à ce que l'égalité $\mathrm{T}_{x_*}\, X_{EI} = \mathrm{T}'_{x_*}\, X_{EI}$ ait lieu. Ceci conduit à la notion suivante.

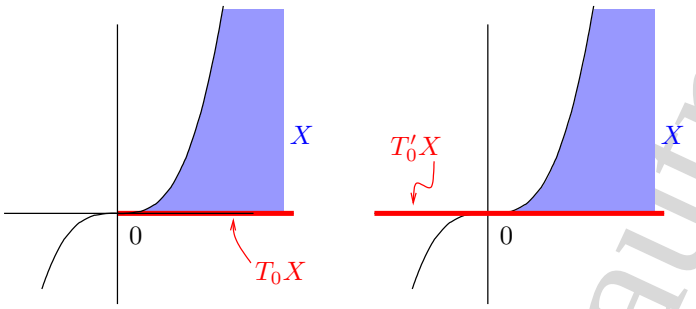


Fig. 4.3. Cône tangent $\mathrm{T}_x\, X$ (gauche) et cône linéarisant $\mathrm{T}'_x\, X$ (droite)

Définition 4.28 (qualification de contrainte) On dit que la contrainte c est *qualifiée* en $x \in X_{EI}$ pour représenter X_{EI} si $c_{E\cup I_x^0}$ est dérivable en x et si

$$\text{(QC)} \quad \mathrm{T}_x\, X_{EI} = \mathrm{T}'_x\, X_{EI}, \tag{4.30}$$

c'est-à-dire si le cône tangent $\mathrm{T}_x\, X_{EI}$ à l'ensemble admissible X_{EI} en x est égal au cône $\mathrm{T}'_x\, X_{EI}$, défini en (4.29), obtenu par linéarisation des contraintes actives en x. □

Remarques 4.29 On peut adapter à cette définition les remarques 4.16 faites à propos de la qualification des contraintes d'égalité et en ajouter d'autres.

1. Comme le membre de gauche de 4.30 ne dépend que de X_{EI}, pas de c, et que le membre de droite dépend de X_{EI} par l'intermédiaire de c, il faut voir la condition (4.30) comme un moyen de sélectionner les bonnes fonctions c représentant l'ensemble admissible X_{EI}.
2. Par exemple, on ne change pas l'ensemble admissible de (P_{EI}) en remplaçant ses contraintes par une contrainte d'égalité

$$\tilde{c} : \mathbb{E} \to \mathbb{R}, \qquad \text{définie par } \tilde{c}(x) = \frac{1}{2}\|c_E(x)\|_2^2 + \frac{1}{2}\|c_I(x)^+\|_2^2,$$

puisque $x \in X_{EI}$ si, et seulement si, $\tilde{c}(x) = 0$ (on a noté v^+ le vecteur dont la i-ième composante est $\max(0, v_i)$). Si cela paraît attrayant de prime abord, puisque l'on a remplacé des contraintes d'égalité $c_E(x) = 0$ et d'inégalité $c_I(x) \leqslant 0$, en nombre potentiellement grand, par une unique contrainte d'égalité $\tilde{c}(x) = 0$, cette dernière contrainte a l'inconvénient de n'être presque jamais qualifiée. On a en effet $\nabla\tilde{c}(x) = c'_E(x)^* c_E(x) + c'_I(x)^* c_I(x)^+$, qui est nul en tout point admissible. Dès lors, pour cette contrainte $\tilde{c}$, le membre de droite de (4.30) vaut $\mathbb{E}$, qui est presque toujours trop grand.
3. Comme autre exemple de transformation à ne pas faire, mentionnons celle qui consiste à remplacer les inégalités $c(x) \leqslant 0$ par des égalités $\tilde{c}(x, s) = 0$, en introduisant des *écarts en carrés*:

$$\tilde{c} : \mathbb{E} \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^m, \qquad \text{définie par } \tilde{c}(x, s) = c(x) + s \cdot s,$$

où l'on a utilisé le *produit de Hadamard* ($(s \cdot s)_i = s_i^2$). L'ensemble admissible $X := \{x \in \mathbb{E} : c(x) \leqslant 0\}$ est alors la projection canonique sur $\mathbb{E}$ de l'ensemble admissible $\tilde{X} := \{(x, s) \in \mathbb{E} \times \mathbb{R}^m : \tilde{c}(x, s) = 0\}$. Cette pratique, parfois encore rencontrée, parrait attrayante parce que l'on s'est débarrassé des contraintes d'inégalité à la combinatoire importante. Cependant, la nouvelle contrainte $\tilde{c}$ ne vérifie pas la condition suffisante de qualification, qu'est sa surjectivité (voir la proposition 4.14) en un point $(x, s) \in \tilde{X}$ pour lequel les gradients $\nabla c_i(x)$ des contraintes actives ne sont pas linéairement indépendants (une hypothèse très forte comme on le verra à la section 4.4.2), ce qui conduit alors à une représentation par $\tilde{c}$ instable [458].

4. La plupart des algorithmes se fourvoient lorsqu'ils doivent trouver la solution d'un problème dont les contraintes ne sont pas qualifiées en la solution. Il est donc préférable, dans ce cas, de changer la description de l'ensemble admissible en utilisant d'autres fonctions, avant de chercher à résoudre le problème.

5. Il y a en fait un lien subtil entre la qualification de la contrainte c et la *stabilité* de X_{EI} par rapport à de petites perturbations de c. On montrera en effet (proposition **??**) que les conditions de Mangasarian-Fromovitz (QC-MF) énoncées plus loin, qui qualifient la contrainte c représentant X_{EI}, assurent que, pour des $p \in \mathbb{R}^m$ et des $t \in \mathbb{R}$ voisins de zéro, l'ensemble perturbé $X_{EI}^{tp} := \{x : \mathbb{R}^n : c_E(x) + tp_E = 0, c_I(x) + tp_I \leqslant 0\}$ n'est pas vide. On dit alors que l'ensemble X_{EI} est *stable* par rapport à des perturbations de la contrainte c. □

Nous verrons à la section 4.4.2 des conditions suffisantes de qualification des contraintes, plus faciles à vérifier que l'égalité $\mathrm{T}_x X_{EI} = \mathrm{T}'_x X_{EI}$.

Venons-en à présent à l'un des résultats les plus importants de ce chapitre, celui énonçant les conditions d'optimalité du première ordre du problème d'optimisation différentiable avec contraintes. Nous introduisons avec lui la notation

$$0 \leqslant u \perp v \leqslant 0, \tag{4.31}$$

pour signifier que les composantes d'un vecteur $u \in \mathbb{R}^p$ doivent être positives, que celles d'un vecteur $v \in \mathbb{R}^p$ doivent être négatives et que ces deux vecteurs doivent être orthogonaux pour le produit scalaire euclidien : $u^{\mathsf{T}} v = 0$. Cette notation est communément utilisée pour exprimer les problèmes de complémentarité [127, 128].

Théorème 4.30 (CN1 de Karush-Kuhn-Tucker) *Soit x_* un minimum local de (P_{EI}). Supposons que f et $c_{E \cup I_*^0}$ soient dérivables en x_* et que les contraintes soient qualifiées en x_* au sens de la définition 4.28. Alors, il existe $\lambda_* \in \mathbb{R}^m$ tel que l'on ait*

$$(KKT) \quad \left\{ \begin{array}{ll} (a) & \nabla f(x_*) + c'(x_*)^* \lambda_* = 0 \\ (b) & c_E(x_*) = 0 \\ (c) & 0 \leqslant (\lambda_*)_I \perp c_I(x_*) \leqslant 0, \end{array} \right. \tag{4.32}$$

où $\nabla f(x_*)$ est le gradient de f en x_* et $c'(x_*)^* : \mathbb{R}^m \to \mathbb{E}$ est l'opérateur adjoint de la jacobienne $c'(x_*)$ pour le produit scalaire donné sur $\mathbb{E}$.

Démonstration. On a successivement

$$\begin{aligned}\nabla f(x_*) &\in (\mathrm{T}_{x_*} X_{EI})^+ \qquad \text{[par (4.12)]}\\ &= (\mathrm{T}'_{x_*} X_{EI})^+ \qquad \text{[qualification des contraintes en } x_*\text{]}\\ &= \{-c'_E(x_*)^* y - c'_{I_*^0}(x_*)^* z : y \in \mathbb{R}^{m_E},\ z \in \mathbb{R}_+^{|I_*^0|}\} \qquad \text{[corollaire 2.41].}\end{aligned}$$

Il existe donc des vecteurs $y \in \mathbb{R}^{m_E}$ et $z \in \mathbb{R}_+^{|I_*^0|}$ tels que

$$\nabla f(x_*) = -c'_E(x_*)^* y - c'_{I_*^0}(x_*)^* z.$$

On obtient le résultat en introduisant $\lambda_* \in \mathbb{R}^m$ défini par

$$(\lambda_*)_i := \begin{cases} y_i & \text{si } i \in E \\ z_i & \text{si } i \in I_*^0 \\ 0 & \text{si } i \in I \setminus I_*^0. \end{cases}$$ □

Les conditions d'optimalité (4.32) sont appelées *conditions de Karush-Kuhn-Tucker* et le vecteur λ_* est encore appelé *multiplicateur de Lagrange* associé aux contraintes c et à la solution x_*. Un couple (x_*, λ_*) vérifiant (4.32) est appelé *solution primale-duale* de (P_{EI}) : x_* est la solution primale et λ_* est la solution duale (on comprendra l'origine de cette appellation au chapitre 13 sur la dualité). Un point x_* pour lequel il existe un multiplicateur $\lambda_* \in \mathbb{R}^m$ tel que (4.32) soit vérifiée est qualifié de *stationnaire*. La valeur $f(x_*)$ du critère en un point stationnaire x_* est appelée une *valeur critique* du problème.

Comme pour les problèmes avec contraintes d'égalité, le *lagrangien associé au problème* (P_{EI}) est la fonction

$$\ell : \mathbb{E} \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$$

définie en $(x, \lambda) \in \mathbb{E} \times \mathbb{R}^m$ par

$$\ell(x, \lambda) := f(x) + \lambda^{\mathsf{T}} c(x) = f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i c_i(x). \tag{4.33}$$

Le multiplicateur λ a autant de composantes qu'il y a de contraintes, chacune de ses composantes multipliant la contrainte à laquelle elle est associée dans le lagrangien. La première équation d'optimalité du système (4.32) est alors le gradient de ℓ en (x_*, λ_*) par rapport à x :

$$\nabla_x \ell(x_*, \lambda_*) = 0 \qquad \text{ou} \qquad \nabla f(x_*) + \sum_{i=1}^{m} (\lambda_*)_i \nabla c_i(x_*) = 0,$$

les gradients de f et des c_i étant ceux associés au produit scalaire de $\mathbb{E}$.

Si $\mathbb{E} = \mathbb{R}^n$ et si l'on choisit le produit scalaire euclidien sur cet espace, le gradient $\nabla f(x_*)$ et la matrice jacobienne $c'(x_*)$ ont leurs composantes données par les dérivées partielles

$$(\nabla f(x_*))_i = \frac{\partial f}{\partial x_i}(x_*) \qquad \text{et} \qquad (c'(x_*))_{ij} = \frac{\partial c_i}{\partial x_j}(x_*)$$

et l'adjointe de $c'(x_*)$ devient sa transposée. La première équation de (4.32) peut donc alors s'écrire

$$\nabla f(x_*) + c'(x_*)^\mathsf{T} \lambda_* = 0.$$

Compte tenu du signe de $(\lambda_*)_I$ et de $c_I(x_*)$, chaque terme du produit scalaire dans $(\lambda_*)_I^\mathsf{T} c_I(x_*) = 0$, équation dérivant de (4.32)-(c) est négatif, si bien que cette condition revient à exprimer que chacun de ces termes est nul :

$$\forall i \in I \ : \quad (\lambda_*)_i \, c_i(x_*) = 0.$$

Ces relations portent le nom de *conditions de complémentarité* : soit $(\lambda_*)_i = 0$, soit $c_i(x_*) = 0$. Étant donné le signe de $(\lambda_*)_I$, on peut les écrire de manière équivalente comme suit :

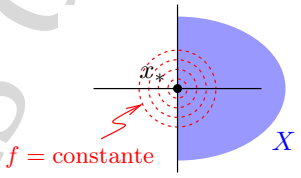
$$\forall i \in I \ : \quad \Big(c_i(x_*) < 0 \implies (\lambda_*)_i = 0 \Big), \tag{4.34}$$

ce qui peut s'exprimer en disant qu'un multiplicateur associé à une contrainte d'inégalité inactive ($c_i(x_*) < 0$) est nul. On peut aussi dire que les relations de complémentarité dans (4.32)-(c) sont l'expression analytique du fait que les contraintes inactives en x_* ne sont pas utiles pour exprimer l'optimalité *locale* d'une solution. On dit qu'il y a *complémentarité stricte* si

$$\forall i \in I \ : \quad \Big(c_i(x_*) < 0 \iff (\lambda_*)_i = 0 \Big). \tag{4.35}$$

Comme les multiplicateurs ne sont pas nécessairement déterminés de manière unique, on peut avoir complémentarité stricte pour un jeu de multiplicateur et ne pas avoir cette propriété pour un autre jeu. Une solution x_* sans complémentarité stricte se manifeste par le fait qu'une contrainte d'inégalité active en x_* ne joue pas de rôle dans le lagrangien et donc dans le système d'optimalité (KKT). Par conséquent, on peut enlever cette contrainte sans changer l'optimalité de x_* (au premier ordre). Géométriquement, cela peut se voir à partir des courbes de niveau de f dans le voisinage de x_*, comme dans le problème trivial en $x \in \mathbb{R}^2$ suivant

$$\begin{cases} \min \|x\|_2^2 \\ x_1 \geqslant 0. \end{cases}$$



La solution est $x_* = 0$ et le multiplicateur optimal est nul, bien que la contrainte soit active en la solution. Par ailleurs, on peut manifestement enlever la contrainte, sans changer la solution du problème.

La condition (4.32)-(c) peut se résumer par diverses équations (non différentiables). La plus simple utilise la fonction « min », composante par composante :

$$\min(\lambda_I, -c_I(x)) = 0.$$

L'équivalence vient du fait que pour des réels a et b, l'équation $\min(a, b) = 0$ revient à dire que $a \geqslant 0$, $b \geqslant 0$ et $ab = 0$.

Remarques

1. Le signe des multiplicateurs correspondant aux contraintes d'inégalité peut changer si le problème n'est pas écrit sous la forme canonique qui est celle de (P_{EI}). Ainsi le signe change si au lieu de minimiser on maximise, ou si à la place des contraintes de négativité ($c_i(x) \leqslant 0$) on trouve des contraintes de positivité ($c_i(x) \geqslant 0$), ou bien sûr si l'on remplace le signe $+$ par le signe $-$ dans le lagrangien, comme le font certains auteurs.

2. La présence de conditions de *qualification des contraintes* dans les hypothèses du théorème 4.30 gène parfois au premier abord. Il arrive que l'on pose la question suivante. Comment peut-on savoir si les contraintes sont qualifiées en x_*, alors que l'on ne connaît pas x_* et que, pour le calculer, on va utiliser (4.32), qui suppose précisément que les contraintes sont qualifiées en x_* ? Il semble que le raisonnement tourne en rond. Voilà ce que l'on peut dire à ce sujet.

   - On peut très bien connaître un point stationnaire x_* du problème (P_{EI}) sans le calculer par le système (4.32). Dans ce cas, la question toute théorique de savoir s'il existe des multiplicateurs tels que l'on ait (4.32) a tout son sens. On s'intéresse alors à l'existence de multiplicateurs pour d'autres raisons que le calcul d'une solution ; par exemple pour une analyse au second ordre (section 4.4.4) ou une analyse de sensibilité (section 4.6).
   - D'autre part, si l'on ne connaît pas x_*, on peut très bien essayer de chercher une solution primale-duale (x_*, λ_*) de (4.32). Si l'on en trouve une, tant mieux, on aura forcément l'existence de multiplicateurs ! Si l'on n'en trouve pas, on pourra chercher à savoir pourquoi. L'absence de qualification des contraintes peut en être la cause, mais cela peut aussi venir du fait que l'autre hypothèse du théorème 4.30 n'est pas vérifiée : les fonctions f et c ne sont pas régulières en x_*. De ce point de vue, la qualification des contraintes en x_* n'est pas plus étrange que la régularité de f et c en x_*.
   - Finalement, il arrive parfois que l'on ait qualification des contraintes en tout point de l'ensemble admissible X_{EI}, comme on peut avoir régularité de f et c sur X_{EI}. L'existence de multiplicateurs est alors assurée.

3. On peut retrouver dans les conditions de KKT, l'expression géométrique de l'optimalité dont on est parti pour les obtenir, à savoir $\nabla f(x_*) \in (\mathrm{T}_{x_*} X_{EI})^+$. Supposons, pour simplifier l'illustration, que $E = \varnothing$. En tenant compte des conditions de complémentarité dans (4.32)-(c), la relation (4.32)-(a) s'écrit

$$\nabla f(x_*) = \sum_{i \in I_*^0} \underbrace{(\lambda_*)_i}_{\geqslant 0} (-\nabla c_i(x_*)).$$

   Regardons ce que cette expression exprime dans la figure 4.4, où l'on a représenté une partie de l'ensemble admissible X_{EI} et supposé qu'une solution locale x_* se trouve sur le bord de X_{EI}. Observons d'abord que l'opposé du gradient de c_i en x_*, $-\nabla c_i(x_*)$, est bien orienté comme dans la figure (tous les vecteurs ont été translatés de x_*), car $c_i(x)$ est nul sur la frontière de X_{EI} et négatif dans X_{EI}. La relation ci-dessus exprime que le gradient $\nabla f(x_*)$ est dans le *cône* engendré par ces $-\nabla c_i(x_*)$, avec $i \in I_*^0$ (on ne considère donc que les contraintes actives). On

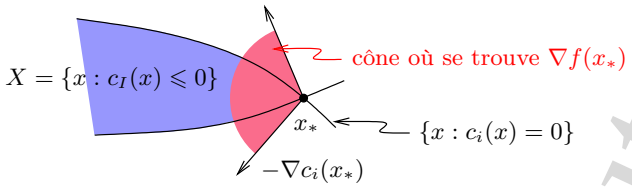


Fig. 4.4. Conditions d'optimalité de KKT

se convaincra sans peine que ce cône est bien le dual du cône tangent $\mathrm{T}_{x_*} X_{EI}$, si bien que l'on retrouve le résultat attendu.

4. La figure 4.4 montre à l'évidence que l'optimisation différentiable repose sur l'analyse convexe, pas seulement sur l'algèbre linéaire (un cône n'est pas un objet de cette dernière).

La proposition suivante montre que les conditions de Karush-Kuhn-Tucker (4.32) sont des conditions suffisantes d'optimalité lorsque le problème (P_{EI}) est convexe. On peut en conclure, qu'il n'y a dans le système d'optimalité (4.32), compliqué, ni trop, ni trop peu de relations.

Proposition 4.31 (CS1 pour problème convexe) *Considérons le problème (P_{EI}), que l'on suppose convexe au sens de la définition 4.24. Soit x_* un point vérifiant les contraintes de (P_{EI}). Si f et c sont dérivables en x_* et s'il existe $\lambda_* \in \mathbb{R}^m$ tel que les conditions de Karush-Kuhn-Tucker (4.32) soient vérifiées, alors x_* est un minimum global de (P_{EI}).*

Démonstration. Comme f est convexe, comme l'ensemble admissible de (P_{EI}) est convexe et comme $x_* \in X_{EI}$, il suffit, d'après la proposition 4.7, de montrer que

$$\forall\, x \in X_{EI} : \quad \langle \nabla f(x_*), x - x_* \rangle \geqslant 0.$$

En utilisant (4.32)-(a), cela revient à montrer que

$$\forall\, x \in X_{EI} : \quad (\lambda_*)^{\mathsf{T}} \left(c'(x_*)(x - x_*)\right) \leqslant 0.$$

On a vu à la démonstration de la proposition 4.20 que l'admissibilité de x et x_* impliquait que $c'_E(x_*)(x - x_*) = 0$. Comme $(\lambda_*)_I \geqslant 0$ et $(\lambda_*)_{I \setminus I^0_*} = 0$ par (4.32)-(c), il suffit de montrer que $c'_i(x_*)(x - x_*) \leqslant 0$ pour $i \in I^0_*$. Pour ces $i \in I^0_*$, on a en effet

$$c'_i(x_*)(x - x_*) = \lim_{t \downarrow 0} \frac{1}{t} \left[c_i(x_* + t(x - x_*)) - c_i(x_*)\right] \leqslant 0,$$

car $c_i(x_*) = 0$ (parce que $i \in I^0_*$) et $c_i(x_* + t(x - x_*)) = c_i((1-t)x_* + tx) \leqslant 0$ pour $t \in]0, 1]$ (parce que $(1-t)x_* + tx \in X_{EI}$ par la convexité supposée de X_{EI}, x et $x_* \in X_{EI}$). □

4.4.2 Qualification des contraintes

S'il n'y a qu'une contrainte fonctionnelle d'égalité c, la proposition 4.14 donne une condition suffisante pour que cette contrainte c définissant X_E soit qualifiée en x : il suffit que c soit C^1 dans un voisinage de x et que $c'(x)$ soit surjective. Le but de cette section est d'établir des conditions similaires lorsque l'ensemble admissible est défini au moyen de contraintes d'égalité et d'inégalité. Les conditions suffisantes de qualification les plus utilisées sont celles désignées par (QC-A), (QC-S), (QC-IL) ou (QC-MF) ci-dessous.

Affinité locale (QC-A)

Définition 4.32 (QC-A) La contrainte c définissant X_{EI} vérifie (QC-A) en $x \in X_{EI}$ si

(i) $c_{I\setminus I_x^0}$ est continue en x,

(ii) $c_{E\cup I_x^0}$ est affine dans un voisinage de x. □

On s'en doute, cette condition est utilisée lorsque l'ensemble admissible X_{EI} est défini par des contraintes affines. Il en est ainsi en optimisation linéaire (chapitre 15) ou, plus généralement, en optimisation quadratique (chapitre **??**). Dans ces disciplines, on ne parle jamais de qualification de contraintes, car celles-ci le sont nécessairement, comme le montre le résutat suivant.

Proposition 4.33 ((QC-A) est une CS de qualification) *Si la contrainte c définissant X_{EI} vérifie les hypothèses (QC-A) de la définition 4.32 en $x \in X_{EI}$, alors c est qualifiée en x au sens de la définition 4.28.*

Démonstration. D'après la proposition 4.27, il suffit de montrer que $\mathrm{T}'_x\, X_{EI} \subseteq \mathrm{T}_x\, X_{EI}$. Soit $d \in \mathrm{T}'_x\, X_{EI}$. On introduit une suite $\{x_k\}$ par $x_k := x + t_k d$, avec $t_k \downarrow 0$. Il suffit de montrer que $x_k \in X_{EI}$ pour k grand. Comme les contraintes actives sont affines dans un voisinage de x, on a pour k grand :

$$c_i(x_k) = c_i(x) + t_k c'_i(x) \cdot d, \quad \text{pour } i \in E \cup I_x^0.$$

D'après les propriétés de d, on en déduit que pour k grand : $c_E(x_k) = 0$ et $c_{I_x^0}(x_k) \leqslant 0$. D'autre part, comme $c_{I\setminus I_x^0}$ est continue en x, $c_{I\setminus I_x^0}(x_k) < 0$ pour k grand. Ceci montre que $x_k \in X_{EI}$ pour k grand. □

Notons encore que, s'il n'y a que des contraintes d'égalité, la condition (QC-A) est nouvelle ; elle n'avait pas en effet été mentionnée à la section 4.3 comme une condition suffisante de qualification de la contrainte définissant X_E.

Slater (QC-S)

Les conditions de qualification de Slater (QC-S) énoncées ci-dessous sont typiquement utilisées en optimisation convexe. L'hypothèse la plus singulière (iii) repose sur les contraintes d'inégalité actives en x car, par leur continuité, les autres ne jouent pas de rôle localement.

Définition 4.34 (QC-S) La contrainte c définissant X_{EI} vérifie les conditions de Slater (QC-S) en $x \in X_{EI}$ si

(i) c_E est *affine*,

(ii) $c_{I\setminus I_x^0}$ est continue en x et $c_{I_x^0}$ est dérivable en x,

(iii) les composantes de $c_{I_x^0}$ sont convexes et on peut trouver un point $\hat{x} \in X_{EI}$ tel que $c_{I_x^0}(\hat{x}) < 0$. □

Parfois, toutes les composantes de c_I sont convexes et (iii) se simplifie en

(iii') les composantes de c_I sont *convexes* et on peut trouver un point $\hat{x}'$ tel que $c_E(\hat{x}') = 0$ et $c_I(\hat{x}') < 0$.

C'est souvent sous cette forme que l'hypothèse est présentée. Il semble que, même lorsque toutes les composantes de c_I sont convexes, l'hypothèse (iii) soit plus générale car on n'y demande pas que $c_{I\setminus I_x^0}(\hat{x}) < 0$. Ce n'est pas le cas, car si (iii) a lieu, le point $\hat{x}' = (x + \hat{x})/2 \in X_{EI}$ vérifie (iii') grâce à la convexité des composantes de c_I puisque $c_{I\setminus I_x^0}(x) < 0$ et $c_{I_x^0}(\hat{x}) < 0$, si bien que $c_I(\hat{x}') \leqslant (c_I(x)+c_I(\hat{x}))/2 < 0$. Dès lors l'intérêt de (iii) par rapport à (iii') est de ne requérir que la convexité des contraintes actives en x.

Proposition 4.35 ((QC-S) est une CS de qualification) *Si la contrainte c définissant X_{EI} vérifie les hypothèses (QC-S) de la définition 4.34 en $x \in X_{EI}$, alors c est qualifiée en x au sens de la définition 4.28.*

Démonstration. D'après la proposition 4.27, il suffit de montrer que $\mathrm{T}'_x X_{EI} \subseteq \mathrm{T}_x X_{EI}$. Soit $d \in \mathrm{T}'_x X_{EI}$. On définit

$$d_k := (1 - \tfrac{1}{k})\, d + \tfrac{1}{k}\,(\hat{x} - x),$$

où $\hat{x}$ est donné par (QC-S).

- Pour $i \in I_x^0$ et $k \geqslant 1$, il vient de la linéarité de l'opérateur dérivée $c_i'(x)$ et de la convexité de c_i :

$$c_i'(x) \cdot d_k = (1 - \tfrac{1}{k}) \underbrace{c_i'(x) \cdot d}_{\leqslant 0} + \tfrac{1}{k} \underbrace{c_i'(x) \cdot (\hat{x} - x)}_{\leqslant c_i(\hat{x}) - c_i(x) < 0} < 0,$$

  car $c_i'(x) \cdot d \leqslant 0$ ($d \in \mathrm{T}'_x X_{EI}$), $c_i(x) = 0$ ($x \in X_{EI}$) et $c_i(\hat{x}) < 0$. Dès lors, il existe un réel $t_k \in]0, \frac{1}{k}]$ tel que, pour tout $i \in I_x^0$: $c_i(x + t_k d_k) \leqslant c_i(x) = 0$. On définit $x_k := x + t_k d_k$ qui forme une suite convergeant vers x.
- Pour $i \in I \setminus I_x^0$, la continuité de c_i implique que $c_i(x_k) \leqslant 0$ pour tout k assez grand.
- Pour $i \in E$, l'affinité de c_i implique que $c_i'(x) \cdot (\hat{x} - x) = c_i(\hat{x}) - c_i(x) = 0$, si bien que $c_i'(x) \cdot d_k = c_i'(x) \cdot d = 0$ ($d \in \mathrm{T}'_x X_{EI}$) et $c_i(x_k) = c_i(x) + t_k\, c_i'(x) \cdot d_k = 0$.

Dès lors, $x_k \in X_{EI}$ pour tout k assez grand. Par ailleurs, lorsque $k \to \infty$, $t_k \downarrow 0$ et $(x_k - x)/t_k = d_k \to d$. Donc $d \in \mathrm{T}_x X_{EI}$. □

Indépendance linéaire (QC-IL)

Définition 4.36 (QC-IL) La contrainte c définissant X_{EI} vérifie les conditions (QC-IL) en $x \in X_{EI}$ si

(i) $c_{E\cup I_x^0}$ est C^1 dans un voisinage de x et $c_{I\setminus I_x^0}$ est continue en x,

(ii) les gradients des contraintes actives en x, à savoir les $\nabla c_i(x)$ pour $i \in E \cup I_x^0$, sont linéairement indépendants, ce qui s'écrit

$$\sum_{i\in E\cup I_x^0} \alpha_i \nabla c_i(x) = 0 \qquad \Longrightarrow \qquad \alpha_i = 0 \text{ pour tout } i \in E \cup I_x^0. \qquad \square$$

Commençons par donner des formulations équivalentes évidentes de la condition (ii) de la définition précédente.

Proposition 4.37 (autres formulations de (QC-IL)) *Supposons que $c_{E\cup I_x^0}$ soit dérivable en x. Alors les propriétés suivantes sont équivalentes :*

(i) *les gradients $\nabla c_i(x)$, pour $i \in E \cup I_x^0$, sont linéairement indépendants,*

(ii) *$c'_{E\cup I_x^0}(x)$ est surjective,*

(iii) *pour tout $g \in \mathbb{E}$, l'ensemble*

$$\{\lambda \in \mathbb{R}^m : g + c'_{E\cup I_x^0}(x)^* \lambda_{E\cup I_x^0},\ \lambda_{I\setminus I_x^0} = 0\}$$

est soit vide soit un singleton.

Démonstration. La condition (i) exprime l'injectivité de $c'_{E\cup I_x^0}(x)^*$, car

$$\begin{aligned}
\sum_{i\in E\cup I_x^0} \alpha_i \nabla c_i(x) = 0 \quad &\Longleftrightarrow \quad \sum_{i\in E\cup I_x^0} \alpha_i \langle \nabla c_i(x), d\rangle = 0, \quad \forall\, d \in \mathbb{E} \\
&\Longleftrightarrow \quad \alpha_{E\cup I_x^0}^{\mathsf{T}} \left(c'_{E\cup I_x^0}(x) \cdot d \right) = 0, \quad \forall\, d \in \mathbb{E} \\
&\Longleftrightarrow \quad \langle c'_{E\cup I_x^0}(x)^* \alpha_{E\cup I_x^0}, d\rangle = 0, \quad \forall\, d \in \mathbb{E} \\
&\Longleftrightarrow \quad c'_{E\cup I_x^0}(x)^* \alpha_{E\cup I_x^0} = 0.
\end{aligned}$$

Cette injectivité est bien sûr équivalente à (ii). Par ailleurs, (iii) exprime, de manière compliquée, que $c'_{E\cup I_x^0}(x)^*$ est injective. $\square$

La condition (iii) n'est mentionnée que pour faciliter la comparaison avec une condition similaire exprimant (QC-MF) ci-dessous. La condition (ii) montre que (QC-IL) étend aux inégalités, de manière un peu excessive comme nous allons le voir, la condition suffisante de qualification de contraintes d'égalité de la proposition 4.14. Le fait qu'il s'agisse d'une condition suffisante de qualification se démontre d'ailleurs directement en utilisant la proposition 4.14, comme on va le voir ci-dessous.

Proposition 4.38 ((QC-IL) est une CS de qualification) *Si la contrainte c définissant X_{EI} vérifie les hypothèses (QC-IL) de la définition 4.36 en $x \in X_{EI}$, alors c est qualifiée en x au sens de la définition 4.28.*

Démonstration. D'après la proposition 4.27, il suffit de montrer que $\mathrm{T}'_x\, X_{EI} \subseteq \mathrm{T}_x\, X_{EI}$. Soit $d \in \mathrm{T}'_x\, X_{EI}$. On note $J \subseteq I^0_x$ tel que

$$c'_J(x) \cdot d = 0 \qquad \text{et} \qquad c'_{I^0_x \setminus J}(x) \cdot d < 0.$$

Comme $c'_J(x)$ est surjective, par le même argument que celui utilisé dans la démonstration de la proposition 4.14, on peut trouver des suites $\{x_k\} \subseteq \mathbb{E}$ et $\{t_k\} \subseteq \mathbb{R}_{++}$ telles que $c_{E\cup J}(x_k) = 0$, $t_k \downarrow 0$ et $(x_k - x)/t_k \to d$. Forcément, $x_k \to x$. Alors,

- par $c_{I^0_x \setminus J}(x) = 0$ et $c'_{I^0_x \setminus J}(x) \cdot d < 0$, on voit que $c_{I^0_x \setminus J}(x_k) \leqslant 0$ pour k assez grand,
- par la continuité de $c_{I \setminus I^0_x}$ et $c_{I \setminus I^0_x}(x) < 0$, $c_{I \setminus I^0_x}(x_k) \leqslant 0$ pour k assez grand.

Dès lors $\{x_k\} \subseteq X_{EI}$ pour k assez grand et donc $d \in \mathrm{T}_x\, X_{EI}$. □

Mangasarian-Fromovitz (QC-MF)

Définition 4.39 (QC-MF) La contrainte c définissant X_{EI} vérifie les conditions de Mangasarian-Fromovitz (QC-MF) en $x \in X_{EI}$ si

(*i*) $c_{E\cup I^0_x}$ est dérivable en x et $c_{I \setminus I^0_x}$ est continue en x,

(*ii*) les gradients des contraintes actives en x, à savoir les $\nabla c_i(x)$ pour $i \in E \cup I^0_x$, vérifient

$$\sum_{i \in E \cup I^0_x} \alpha_i \nabla c_i(x) = 0 \quad \text{et} \quad \alpha_{I^0_x} \geqslant 0 \qquad \Longrightarrow \qquad \alpha_{E\cup I^0_x} = 0.$$

□

Les conditions de qualifications (QC-IL) et (QC-MF) méritent d'être comparées.

- La différence entre (QC-IL) et (QC-MF) provient essentiellement des conditions (*ii*) dans les définitions 4.36 et 4.39. Après examen, on voit clairement que (QC-MF) est plus faible, plus souvent vérifiée, que (QC-IL), puisque qu'avec (QC-MF) la combinaison linéaire ne sera pas nécessairement trivialement nulle si ses coefficients α_i, avec $i \in I^0_x$, ne sont pas positifs. On peut résumer cette observation par l'implication

$$\boxed{\text{(QC-IL)} \quad \Longrightarrow \quad \text{(QC-MF)}.} \tag{4.36}$$

- Les deux conditions sont illustrées à la figure 4.5, dans laquelle l'ensemble admissible est défini par deux contraintes : $c_1(x) \leqslant 0$ et $c_2(x) \leqslant 0$. On a repris à gauche le cas déjà discuté de la figure 4.2 : aucune des deux conditions (QC-IL) et (QC-MF) n'y est vérifiée et l'existence de multiplicateurs n'est pas assurée, bien que le problème d'optimisation ait une solution (l'ensemble admissible est réduit à un seul point). À droite, (QC-MF) est vérifiée, mais pas (QC-IL). D'après la proposition 4.41 ci-dessous, les contraintes sont alors qualifiées et, d'après le

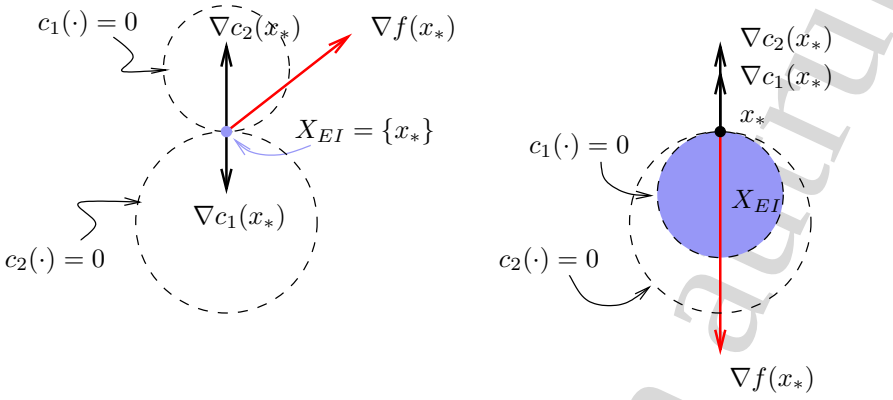


Fig. 4.5. Comparaison des conditions de qualification (QC-IL) et (QC-MF)

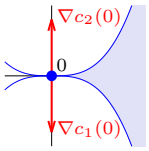
théorème 4.30, il existe des multiplicateurs de Lagrange tel que l'on ait (4.32). Dans le cas présent, ceci implique que $\nabla f(x_*)$ doit être colinéaire et opposé à $\nabla c_1(x_*)$ et $\nabla c_2(x_*)$.

- On peut aussi dire que (QC-IL) traduit en particulier le fait que les sous-espaces vectoriels $\mathcal{R}(c'_E(x)^*)$ et $\mathcal{R}(c'_{I_0(x)}(x)^*)$ ne peuvent se rencontrer qu'en 0, alors que (QC-MF) implique que le sous-espace vectoriel $\mathcal{R}(c'_E(x)^*)$ ne rencontre le *cône* $\text{cone}\{\nabla c_i(x) : i \in I_0(x)\}$ qu'en 0. Dans ce sens, (QC-IL) est une condition qui ne fait intervenir que des objets de l'algèbre linéaire, alors que (QC-MF) requiert des concepts d'analyse convexe.

Ces remarques montrent clairement l'intérêt de la condition de qualification (QC-MF). Malgré sa complexité supplémentaire, il faudra faire l'effort de la comprendre, de l'assimiler, de l'utiliser.

Une bonne manière de vérifier que (QC-MF) *n'*est *pas* vérifiée est de montrer que l'ensemble admissible *n'*est *pas* stable pour de petites perturbations. On veut dire par là que l'ensemble $X^p_{EI} := \{x \in \mathbb{R} : c_E(x) + p_E = 0,\ c_I(x) + p_I \leqslant 0\}$ peut être vide pour certaines perturbations $p \in \mathbb{R}^m$ aussi petites que l'on veut (dans le cas contraire, l'on dit que la description de X_{EI} par c est *stable*) ; dans ce cas donc (QC-MF) n'est pas vérifié. On montrera en effet, dans un cadre plus général (corollaire **??**), que si (QC-MF) a lieu, alors sa description par c est stable. Ainsi, toujours à la figure 4.5, on voit qu'il n'y a pas de stabilité dans le tracé de gauche (l'ensemble admissible est vide pour des perturbations p, vérifiant $p_1 = p_2 > 0$), alors qu'il est stable à droite. On comprend que numériquement, cette propriété de stabilité de l'ensemble admissible est importante et donc qu'il importe que (QC-MF) soit vérifié lorsque l'on cherche à résoudre le problème numériquement. Notons enfin que l'implication ne va que dans un sens : on peut très bien avoir une description de l'ensemble admissible qui est stable alors que (QC-MF) n'est pas vérifié. C'est le cas de l'ensemble

$$\{x \in \mathbb{R}^2 : -x_1^3 \leqslant x_2 \leqslant x_1^3\}, \qquad (4.37)$$



qui reste non vide, quel que soit la perturbation des contraintes, alors que (QC-MF) n'a pas lieu en $x = 0$ (car les gradients des contraintes $c_1(x) := -x_1^3 - x_2$ et $c_2(x) := -x_1^3 + x_2$ y sont colinéaires et opposés).

Avant de montrer que (QC-MF) implique la qualification de c en x pour représenter X_{EI}, donnons des conditions équivalentes à (QC-MF) qui nous seront utiles. Elles sont à rapprocher de celles énoncées pour (QC-IL) à la proposition 4.37.

- Comparons d'abord les conditions (ii) des propositions 4.37 et 4.40. Si la condition (QC-IL) peut s'exprimer par la surjectivité de la jacobienne $c'_{E\cup I_x^0}(x)$, la condition de Mangasarian-Fromovitz, plus faible que (QC-IL), peut se voir comme une propriété de *surjectivité faible* de $c'_{E\cup I_x^0}(x)$. Le qualificatif *faible* vient du fait que l'on n'a pas nécessairement mieux que l'inégalité pour les indices dans I_x^0.
- On peut aussi comparer les conditions (iii) de la proposition 4.37 et (iv) de la proposition 4.40. L'ensemble considéré au point (iii) de la proposition 4.37 est un sous-espace affine (éventuellement vide) contenant au plus un point, tandis que celui considéré au point (iv) de la proposition 4.40 est un polyèdre convexe (éventuellement vide), pouvant contenir plus d'un point, mais borné. Ce dernier résultat permet de montrer aisément que l'ensemble des multiplicateurs optimaux d'un problème d'optimisation est borné si ses contraintes sont qualifiées au sens de Mangasarian-Fromovitz (proposition 4.43).

Proposition 4.40 (autres formulations de (QC-MF)) *Soit $x \in X_{EI}$ et supposons que la fonction $c_{E\cup I_x^0} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^{|E\cup I_x^0|}$ soit dérivable en x. Alors les propriétés suivantes sont équivalentes :*

(i) (QC-MF) a lieu en x,
(ii) $\forall v \in \mathbb{R}^m$, $\exists d \in \mathbb{E}$ tel que l'on ait $c'_E(x)\cdot d = v_E$ et $c'_{I_x^0}(x)\cdot d \leqslant v_{I_x^0}$,
(iii) $c'_E(x)$ est surjective et il existe $d \in \mathbb{E}$ tel que $c'_E(x)\cdot d = 0$ et $c'_{I_x^0}(x)\cdot d < 0$,
(iv) pour tout $g \in \mathbb{E}$, le polyèdre convexe

$$\{\lambda \in \mathbb{R}^m : g + c'_E(x)^*\lambda_E + c'_{I_x^0}(x)^*\lambda_{I_x^0} = 0,\ \lambda_{I_x^0} \geqslant 0,\ \lambda_{I\setminus I_x^0} = 0\}$$

est soit vide soit borné.

On peut inverser les inégalités dans (ii) et (iii), en jouant avec l'opposé de d et de v.

Démonstration. $[(i) \Rightarrow (ii)]$ D'après (QC-MF) :

$$\{(\lambda,\mu) : c'_E(x)^*\lambda + c'_{I_x^0}(x)^*\mu = 0,\ \mu \geqslant 0\} = \{(0,0)\}.$$

En prenant le dual de ces ensembles, on obtient grâce à la proposition 2.40 (lemme de Farkas généralisé)

$$\left\{ \begin{pmatrix} c'_E(x) \\ c'_{I_x^0}(x) \end{pmatrix} d + \begin{pmatrix} 0 \\ I \end{pmatrix} h : d \in \mathbb{R}^n,\ h \in \mathbb{R}_+^{|I_x^0|} \right\} = \mathbb{R}^{m_E} \times \mathbb{R}^{|I_x^0|}.$$

On en déduit que, quel que soit $v \in \mathbb{R}^{m_E} \times \mathbb{R}^{|I_x^0|}$, on peut trouver $d \in \mathbb{R}^n$ et $h \in \mathbb{R}_+^{|I_x^0|}$ tels que $c'_E(x) \cdot d = v_E$ et $c'_{I_x^0}(x) \cdot d + h = v_{I_x^0}$, ce qui n'est autre que (ii).

$[(ii) \Rightarrow (iii)]$ La surjectivité de $c'_E(x)$ découle immédiatement de (ii). D'autre part, en prenant $v \in \mathbb{R}^{m_E} \times \mathbb{R}^{|I_x^0|}$ dans (ii) tel que $v_E = 0$ et $v_{I_x^0} = -(1, \ldots, 1)$, on obtient la deuxième condition de (iii).

$[(iii) \Rightarrow (i)]$ Soit $(\lambda, \mu) \in \mathbb{R}^{m_E} \times \mathbb{R}^{|I_x^0|}$ vérifiant

$$c'_E(x)^* \lambda + c'_{I_x^0}(x)^* \mu = 0 \qquad \text{et} \qquad \mu \geqslant 0.$$

En multipliant scalairement cette identité par le vecteur d donné au point (iii), on trouve

$$\mu^\mathsf{T} c'_{I_x^0}(x) d = 0.$$

Comme $\mu \geqslant 0$ et $c'_{I_x^0}(x)d < 0$, ceci implique que $\mu = 0$. Alors la surjectivité de $c'_E(x)$ et $c'_E(x)^*\lambda = 0$ impliquent que $\lambda = 0$.

$[(i) \Leftrightarrow (iv)]$ Désignons par Λ le polyèdre convexe de (iv), que l'on suppose non vide, sinon l'implication $(i) \Rightarrow (iv)$ est triviale et l'implication réciproque n'apporte rien. Alors, selon le corollaire 2.8, Λ est borné si, et seulement si, son cône asymptotique Λ^∞ est réduit à $\{0\}$. D'après l'exercice 2.18, on a

$$\Lambda^\infty = \{\mu \in \mathbb{R}^m : c'_E(x)^* \mu_E + c'_{I_x^0}(x)^* \mu_{I_x^0} = 0,\ \mu_{I_x^0} \geqslant 0,\ \mu_{I \setminus I_x^0} = 0\},$$

si bien que ces propriétés sont équivalentes à (QC-MF). □

La proposition 4.40 explicite un aspect algébrique des conditions de Mangasarian-Fromovitz (QC-MF). Celles-ci renferment également un aspect topologique que nous allons préciser. On sait que si A est une matrice surjective $m \times n$ et $v \in \mathbb{R}^m$, on peut trouver $d \in \mathbb{R}^n$ tel que $Ad = v$ (par définition même de la surjectivité, bien sûr). La proposition précédente généralise cela pour des inégalités : si A_E et A_J sont des matrices $m_E \times n$ et $m_J \times n$, vérifiant la condition de régularité ($\alpha_E \in \mathbb{R}^{m_E}$ et $\alpha_J \in \mathbb{R}^{m_J}$)

$$A_E^\mathsf{T} \alpha_E + A_J^\mathsf{T} \alpha_J = 0, \quad \alpha_J \geqslant 0 \qquad \Longrightarrow \qquad (\alpha_E, \alpha_J) = 0, \tag{4.38}$$

alors, quel que soit $v \in \mathbb{R}^{m_E + m_J}$, on peut trouver $d \in \mathbb{R}^n$ tel que $A_E d = v_E$ et $A_J d \leqslant v_J$. Ces deux résultats ne disent rien sur la grandeur de d et on peut se demander si lorsque v tend vers 0, il en de même de d. Ce n'est certainement pas le cas pour une solution d arbitraire car, dans le premier cas, celle-ci n'est définie qu'à un élément du noyau de A près et, si celui-ci n'est pas réduit à $\{0\}$, on pourra vérifier $Ad = v$ avec des d arbitrairement grands. On peut montrer cependant que l'on peut *choisir* d tel qu'il en soit ainsi : *si A_E et A_J vérifient la condition (4.38), il existe une constante C telle que pour tout $v \in \mathbb{R}^{m_E + m_J}$, on peut trouver $d \in \mathbb{R}^n$ tel que $A_E d = v_E$, $A_J d \leqslant v_J$ et $\|d\| \leqslant C\|v\|$*. Le résultat est évident s'il n'y a que des égalités à vérifier : il suffit de choisir $d = A^\mathsf{T}(AA^\mathsf{T})^{-1}v$ (AA^T est inversible si A est surjective !). Le cas où il y a également des inégalités à vérifier est proposé à l'exercice 4.17.

Montrons à présent que si l'une des conditions (QC-IL) ou (QC-MF) est vérifiée alors les contraintes sont qualifiées en x.

Proposition 4.41 (conditions suffisantes de qualification des contraintes) *Soit x vérifiant les contraintes de (P_{EI}) et supposons que les hypothèses* **??** *soient vérifiées. Alors les contraintes de (P_{EI}) sont qualifiées en x au sens de la définition 4.28, si l'une des conditions (QC-IL) ou (QC-MF) est satisfaite. Plus précisément, on a le diagramme suivant :*

$$\begin{array}{ccc} \textit{(QC-MF)} & \Longleftarrow & \textit{(QC-IL)} \\ \Downarrow & & \\ \textit{(QC)} & & \end{array}$$

De plus, si c_E est affine et les composantes de $c_{I_x^0}$ sont convexes, alors

$$\textit{(QC-S)} \quad \Longleftarrow \quad \textit{(QC-MF)}.$$

Démonstration. 2) Montrons à présent que (QC-S) implique le point (iii) de la proposition 4.40 et donc que (QC-MF) a lieu. Soient $\hat{x}$ le point admissible donné dans (QC-S) et $d := \hat{x} - x$. Du fait que c_E est affine et que $c_E(x) = c_E(\hat{x}) = 0$, on a $c'_E(x) \cdot d = 0$. Ensuite, pour $i \in I_x^0$, grâce à la convexité de c_i :

$$c'_i(x) \cdot d \leqslant c_i(\hat{x}) - c_i(x) = c_i(\hat{x}) < 0.$$

Montrons la réciproque lorsque c_E est affine (dernière partie de la proposition). Avec la direction d donnée par le point (iii) de la proposition 4.40, on voit que le point $\hat{x} = x + td$ vérifie $c_E(\hat{x}) = 0$, $c_{I_x^0}(\hat{x}) < 0$ et $c_{I \setminus I_x^0}(\hat{x}) \leqslant 0$, si t est pris assez petit.

3) On a déjà fait remarquer que (QC-IL) implique (QC-MF) et donc le fait démontré ci-dessous que (QC-MF) implique la qualification des contraintes en x suffit à montrer qu'il en est de même avec (QC-IL). On peut toutefois en donner une preuve directe rapide. Soit $d \in \mathrm{T}'_x X_{EI}$. Puisque $c'_{E \cup I_x^0}(x)$ est surjective, on peut comme dans la démonstration de la proposition 4.14 construire un chemin $t \mapsto \xi(t)$, défini pour t voisin de $0 \in \mathbb{R}$, tel que

$$c_{E \cup I_x^0}(\xi(t)) = 0 \text{ pour } t \text{ voisin de } 0, \quad \xi(0) = x \quad \text{et} \quad \xi'(0) = d.$$

Alors la suite $\{x_k\}$ définie par $x_k = \xi(t_k)$, avec $t_k \downarrow 0$, est la suite recherchée. Elle vérifie en effet $c_{E \cup I_x^0}(x_k) = 0$ et $c_{I \setminus I_x^0}(x_k) \leqslant 0$ (parce que $c_{I \setminus I_x^0}(x) < 0$ et $c_{I \setminus I_x^0}$ est continue en x). Donc $x_k \in X_{EI}$ et comme $(x_k - x)/t_k = (\xi(t_k) - x)/t_k \to d$, on a bien $d \in \mathrm{T}_x X_{EI}$.

4) Il reste à démontrer que (QC-MF) implique la qualification des contraintes en x. Soit $d \in \mathrm{T}'_x X_{EI}$, vérifiant donc $c'_E(x) \cdot d = 0$ et $c'_{I_x^0}(x) \cdot d \leqslant 0$. Il faut montrer que $d \in \mathrm{T}_x X_{EI}$. Soit

$$D(x) := \{d : c'_E(x) \cdot d = 0,\ c'_{I_x^0}(x) \cdot d < 0\} \subseteq \mathrm{T}'_x X_{EI}.$$

Montrons que $\overline{D(x)} = \mathrm{T}'_x X_{EI}$. Comme $\mathrm{T}'_x X_{EI}$ est fermé, on a $\overline{D(x)} \subseteq \mathrm{T}'_x X_{EI}$. Inversement, soit $d_0 \in D(x)$, qui est non vide lorsque (QC-MF) a lieu (proposition

4.40). Si $d \in \mathrm{T}'_x\, X_{EI}$, la suite $\{d_k\}$ définie par $d_k = d + \frac{1}{k} d_0$ est dans $D(x)$ et converge vers d.

Montrons que $D(x) \subseteq \mathrm{T}_x\, X_{EI}$. Soit $d_0 \in D(x)$. Comme $c'_E(x) \cdot d_0 = 0$ et $c'_E(x)$ est surjective, d_0 est tangent à $\{\tilde{x} \in \mathbb{E} : c_E(\tilde{x}) = 0\}$ en x (proposition 4.14). Donc il existe des suites $\{x_k\} \subseteq \mathbb{E}$ et $\{t_k\} \downarrow 0$ telles que

$$c_E(x_k) = 0 \qquad \text{et} \qquad \frac{x_k - x}{t_k} \to d_0.$$

Pour conclure, il suffit de montrer que $c_I(x_k) \leqslant 0$ pour k assez grand. Si $i \in I^0_x$, on a

$$c_i(x_k) = c'_i(x) \cdot (x_k - x) + o(\|x_k - x\|).$$

En divisant par t_k et en notant que $c'_i(x) \cdot d_0 < 0$, on voit que $c_i(x_k) < 0$ pour k assez grand. Si $i \in I \setminus I^0_x$, $c_i(x) < 0$ et comme $x_k \to x$, $c_i(x_k) < 0$ pour k assez grand.

On peut à présent conclure puisque d'après ce qui précède et la proposition 4.27,

$$D(x) \subseteq \mathrm{T}_x\, X_{EI} \subseteq \mathrm{T}'_x\, X_{EI}.$$

En prenant l'adhérence et en se rappelant que $\overline{D(x)} = \mathrm{T}'_x\, X_{EI}$ et que $\mathrm{T}_x\, X_{EI}$ est fermé, on obtient $\mathrm{T}_x\, X_{EI} = \mathrm{T}'_x\, X_{EI}$. □

La démonstration du point 4 (reprise de [293 ; 1996]) peut aussi se faire par une approche semblable à celle utilisée au point 3, mais elle demande plus de régularité sur f et c. Elle consiste à construire un chemin $t \mapsto \xi(t)$ dans X_{EI} pour $t \geqslant 0$ petit qui accepte d comme tangente en $t = 0$ (cette construction sera faite dans la démonstration du lemme 4.45 qui conduit aux conditions nécessaires du deuxième ordre).

Notons pour conclure, que les conditions de Mangasarian-Fromovitz ne sont pas nécessaires pour avoir la qualification des contraintes. Un contre-exemple est donné à l'exercice 4.15.

4.4.3 Ensemble des multiplicateurs optimaux

Soit $\lambda_* \in \mathbb{R}^m$ un multiplicateur optimal (ou solution duale) associé à une solution $x_* \in \mathbb{E}$ du problème (P_{EI}). Il sera utile d'introduire les ensembles d'indices suivants :

$$I^{0+}_* := \{i \in I^0_* : (\lambda_*)_i > 0\} \qquad \text{et} \qquad I^{00}_* := \{i \in I^0_* : (\lambda_*)_i = 0\}. \tag{4.39}$$

Ce sont donc des ensembles d'indices qui dépendent à la fois de x_* et λ_*. Les contraintes d'indices $i \in I^{0+}_*$ sont dites *fortement actives* et celles d'indices $i \in I^{00}_*$ sont dites *faiblement actives*. Ces dernières, bien qu'actives ($c_i(x_*) = 0$), peuvent être ôtées du problème sans modifier la stationnarité de x_* ($(\lambda_*)_i = 0$).

Il peut y avoir plus d'une solution duale λ_* associée à une solution primale x_*. L'ensemble des multiplicateurs associés à x_* est noté

$$\Lambda_* := \Lambda(x_*) := \{\lambda_* \in \mathbb{R}^m : (x_*, \lambda_*) \text{ est solution primale-duale de } (P_{EI})\}.$$

La solution x_* étant fixée, les conditions d'optimalité (4.32) montrent que Λ_* est un polyèdre convexe de $\mathbb{R}^m$:

$$\Lambda_* = \{\lambda \in \mathbb{R}^m : \nabla f(x_*) + c'(x_*)^*\lambda = 0,\ \lambda_{I^0_*} \geqslant 0,\ \lambda_{I\setminus I^0_*} = 0\}.$$

En particulier, Λ_* est fermé. Il est non vide si les contraintes sont qualifiées en x_* (théorème 4.30). En raisonnant comme dans la démonstration de la proposition 2.20, on voit que $\lambda_* \in \Lambda_*$ est un sommet de Λ_* si $c'_{E\cup I^{0+}_*}(x_*)$ est surjective. En particulier, Λ_* n'a pas de sommet si $c'_E(x_*)$ n'est pas surjective.

Cet ensemble Λ_* est clairement réduit à un seul multiplicateur si les conditions de qualification (QC-IL) (indépendance linéaire des gradients des contraintes actives) sont vérifiées en x_*. En effet, $(\mathrm{KKT})_{(a)}$ s'écrit aussi

$$\nabla f(x_*) + c'_{E\cup I^0_*}(x_*)^*(\lambda_*)_{E\cup I^0_*} = 0,$$

puisque $(\lambda_*)_{I\setminus I^0_*} = 0$. Par (QC-IL), $c'_{E\cup I^0_*}(x_*)^*$ est injective et il n'existe donc qu'un seul $(\lambda_*)_{E\cup I^0_*}$ vérifiant $(\mathrm{KKT})_{(a)}$.

L'unicité du multiplicateur optimal a lieu, en fait, sous une condition plus faible que (QC-IL), mais plus forte que (QC-MF), que donne le résultat suivant [343]. Cette condition est aussi nécessaire et suffisante. La condition (4.40) est parfois appelée la *condition de qualification de Mangasarian-Fromovitz stricte* (QC-MFS).

Proposition 4.42 (unicité du multiplicateur) *Soit x_* un point stationnaire de (P_{EI}) (donc f et $c_{E\cup I^0_*}$ sont différentiables en x_* et $\Lambda_* \neq \varnothing$). Alors $\Lambda_* = \{\lambda_*\}$ si, et seulement si,*

$$\left.\begin{array}{c}\displaystyle\sum_{i\in E\cup I^0_*} \alpha_i \nabla c_i(x_*) = 0 \\ \alpha_i \geqslant 0 \text{ pour tout } i \in I^{00}_*\end{array}\right\} \implies \alpha_{E\cup I^0_*} = 0. \tag{4.40}$$

Démonstration. [⇒] On montre la contraposée. Supposons qu'il existe des coefficients α_i non tous nuls tels que $\sum_{i\in E\cup I^0_*} \alpha_i \nabla c_i(x_*) = 0$ et $\alpha_i \geqslant 0$ pour tout $i \in I^{00}_*$ (c'est par cet ensemble d'indices que λ_* intervient). On pose $\alpha_i = 0$ pour $i \in I \setminus I^0_*$. Alors $\lambda_* + \varepsilon\alpha \in \Lambda_*$ pour $\varepsilon > 0$ petit et Λ_* ne serait pas réduit à un seul multiplicateur.

[⇐] Soit $\lambda'_* \in \Lambda_*$ et $\alpha := \lambda'_* - \lambda_*$. Il suffit de montrer que $\alpha = 0$. Clairement : $\sum_{i\in E\cup I^0_*} \alpha_i \nabla c_i(x_*) = 0$ et, pour $i \in I^{00}_*$, on a $\alpha_i = (\lambda'_*)_i \geqslant 0$. D'après (4.40), $\alpha = 0$. □

Mais en toute généralité, Λ_* peut ne pas être réduit à un point. En ce qui concerne son caractère borné, on a le résultat suivant [215].

Proposition 4.43 (bornitude des multiplicateurs) *Soient (x_*, λ_*) un couple vérifiant les conditions de KKT (4.32) et Λ_* l'ensemble convexe fermé non vide des multiplicateurs optimaux associés à x_*. Alors Λ_* est borné si, et seulement si, les conditions de qualification de Mangasarian-Fromovitz (QC-MF) ont lieu en x_*.*

DÉMONSTRATION. C'est une conséquence de l'équivalence $(i) \Leftrightarrow (iv)$ de la proposition 4.40. □

4.4.4 Conditions d'optimalité du second ordre ⊖

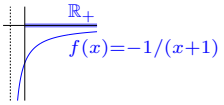
Les conditions d'optimalité du second ordre en présence de contraintes d'inégalité ne s'obtiennent ni ne s'écrivent aussi aisément que lorsqu'il n'y a que des contraintes d'égalité. D'abord, ce n'est pas le cône tangent qui se manifeste dans ces conditions comme dans le théorème 4.21, mais un cône plus petit que l'on appelle le *cône critique*. Par ailleurs, le multiplicateur optimal qui intervient dans la hessienne du lagrangien doit être déterminé en fonction de la direction choisie dans le cône critique. Nous commencerons l'étude des conditions du deuxième ordre par deux sous-sections donnant un premier éclairage sur ces changements importants. Ensuite viendront les conditions nécessaires puis les conditions suffisantes du second ordre.

L'approche suivie ici pour établir les conditions *nécessaires* d'optimalité du second ordre supposera d'emblée la qualification de Mangasarian-Fromovitz. La condition nécessaire d'optimalité du théorème 4.46 reste pourtant valable et peut même être renforcée si les contraintes sont localement affines (elle l'est clairement si (QC-IL) a lieu, car (QC-MF) en découle). Cela peut se voir par la même approche que celle utilisée dans la démonstration du théorème 4.21. L'exercice 4.21 montre ainsi que si la condition de qualification (QC-A) ou (QC-IL) est vérifiée, on a des conditions du second ordre fortes (voir plus loin pour la définition de cette expression).

Le cône critique

Il est tentant d'essayer de généraliser le théorème 4.21 au problème (P_{EI}), en cherchant à montrer qu'en une solution primale-duale (x_*, λ_*), on doit avoir $\langle L_* d, d\rangle$ positif pour toute direction tangente $d \in \mathrm{T}_{x_*} X_{EI}$; on a noté $L_* := \nabla^2_{xx}\ell(x_*, \lambda_*)$ la hessienne du lagrangien au point stationnaire considéré. Ce résultat n'est pas correct, car le cône tangent $\mathrm{T}_{x_*} X_{EI}$ n'est pas celui qui convient, comme le montre le problème suivant

$$\min \{-1/(x+1) : x \in \mathbb{R}_+\}. \qquad (4.41)$$



Ce problème a pour unique solution primale-duale $(x_*, \lambda_*) = (0, 1)$ et le cône tangent en la solution s'écrit $\mathrm{T}_{x_*} X_{EI} = \mathbb{R}_+$ si bien que l'on peut prendre $d = 1$ comme direction tangente, mais $\langle L_* d, d\rangle = -2$ n'est pas positif. Nous verrons que $\langle L_* d, d\rangle$ est positif, mais pour des directions d dans un cône plus petit que le cône tangent.

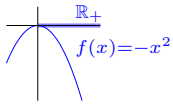
À la recherche d'un cône plus petit, on peut observer que, comme toute solution x_* du problème (P_{EI}) minimise aussi f *localement* sur

$$X^{=}_{EI} := \{x \in \mathbb{E} : c_{E \cup I^0_*}(x) = 0,\ c_{I \setminus I^0_*}(x) < 0\},$$

inclus dans X_{EI}, le théorème 4.21 nous apprend que $\langle L_* d, d\rangle$ est positif pour toute direction $d \in \mathrm{T}_{x_*} X^{=}_{EI}$ et toute solution duale $\lambda_* \in \Lambda_*$ (celles-ci sont aussi solutions duales du problème minimisant f sur $X^{=}_{EI}$). Nous verrons cependant que le cône

$\mathrm{T}_{x_*} X_{EI}^{=}$ est trop petit, dans le sens où il ne permet pas d'établir des conditions suffisantes d'optimalité du second ordre. Considérons en effet le problème

$$\min \{-x^2 : x \in \mathbb{R}_+\}. \qquad (4.42)$$



Si $x_* = 0$, $X_{EI}^{=} = \{0\}$, si bien que $\mathrm{T}_{x_*} X_{EI}^{=} = \{0\}$ et la hessienne du lagrangien $L_* = -2$ est bien définie positive sur $\mathrm{T}_{x_*} X_{EI}^{=} \setminus \{0\} = \varnothing$, mais x_* n'est pas un minimum local du problème.

Le bon cône s'avérera être le cône linéarisant $\mathrm{T}'_{x_*} X_{EI,f}$ de l'ensemble

$$X_{EI,f} := \{x \in X_{EI} : f(x) \leqslant f(x_*)\}, \qquad (4.43)$$

sur lequel f est également minimisée en une solution x_* de (P_{EI}). Ce cône est plus petit que le cône tangent à l'ensemble admissible en x_*, mais suffisamment grand pour permettre d'avoir des conditions suffisantes d'optimalité du second ordre (théorème 4.47). On l'appelle le cône critique du problème.

Définition 4.44 On appelle *cône critique* du problème (P_{EI}) en un point admissible $x \in X_{EI}$, l'ensemble noté et défini par

$$C(x) := \{d \in \mathbb{E} : c'_E(x) \cdot d = 0,\ c'_{I^0_*}(x) \cdot d \leqslant 0,\ f'(x) \cdot d \leqslant 0\}. \qquad (4.44a)$$

Une direction $d \in C(x)$ est appelée *direction critique* en x. On utilise la notation simplifiée $C_* := C(x_*)$. □

Dans l'exemple (4.41), $C_* = \{0\}$ est plus petit que le cône tangent $\mathrm{T}_{x_*} X_{EI} = \mathbb{R}_+$. Dans l'exemple (4.42), $C_* = \mathbb{R}_+$ est plus grand que le cône tangent $\mathrm{T}_{x_*} X_{EI}^{=} = \{0\}$. Il est remarquable que l'optimalité au second ordre puisse être synthétisée au moyen de l'unique cône critique, alors que les deux problèmes précédents recouvrent des situations très différentes.

En un point stationnaire x_*, de multiplicateur λ_*, le cône critique en x_* s'écrit aussi

$$\begin{aligned} C_* &= \{d \in \mathbb{E} : c'_E(x_*) \cdot d = 0,\ c'_{I^0_*}(x_*) \cdot d \leqslant 0,\ f'(x_*) \cdot d = 0\}, && (4.44b)\\ &= \{d \in \mathbb{E} : c'_{E \cup I_*^{0+}}(x_*) \cdot d = 0,\ c'_{I_*^{00}}(x_*) \cdot d \leqslant 0\}, && (4.44c) \end{aligned}$$

où les ensembles d'indices I_*^{0+} et I_*^{00} ont été introduits en (4.39) et dépendent du multiplicateur λ_*. Ces expressions s'obtiennent en utilisant les conditions d'optimalité (4.32). Observons enfin que si les conditions de complémentarité stricte (4.35) sont satisfaites, le cône critique s'écrit simplement

$$C_* = \{d \in \mathbb{E} : c'_{E \cup I^0_*}(x_*) \cdot d = 0\}, \qquad (4.44d)$$

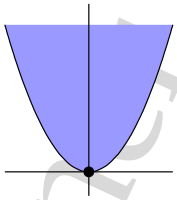
qui est donc le cône linéarisant $\mathrm{T}'_{x_*} X_{EI}^{=}$ (un sous-espace vectoriel). En l'absence de complémentarité stricte, le sous-espace vectoriel (4.44d) est contenu dans C_*, lui-même contenu dans $\mathrm{T}'_{x_*} X_{EI}$.

Trois exemples instructifs

Une autre difficulté dans l'établissement des conditions d'optimalité du second ordre du problème (P_{EI}) provient du fait que l'on doit prendre le multiplicateur optimal λ_* intervenant dans la hessienne du lagrangien $L_* := \nabla^2_{xx}\ell(x_*, \lambda_*)$ en fonction de la direction critique choisie. Autrement dit, la démonstration du théorème 4.21, fondée sur le développement du lagrangien $\ell(\cdot, \lambda_*)$ pour un multiplicateur λ_* fixé indépendamment de la direction critique, ne fonctionne pas pour une solution du problème (P_{EI}) ne vérifiant que la qualification de Mangasarian-Fromovitz (QC-MF) (voir l'exercice 4.21 pour les qualifications (QC-A) et (QC-IL), qui permettent d'utiliser cette technique). Trois exemples vont nous permettre de mieux comprendre pourquoi il en est ainsi et d'apprendre à sélectionner correctement les quantificateurs qui s'appliquent à $d \in C_*$ et $\lambda_* \in \Lambda_*$.

Considérons d'abord le problème à deux variables réelles

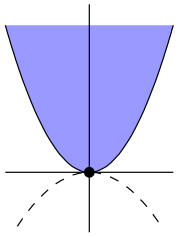
$$\begin{cases} \min\ x_2 \\ x_2 \geqslant x_1^2, \end{cases} \tag{4.45}$$



dont l'ensemble admissible est représenté à droite ci-dessus et dont la solution est $x_* = (0, 0)$. Il y a un unique multiplicateur optimal associé à la contrainte, valant $\lambda_* = 1$. La contrainte étant active, (x_*, λ_*) est aussi la solution primale-duale du problème avec contrainte d'égalité $x_2 = x_1^2$, si bien que la hessienne du lagrangien $L_* := \nabla^2_{xx}\ell(x_*, \lambda_*) = \mathrm{diag}(2, 0)$ doit être semi-définie positive dans l'espace tangent à la contrainte (corollaire 4.22) : $\langle L_* d, d\rangle \geqslant 0$ pour toute direction d dans $\{d \in \mathbb{R}^2 : d_2 = 0\}$. C'est le cas le plus simple qui peut se présenter. On dira plus tard que l'on a des *conditions d'optimalité du deuxième ordre fortes* : quel que soit le multiplicateur optimal (il n'y en a qu'un seul ici), L_* est semi-défini positif dans le cône critique. Ces conditions sont vérifiées s'il y a un unique multiplicateur (voir la proposition 4.42 pour une condition nécessaire et suffisante pour que cette propriété ait lieu), comme ici ou comme lorsque la qualification (QC-A) ou (QC-IL) a lieu (voir l'exercice 4.21).

Considérons à présent une variante du problème (4.45) où l'on ajoute une contrainte superflue

$$\begin{cases} \min\ x_2 \\ x_2 \geqslant x_1^2 \\ x_2 \geqslant -\frac{1}{2}x_1^2. \end{cases} \tag{4.46}$$

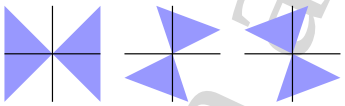


La seconde contrainte ne modifie pas la solution primale qui est toujours $x_* = (0, 0)$, mais il y a maintenant plusieurs multiplicateurs optimaux formant l'ensemble $\Lambda_* = \{\lambda \in \mathbb{R}^2_+ : \lambda_1 + \lambda_2 = 1\}$. En prenant comme multiplicateur $\lambda_* = (1, 0)$, un sommet de Λ_*, on ignore la seconde contrainte (comme il se doit) et on a le résultat précédent

sur la semi-définie positivité de $L_* = \mathrm{diag}(2,0)$ dans $\{d \in \mathbb{R}^2 : d_2 = 0\}$. Par contre, avec $\lambda_* = (0,1)$, l'autre sommet de Λ_*, la hessienne du lagrangien $L_* = \mathrm{diag}(-1,0)$ est définie *négative* dans $\{d \in \mathbb{R}^2 : d_2 = 0\}$. C'est normal ; le lagrangien ne voit que la seconde contrainte, ignorant la première, et $(0,0)$ n'est qu'un point stationnaire du problème $\min\{x_2 : x_2 \geqslant -\frac{1}{2}x_1^2\}$, pas un minimum local. On dira plus tard que l'on a des *conditions d'optimalité du deuxième ordre semi-fortes* : il existe un multiplicateur optimal tel que L_* est semi-défini positif dans le cône critique.

Considérons enfin le problème à trois variables

$$\begin{cases} \min\ x_3 \\ x_3 \geqslant (x_1+x_2)(x_1-x_2) \\ x_3 \geqslant (x_2+3x_1)(2x_2-x_1) \\ x_3 \geqslant (2x_2+x_1)(x_2-3x_1). \end{cases} \qquad (4.47)$$



Les trois figures à droite représentent, pour chacune des trois contraintes, les coordonnées (x_1, x_2) qui donnent une valeur positive à leur membre de droite. On voit que, quel que soit (x_1, x_2) non nul, un des membres de droite des contraintes est strictement positif. Dès lors, l'unique solution de ce problème est $x_* = 0$. D'autre part, l'ensemble des multiplicateurs optimaux est le simplexe unité $\Lambda_* = \{\lambda \in \mathbb{R}^3_+ : \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = 1\}$. Enfin, la hessienne du lagrangien s'écrit

$$L(x,\lambda) = \begin{pmatrix} 2\lambda_1 - 6(\lambda_2+\lambda_3) & 5(\lambda_2-\lambda_3) & 0 \\ 5(\lambda_2-\lambda_3) & -2\lambda_1 + 4(\lambda_2+\lambda_3) & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Quelle que soit la valeur de $\lambda_* \in \Lambda_*$, L_* n'est pas semi-définie positive sur le cône critique, qui est ici le sous-espace $\{d \in \mathbb{R}^3 : d_3 = 0\}$ (en effet, l'élément $(1,1)$ vaut $8\lambda_1 - 6$ et l'élément (2,2) vaut $4 - 6\lambda_1$, si bien qu'il faudrait que λ_1 soit supérieur à $3/4$ et inférieur à $2/3$). On dira plus tard que l'on a des *conditions d'optimalité du deuxième ordre faibles* : pour toute direction critique d, il existe un multiplicateur optimal λ_* (dépendant de d) tel que $\langle L_* d, d\rangle \geqslant 0$.

Conditions nécessaires du second ordre

Le théorème 4.46 ci-dessous énonce des conditions nécessaires d'optimalité du deuxième ordre en supposant que les conditions de qualification de Mangasarian-Fromovitz (QC-MF) ont lieu, ce qui n'est pas très restrictif (proposition 4.41).

Ce résultat se fonde sur l'examen de l'allure du critère f le long de chemins $t \mapsto \xi(t)$ émanant en $t = 0$ de la solution considérée x_* et restant dans l'ensemble admissible X_{EI} pour de petites valeurs *positives* du paramètre t. Plus on considère de tels chemins, plus on aura d'information. La démarche était la même dans le cas où il n'y avait que des contraintes d'égalité, mais il s'est avéré que tous les chemins ayant la même tangente à l'origine donnaient la même information au deuxième ordre (on utilisait en fait que des suites associées à de telles directions tangentes). Dans le cas où l'on a des contraintes d'inégalité, pour une direction tangente $d \in \mathrm{T}_{x_*} X_{EI}$, il va falloir distinguer les chemins ayant $d = \xi'(0)$ comme tangente à l'origine, mais ayant des courbures $h = \xi''(0)$ différentes. Tangence et courbure doivent vérifier des relations de compatibilité de manière à ce que le chemin rentre dans l'ensemble admissible. On cherche donc des chemins $t \mapsto \xi(t)$ tels que

$$\xi(0) = x_*, \quad \xi'(0) = d, \quad \xi''(0) = h, \quad \xi(t) \in X_{EI}, \text{ pour } t \geqslant 0 \text{ petit.} \tag{4.48}$$

Voyons quelles sont les conditions que doivent vérifier d et h pour que l'on puisse en effet construire un chemin vérifiant (4.48). Des conditions nécessaires sont aisées à obtenir, le lemme 4.45 montrera qu'elles sont presque suffisantes.

L'application ξ doit vérifier $c_E(\xi(t)) = 0$, pour tout $t > 0$ petit. En dérivant par rapport à t en $t = 0$, on voit qu'il faut que $c'_E(x_*)\cdot d = 0$. Si l'on suppose leur continuité, les contraintes d'inégalité inactives en x_* le resteront pour de petites valeurs de $t > 0$. En ce qui concerne les contraintes d'inégalité actives en x_*, on doit avoir pour $t > 0$ petit :

$$0 \geqslant c_{I_*^0}(\xi(t)) = c_{I_*^0}(x_*) + t\, c'_{I_*^0}(x_*) \cdot d + o(t).$$

Comme $c_{I_*^0}(x_*) = 0$, un passage à la limite lorsque $t \downarrow 0$ après division par $t > 0$ donne $c'_{I_*^0}(x_*) \cdot d \leqslant 0$. En résumé, l'analyse au premier ordre montre qu'il faut que d appartienne au cône tangent $\mathrm{T}_{x_*} X_{EI}$ (sous l'hypothèse de qualification (QC-MF), voir la proposition 4.27). C'est la seule condition qui portera sur d.

En dérivant deux fois $c_E(\xi(t)) = 0$ par rapport à t en $t = 0$ (ce qui demandera d'avoir un chemin deux fois dérivable en $t = 0$), on voit que l'on doit avoir

$$c''_E(x_*) \cdot d^2 + c'_E(x_*) \cdot h = 0. \tag{4.49}$$

C'est la première condition sur h. Pour les indices $i \in I_*^0$ des contraintes d'inégalité actives, en utilisant le fait que $c_i(x_*) = 0$ et $c'_i(x_*) \cdot d \leqslant 0$, on obtient

$$\begin{aligned} c_i(\xi(t)) &= c_i(x_*) + t c'_i(x_*) \cdot d + \frac{t^2}{2}\left(c''_i(x_*) \cdot d^2 + c'_i(x_*) \cdot h\right) + o(t^2) \\ &\leqslant \frac{t^2}{2}\left(c''_i(x_*) \cdot d^2 + c'_i(x_*) \cdot h\right) + o(t^2). \end{aligned}$$

Pour que cette quantité soit négative pour $t > 0$ petit, on va demander la stricte négativité des termes entre parenthèses en se donnant $\epsilon > 0$ et en imposant

$$c''_{I_*^0}(x_*) \cdot d^2 + c'_{I_*^0}(x_*) \cdot h + \epsilon \leqslant 0. \tag{4.50}$$

C'est la deuxième condition sur h. Notons que, lorsque les conditions de qualification de Mangasarian-Fromovitz (QC-MF) ont lieu, on peut toujours trouver un h vérifiant (4.49) et (4.50) (proposition 4.40).

Lemme 4.45 (existence d'un chemin admissible sous (QC-MF)) *Soit $x_* \in X_{EI}$. On suppose que c_E est C^2 dans un voisinage de x_*, que $c_{I_*^0}$ est deux fois dérivable en x_* et que $c_{I\setminus I_*^0}$ est continue en x_*. On se donne $d \in \mathrm{T}_{x_*} X_{EI}$. On suppose également que les conditions de Mangasarian-Fromovitz (QC-MF) ont lieu en x_* et donc que pour $\epsilon > 0$ donné, on peut trouver $h \in \mathbb{E}$ vérifiant (4.49) et (4.50). Alors il existe un chemin $t \mapsto \xi(t)$ de classe C^2, défini pour $|t|$ suffisamment petit, tel que l'on ait (4.48).*

Démonstration. La technique de démonstration est semblable à celle utilisée dans la démonstration de la proposition 4.14. Soit $A_E = c'_E(x_*)$ la jacobienne de c_E en x_*. Celle-ci étant surjective, on peut trouver une matrice Z, $(n - m_E) \times n$, telle que

$\begin{pmatrix} A_E \\ Z \end{pmatrix}$ soit inversible.

Pour $d \in \mathrm{T}_{x_*} X_{EI}$ et $h \in \mathbb{E}$ donnés dans l'énoncé, on considère la fonction $F : \mathbb{E}\times\mathbb{R} \to \mathbb{R}^n$ définie par

$$F(\xi, t) = \begin{pmatrix} c_E(\xi) \\ Z(\xi - x_* - td - \frac{t^2}{2}h) \end{pmatrix}.$$

Elle est C^2 dans un voisinage de $(x_*, 0)$, $F(x_*, 0) = 0$ et $F'_\xi(x_*, 0)$ est inversible. Par le théorème des fonctions implicites (théorème C.14), il existe alors une fonction $t \mapsto \xi(t)$, définie pour $|t|$ petit, de classe C^2, telle que $F(\xi(t), t) = 0$ pour tout $|t|$ petit et $\xi(0) = x_*$. En dérivant une première fois $F(\xi(t), t) = 0$ en $t = 0$, on trouve

$$\begin{pmatrix} A_E \\ Z \end{pmatrix} \xi'(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ Zd \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_E \\ Z \end{pmatrix} d,$$

car $A_E d = 0$. Donc $\xi'(0) = d$. En dérivant deux fois $F(\xi(t), t) = 0$ en $t = 0$, on trouve

$$\begin{pmatrix} A_E \\ Z \end{pmatrix} \xi''(0) = \begin{pmatrix} -c''_E(x_*) \cdot d^2 \\ Zh \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_E \\ Z \end{pmatrix} h,$$

par (4.49). Donc $\xi''(0) = h$. Enfin, $\xi(t) \in X_{EI}$ pour $t \geqslant 0$ petit, grâce au choix de h vérifiant (4.49) et (4.50). □

Théorème 4.46 (CN2) *Soit x_* une solution locale de (P_{EI}). Supposons que f et c_E soient C^2 dans un voisinage de x_*, que $c_{I^0_*}$ soit deux fois dérivable en x_* et que $c_{I\setminus I^0_*}$ soit continue en x_*. Supposons également que les conditions de qualification de Mangasarian-Fromovitz (QC-MF) aient lieu en x_*. Alors*

$$\forall\, d \in C_* : \quad \max_{\lambda_* \in \Lambda_*} \langle L_* d, d\rangle \geqslant 0. \tag{4.51}$$

Démonstration. Soit $d \in C_* \subseteq \mathrm{T}_{x_*} X_{EI}$. Pour chaque choix de $h \in \mathbb{E}$ vérifiant (4.49) et (4.50), on a un chemin $t \mapsto \xi(t)$ de classe C^2 satisfaisant (4.48). Voyons comment choisir h. Un développement de $t \mapsto f(\xi(t))$ au deuxième ordre donne

$$f(\xi(t)) = f(x_*) + tf'(x_*) \cdot d + \frac{t^2}{2}\left(f''(x_*) \cdot d^2 + f'(x_*) \cdot h\right) + o(t^2).$$

Par optimalité $f(\xi(t)) \geqslant f(x_*)$, pour $t \geqslant 0$ petit (car alors $\xi(t) \in X_{EI}$), et $f'(x_*)\cdot d \leqslant 0$ (car $d \in C_*$). Dès lors

$$0 \leqslant \frac{t^2}{2}\left(f''(x_*) \cdot d^2 + f'(x_*) \cdot h\right) + o(t^2). \tag{4.52}$$

Pour obtenir le plus d'informations possible, on a avantage à trouver un h minimisant les termes entre parenthèses.

Ceci nous conduit à considérer le problème linéaire en $h \in \mathbb{E}$ suivant

$$\left\{\begin{array}{l} \min\Big(f'(x_*)\cdot h + f''(x_*)\cdot d^2\Big) \\ c_i'(x_*)\cdot h + c_i''(x_*)\cdot d^2 = 0, \quad \text{pour } i\in E \\ c_i'(x_*)\cdot h + c_i''(x_*)\cdot d^2 + \epsilon \leqslant 0, \quad \text{pour } i\in I_*^0. \end{array}\right. \tag{4.53}$$

Il est réalisable (son ensemble admissible est non vide) grâce à la qualification de Mangasarian-Fromovitz (proposition 4.40). Son dual est le problème linéaire en $\lambda \in \mathbb{R}^m$ suivant

$$\left\{\begin{array}{l} \max\Big(\langle L(x_*,\lambda)d, d\rangle + \epsilon\|\lambda_I\|_1\Big) \\ \nabla_x \ell(x_*,\lambda) = 0 \\ \lambda_{I_*^0} \geqslant 0 \\ \lambda_{I\setminus I_*^0} = 0, \end{array}\right.$$

dont l'ensemble admissible est Λ_*, également non vide par les conditions de Mangasarian-Fromovitz. D'après le théorème 15.11 de dualité forte, ces deux problèmes ont alors une solution et il n'y a pas de saut de dualité : si h est une solution de (4.53),

$$f'(x_*)\cdot h + f''(x_*)\cdot d^2 = \max_{\lambda_*\in\Lambda_*}\Big(\langle L_* d, d\rangle + \epsilon\|(\lambda_*)_I\|_1\Big). \tag{4.54}$$

On peut à présent conclure. Introduisons la suite $\{x_k\}$ définie par $x_k = \xi(t_k)$, avec $t_k \downarrow 0$. Par construction, $x_k \in X_{EI}$ pour k assez grand. D'autre part, par (4.52) et (4.54), on a

$$0 \leqslant \frac{t_k^2}{2}\Big(\max_{\lambda_*\in\Lambda_*} \langle L_* d, d\rangle + \epsilon\|(\lambda_*)_I\|_1\Big) + o(t_k^2).$$

En passant à la limite lorsque $t_k \downarrow 0$, après avoir diviser par t_k^2, on obtient

$$0 \leqslant \max_{\lambda_*\in\Lambda_*}\Big(\langle L_* d, d\rangle + \epsilon\|(\lambda_*)_I\|_1\Big).$$

Comme $\epsilon > 0$ est arbitraire et que Λ_* est borné (proposition 4.43), on obtient le résultat. □

Sous (QC-MF), Λ_* est compact, si bien que la condition (4.51) s'écrit aussi

$$\forall\, d\in C_*,\ \exists\,\lambda_*\in\Lambda_* : \quad \langle L_* d, d\rangle \geqslant 0. \tag{4.55}$$

On dit alors que l'on a des *conditions nécessaires d'optimalité du second ordre faibles*. Elles sont vérifiées sous les conditions du théorème 4.46. C'est donc le cas dans l'exemple 4.47. Si l'on a les conditions plus fortes suivantes

$$\exists\,\lambda_*\in\Lambda_*,\ \forall\, d\in C_* : \quad \langle L_* d, d\rangle \geqslant 0, \tag{4.56}$$

on dit que l'on a des *conditions nécessaires d'optimalité du second ordre semi-fortes*. Elles sont vérifiées dans l'exemple 4.46. Si l'on a les conditions encore plus fortes suivantes

$$\forall\,\lambda_*\in\Lambda_*,\ \forall\, d\in C_* : \quad \langle L_* d, d\rangle \geqslant 0, \tag{4.57}$$

on dit que l'on a des *conditions nécessaires d'optimalité du second ordre fortes*. Elles sont vérifiées dans l'exemple 4.45. Ces dernières conditions sont vérifiées s'il y a un unique multiplicateur, par exemple lorsque (QC-IL) a lieu ou lorsque les conditions

de la proposition 4.42 s'appliquent. Il est montré à l'exercice 4.21, que ces conditions fortes ont aussi lieu sous l'hypothèse de qualification (QC-A).

La vérification numérique des conditions nécessaires d'optimalité du second ordre n'est pas aisée. Déjà, lorsque les conditions semi-fortes (4.56) ont lieu pour un multiplicateur optimal λ_*, il s'agit de vérifier que la forme quadratique $d \mapsto \langle L_* d, d\rangle$ associée à la hessienne du lagrangien est semi-définie positive sur le cône C_*, qui est polyédrique, c'est-à-dire que L_* est C_*-*copositive* [303, 41, 296]. En toute généralité, une telle vérification est un problème NP-ardu [409, 156]. Maintenant, s'il y a aussi complémentarité stricte, le cône critique devient le sous-espace vectoriel (4.44d) et la vérification de la semi-définie positivité de $d \mapsto \langle L_* d, d\rangle$ sur ce sous-espace est alors une opération simple d'algèbre linéaire.

Conditions suffisantes du second ordre

La proposition suivante donne des conditions suffisantes d'optimalité du second ordre pour le problème (P_{EI}). On notera qu'elles ne font pas intervenir d'hypothèse de qualification de contrainte. Le fait que le cône critique intervienne aussi dans ces conditions suffisantes d'optimalité est une garantie de sa pertinence. Une solution x_* vérifiant ces conditions est appelé un *minimum faible* du problème (P_{EI}). L'inégalité (4.60) est connue sous le nom de *propriété de croissance quadratique*. Elle montre que f croît au moins quadratiquement lorsque'on se déplace de x_* vers l'« intérieur » de X_{EI}.

Théorème 4.47 (CS2) *Supposons que f et $c_{E\cup I_*^0}$ soient dérivables dans un voisinage d'un point $x_* \in \mathbb{E}$ et deux fois dérivables en x_*. Supposons également que l'ensemble Λ_* des multiplicateurs λ_* tels que (x_*, λ_*) vérifie les conditions d'optimalité de KKT (4.32) ne soit pas vide. Supposons enfin que*

$$\forall d \in C_* \setminus \{0\},\ \exists\, \lambda_* \in \Lambda_* : \quad \langle L_* d, d\rangle > 0, \tag{4.58}$$

ou de manière équivalente ($\|\cdot\|$ est une norme arbitraire)

$$\exists\, \bar\gamma > 0,\ \forall d \in C_*,\ \exists\, \lambda_* \in \Lambda_* : \quad \langle L_* d, d\rangle \geqslant \bar\gamma \|d\|^2. \tag{4.59}$$

Alors, pour tout $\gamma \in [0, \bar\gamma[$, il existe un voisinage V de x_* tel que pour tout $x \in X_{EI} \cap V$, différent de x_* :

$$f(x) > f(x_*) + \frac{\gamma}{2}\|x - x_*\|^2. \tag{4.60}$$

En particulier, x_* est un minimum local strict de (P_{EI}).

Démonstration. Montrons d'abord que (4.58) et (4.59) sont équivalentes. Il est clair que (4.59) implique (4.58). Inversement, supposons que l'on ait (4.58), mais pas (4.59). Alors il existerait une suite $\{d_k\} \subseteq C_*$ telle que $\|d_k\| = 1$ et $\sup_{\lambda\in\Lambda_*} \langle L(x_*, \lambda) d_k, d_k\rangle \downarrow 0$. On pourrait extraire une sous-suite $d_k \to d \in C_* \setminus \{0\}$, car C_* est fermé. Si l'on note λ_* le multiplicateur associé à d par (4.58), on voit que cela conduirait à une contradiction :

$$0 \leftarrow \sup_{\lambda \in \Lambda_*} \langle L(x_*, \lambda) d_k, d_k \rangle \geqslant \langle L_* d_k, d_k \rangle \to \langle L_* d, d \rangle > 0.$$

Pour la suite, on raisonne à nouveau par l'absurde. Si le résultat n'est pas vrai, on peut trouver un $\gamma \in [0, \bar{\gamma}[$ et une suite $\{x_k\} \subseteq X_{EI}$ telle que $x_k \to x_*$, $x_k \neq x_*$ et $f(x_k) \leqslant f(x_*) + \frac{\gamma}{2}\|x_k - x_*\|^2$. En extrayant une sous-suite au besoin, on peut supposer qu'avec $t_k := \|x_k - x_*\|$, on a

$$\frac{x_k - x_*}{t_k} \to d.$$

Donc $d \in \mathrm{T}_{x_*} X_{EI} \setminus \{0\}$. D'autre part, de $f(x_*) + \frac{\gamma}{2}\|x_k - x_*\|^2 \geqslant f(x_k) = f(x_*) + f'(x_*) \cdot (x_k - x_*) + o(\|x_k - x_*\|)$, on déduit $f'(x_*) \cdot d \leqslant 0$ et donc $d \in C_* \setminus \{0\}$.

Il reste à exhiber une contradiction, ce que l'on obtient en développant le lagrangien $\ell(\cdot, \lambda_*)$, où λ_* est le multiplicateur associé à d par (4.59) :

$$\ell(x_k, \lambda_*) = \ell(x_*, \lambda_*) + \frac{1}{2}\ell''_{xx}(x_*, \lambda_*) \cdot (x_k - x_*)^2 + o(\|x_k - x_*\|^2).$$

On a $\ell(x_*, \lambda_*) = f(x_*)$ et $\ell(x_k, \lambda_*) \leqslant f(x_k) \leqslant f(x_*) + \frac{\gamma}{2}\|x_k - x_*\|^2$. Donc

$$\frac{\gamma}{2}\|x_k - x_*\|^2 \geqslant \frac{1}{2}\langle L_*(x_k - x_*), x_k - x_* \rangle + o(\|x_k - x_*\|^2).$$

En divisant par t_k^2 et en passant à la limite, on trouve

$$\langle L_* d, d \rangle \leqslant \gamma \|d\|^2,$$

ce qui contredit (4.59), puisque $\gamma < \bar{\gamma}$ et $d \in C_* \setminus \{0\}$. □

Le résultat de la proposition 4.47 reste vrai si dans (4.58), λ_* peut être pris indépendamment de d :

$$\exists \lambda_* \in \Lambda_*, \ \forall d \in C_* \setminus \{0\} \ : \quad \langle L_* d, d \rangle > 0. \tag{4.61}$$

On dit alors que des *conditions suffisantes d'optimalité du second ordre semi-fortes* ont lieu. Le résultat reste *a fortiori* vrai si λ_* peut être pris arbitraire :

$$\forall \lambda_* \in \Lambda_*, \ \forall d \in C_* \setminus \{0\} \ : \quad \langle L_* d, d \rangle > 0. \tag{4.62}$$

On parle alors de *conditions suffisantes d'optimalité du second ordre fortes*. On peut montrer que si dans la proposition 4.47 on remplace (4.58) par (4.62), si les conditions de qualification (QC-MF) ont lieu et si les fonctions f et c sont un peu plus régulières, il n'y a pas d'autre point stationnaire que x_* dans un voisinage de x_* : c'est un point stationnaire isolé (voir l'exercice 4.20).

4.4.5 Calcul pratique des solutions de (P_{EI})

La proposition 4.30 nous dit que, sous certaines conditions, en particulier de qualification des contraintes, une solution locale de (P_{EI}) est un point stationnaire de ce problème, ce qui veut dire qu'elle vérifie l'ensemble des relations de (4.32). Pour calculer les solutions de (P_{EI}), on pourra donc, dans un premier temps, calculer les

solutions du système d'optimalité (4.32). Toutefois, ce calcul est beaucoup plus difficile que lorsqu'il n'y a que des contraintes d'égalité. La difficulté vient de la présence d'inégalités et, en particulier, des conditions de complémentarité. Comme nous allons le voir, nous y retrouverons la *combinatoire des problèmes d'optimisation avec contraintes d'inégalité*, confirmant ainsi le *principe de conservation des ennuis* dont nous avons parlé dans l'introduction de la section 4.4.

En général, il faut utiliser des algorithmes spécifiques pour résoudre ce système d'optimalité (c'est ce à quoi est consacré une grande partie de cet ouvrage !). Dans certains cas, cependant, en particulier pour des problèmes de petite taille ayant peu de contraintes d'inégalité ou des problèmes structurés, on pourra chercher les solutions analytiquement en considérant l'une après l'autre toutes les manières de satisfaire les contraintes d'inégalité. Ainsi, dans chaque cas considéré, on suppose qu'un certain nombre de contraintes d'inégalité sont actives et que les autres ne le sont pas. Soit $J \subseteq I$, l'ensemble des indices des contraintes d'inégalité supposées actives en la solution : $c_{E\cup J}(x_*) = 0$ et $c_{J^c}(x_*) < 0$ (on a noté $J^c = I \setminus J$). Du fait de la complémentarité, $(\lambda_*)_{J^c} = 0$ et on est donc conduit à chercher les solutions du système de $n + |E \cup J|$ équations à $n + |E \cup J|$ inconnues suivant

$$\begin{cases} \nabla f(x_*) + c'_{E\cup J}(x_*)^*(\lambda_*)_{E\cup J} = 0 \\ c_{E\cup J}(x_*) = 0. \end{cases}$$

Si une solution $(x_*, (\lambda_*)_{E\cup J})$ de ce système vérifie $c_{J^c}(x_*) < 0$ et $(\lambda_*)_J \geqslant 0$, on satisfait les hypothèses du cas considéré et $(x_*, ((\lambda_*)_{E\cup J}, 0_{J^c}))$ est une solution de (4.32). Sinon cette solution doit être écartée. En examinant ainsi tous les ensembles $J \subseteq I$ possibles, on peut trouver tous les points stationnaires du problème.

La méthode présentée ci-dessus est fastidieuse et n'est utilisée que dans de rares cas. On notera en effet qu'avec m_I contraintes d'inégalité, il y a 2^{m_I} cas à examiner, et donc 2^{m_I} systèmes non linéaires à résoudre. C'est une tâche considérable dès que m_I dépasse quelques unités ! C'est ici que l'on retrouve la *combinatoire des problèmes d'optimisation*. Le but des algorithmes d'optimisation pour problèmes avec contraintes d'inégalité est précisément de trouver des solutions du système d'optimalité (4.32), en gérant de manière efficace cette combinatoire, c'est-à-dire en évitant d'explorer toutes les possibilités. L'algorithme du simplexe (voir le chapitre 15) en a été un des premiers exemples.

On notera aussi que, si le calcul de points stationnaires est une tâche difficile, potentiellement NP-ardue, la *vérification* de la stationnarité d'un point $x_* \in \mathbb{E}$ est beaucoup plus simple. Il suffit en effet de voir si l'on peut trouver un multiplicateur $\lambda_* \in \mathbb{R}^m$ tel que

$$\nabla f(x_*) + c'_{E\cup I^0_*}(x_*)^*(\lambda_*)_{E\cup I^0_*} = 0 \qquad \text{et} \qquad (\lambda_*)_{I^0_*} \geqslant 0, \tag{4.63}$$

où l'on a noté comme d'habitude $I^0_* := \{i \in I : c_i(x_*) = 0\}$. Ce système est linéaire en λ_* (avec des inégalités toutefois) et l'on peut vérifier s'il a une solution par l'optimisation linéaire (en adaptant le problème (15.20) à la situation présente si l'on a besoin de démarrer un algorithme de résolution en un point admissible). Si le système linéaire (4.63) en λ_* n'a pas de solution, soit x_* n'est pas stationnaire, soit les contraintes ne sont pas qualifiées en x_*.

Comme pour les problèmes d'optimisation sans contrainte ou avec contraintes d'égalité, tous les points stationnaires (les solutions de (4.32)) ne sont pas solutions

de (P_{EI}). Pour déterminer si un point stationnaire est solution de (P_{EI}), on pourra utiliser les conditions d'optimalité du second ordre, de la manière suivante :

- si (4.51) n'est pas vérifiée au point stationnaire, alors celui-ci n'est pas une solution locale de (P_{EI}) (ou une autre hypothèse du théorème 4.46 n'est pas vérifiée) ;
- si (4.58) est vérifiée au point stationnaire (ainsi que les autres hypothèses du théorème 4.47), alors celui-ci est un minimum local strict de (P_{EI}).

Ces deux cas recouvrent un grand nombre de situations, mais pas toutes, car les conditions (4.51) et (4.58) ne sont pas identiques. Le cas est indéterminé lorsqu'un point stationnaire vérifie (4.51), mais pas (4.58). Alors les résultats donnés ci-dessus ne sont pas suffisants et il faudra recourir à des conditions d'optimalité d'ordre supérieur pour pouvoir dire si le point stationnaire est solution de (P_{EI}).

4.5 Problème avec contraintes générales

Voir le syllabus complet.

4.6 Analyse de sensibilité

Dans cette section, nous donnons un certain nombre de résultats concernant la sensibilité des grandeurs optimales du problème (P_{EI}) par rapport à des perturbations. On note X l'ensemble admissible de ce problème. On suppose une perturbation linéaire des contraintes : on se donne un vecteur $p = (p_i)_{i \in E \cup I} \in \mathbb{R}^m$ et on considère le problème perturbé

$$(P_{EI}^p) \quad \begin{cases} \min f(x) \\ c_E(x) + p_E = 0 \\ c_I(x) + p_I \leqslant 0. \end{cases}$$

On note X^p l'ensemble admissible de (P_{EI}^p) et X_*^p son ensemble de solutions.

Ce cadre est assez général. Par exemple, on ne gagne rien en généralité en considérant une perturbation non linéaire du type

$$\begin{cases} \min \tilde{f}(x,p) \\ \tilde{c}_E(x,p) = 0 \\ \tilde{c}_I(x,p) \leqslant 0, \end{cases}$$

(on suppose que $\tilde{f}(\cdot,0) \equiv f(\cdot)$, $\tilde{c}_E(\cdot,0) \equiv c_E(\cdot)$ et $\tilde{c}_I(\cdot,0) \equiv c_I(\cdot)$) puisque celle-ci peut être obtenue à partir d'une perturbation linéaire d'une autre formulation de (P_{EI}), comme ci-dessous :

$$\begin{cases} \min \tilde{f}(x,y) \\ \tilde{c}_E(x,y) = 0 \\ \tilde{c}_I(x,y) \leqslant 0 \\ y = 0 \end{cases} \longrightarrow \begin{cases} \min \tilde{f}(x,y) \\ \tilde{c}_E(x,y) = 0 \\ \tilde{c}_I(x,y) \leqslant 0 \\ y = p. \end{cases}$$

Définition 4.48 On appelle *fonction valeur* associée au problème perturbé (P^p_{EI}), la fonction $v : p \in \mathbb{R}^m \to \overline{\mathbb{R}}$ définie par

$$v(p) = \inf_{x \in X^p} f(x), \tag{4.64}$$

où X^p est l'ensemble admissible de (P^p_{EI}) :

$$X^p := \{x \in \mathbb{E} : c_E(x) + p_E = 0,\ c_I(x) + p_I \leqslant 0\}.$$

□

La fonction valeur décrit donc comment varie la valeur optimale du critère lorsque p varie. Elle jouera à nouveau un rôle dans la théorie de la dualité (chapitre 13). Cette fonction peut prendre la valeur $-\infty$ (problème (P^p_{EI}) non borné) ou $+\infty$ (par convention si l'ensemble admissible $X^p = \varnothing$). Observons que la fonction valeur est aussi la fonction marginale de la fonction $\varphi : \mathbb{R}^m \times \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$, définie en $(p, x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{E}$ par

$$\varphi(p, x) = f(x) + \mathcal{I}_{X^p}(x), \tag{4.65}$$

où $\mathcal{I}_{X^p}$ désigne l'indicatrice de X^p.

Nous commencerons par établir deux résultats simples qui donnent une signification précieuse des multiplicateurs de Lagrange, objets pour l'instant relativement abstraits qui semblent ne servir qu'à l'écriture des conditions d'optimalité (section 4.6.1). Nous montrons ensuite comment on peut introduire des chemins à valeurs dans X^{tp}, dont on contrôle soit la pente initiale soit la pente et la courbure initiales (section 4.6.2). Ceux-ci sont alors utilisés pour montrer la continuité directionnelle de la fonction valeur (section 4.6.3). Ces chemins sont aussi utiles pour étudier le comportement des suites convergentes de solutions des problèmes perturbés (section 4.6.4).

4.6.1 Interprétation marginaliste des multiplicateurs optimaux

Cette section rassemble des résultats donnant du sens aux multiplicateurs de Lagrange ou de Karush, Kuhn et Tucker. Le premier (proposition 4.49) est donné sous des hypothèses un peu fortes qui portent sur la régularité de la solution primale-duale de (P^p_{EI}), qui est supposée dépendre univoquement de p. Le second résultat (proposition 4.53) ne suppose ni la régularité des fonctions f et c, ni l'unicité des solutions primales-duales ; le plus souvent, cependant, il requiert la convexité du problème (P_{EI}).

Dans certaines circonstances de régularité que nous allons préciser, le multiplicateur de Lagrange λ_* du problème d'optimisation (P_{EI}) s'interprète comme le gradient de la fonction valeur en $p = 0$. Autrement dit, $(\lambda_*)_i$ donne la variation de la valeur *optimale* de la fonction coût lorsqu'on perturbe la i-ième contrainte tout en gardant les autres contraintes. Ceci est illustré à la figure 4.6, pour un ensemble admissible défini par deux contraintes d'inégalité : $X = \{x \in \mathbb{R}^2 : c_1(x) \leqslant 0,\ c_2(x) \leqslant 0\}$. Pour une perturbation de la première contrainte $p = (p_1, 0)$, la solution de (P^p_{EI}) pourraît y évoluer comme la courbe en tirets $p \mapsto \bar{x}(p)$ (ici non différentiable). Nous allons voir que les multiplicateurs optimaux donnent la variation au premier ordre du coût f le long de cette courbe en $p = 0$.

Le cas où $(\lambda_*)_i = 0$ est éclairant. Il peut se produire :

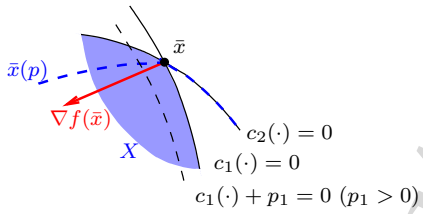


Fig. 4.6. Interpretation marginaliste des multiplicateurs optimaux

- si la contrainte est inactive : on savait déjà qu'alors le multiplicateur correspondant est nul et on comprend bien qu'une petite perturbation de la contrainte n'aura d'incidence ni sur la solution, ni sur la valeur optimale du critère ;
- si la contrainte est active (absence de complémentarité stricte) : ici aussi, on savait que l'on pouvait éliminer la contrainte sans remettre en cause l'optimalité au premier ordre de la solution (le couple (x_*, λ_*) reste solution du système d'optimalité (4.32) modifié) et on apprend avec le résultat ci-dessous que, bien que la solution du problème puisse être affectée par une perturbation de la i-ième contrainte, la valeur optimale du critère ne varie pas *au premier ordre*.

Cette interprétation du multiplicateur optimal est importante pour les applications.

Proposition 4.49 *Supposons que le problème* (P_{EI}) *ait une solution primale-duale unique* (x_*, λ_*) *et que* f *et* c *soient différentiables en* x_*. *On considère le problème perturbé* (P^p_{EI}) *avec* $p = (0, \dots, 0, p_i, 0, \dots, 0)$, *pour un indice* $i \in E \cup I$, *et on suppose que pour tout* p_i *voisin de* 0, (P^p_{EI}) *a une solution primale-duale unique* $(\bar{x}(p_i), \bar{\lambda}(p_i))$ *telle que* $p_i \mapsto \bar{x}(p_i)$ *soit différentiable en* 0, $p_i \mapsto \bar{\lambda}(p_i)$ *soit continue en* 0, $\bar{x}(0) = x_*$ *et* $\bar{\lambda}(0) = \lambda_*$. *Alors,*

$$(f \circ \bar{x})'(0) = (\lambda_*)_i.$$

Démonstration. On note comme d'habitude $\ell(x, \lambda) = f(x) + \lambda^\mathsf{T} c(x)$ le lagrangien du problème non perturbé (P_{EI}) et on note $p = (0, \dots, 0, p_i, 0, \dots, 0)$ la perturbation des contraintes considérée. En se rappelant que $(\lambda_*)_j = 0$ si $j \in I \setminus I^{0+}_*$, on a

$$\ell(\bar{x}(p_i), \lambda_*) = f(\bar{x}(p_i)) + \sum_{j \in E \cup I^{0+}_*} (\lambda_*)_j c_j(\bar{x}(p_i)).$$

Si $j \in E$, on a $c_j(\bar{x}(p_i)) = -p_j$. Si $j \in I^{0+}_*$, $(\lambda_*)_j > 0$ et par continuité, $(\bar{\lambda}(p_i))_j > 0$ pour une petite perturbation p_i, si bien que par complémentarité on a aussi $c_j(\bar{x}(p_i)) = -p_j$. Dès lors

$$\ell(\bar{x}(p_i), \lambda_*) = f(\bar{x}(p_i)) - \sum_{j \in E \cup I^{0+}_*} (\lambda_*)_j p_j = f(\bar{x}(p_i)) - \lambda_*^\mathsf{T} p.$$

puisque $(\lambda_*)_j = 0$ si $j \notin E \cup I^{0+}_*$. En utilisant le fait que $\nabla_x \ell(x_*, \lambda_*) = 0$, on obtient

$$(f \circ \bar{x})'(0) = \nabla_x \ell(x_*, \lambda_*)^\mathsf{T} \bar{x}'(0) + (\lambda_*)_i = (\lambda_*)_i. \qquad \square$$

En général, les solutions de (P^p_{EI}) ne peuvent pas s'exprimer comme fonction univoque régulière du paramètre de perturbation p et la fonction valeur (4.64) peut ne pas être différentiable en $p = 0$. Nous clarifions ci-dessous le lien entre les multiplicateurs optimaux et la fonciton valeur qui ne suppose pas la différentiabilité des fonctions définissant (P_{EI}), mais qui a besoin de la convexité de la fonction valeur. Cette convexité est assurée si le problème est convexe (proposition 4.52), mais peut l'être pour d'autres raisons. Dans ce cas, nous démontrons à la proposition 4.53 le résultat apothéotique selon lequel l'ensemble des multiplicateurs optimaux n'est autre que $\partial v(0)$, le sous-différentiel de la fonction valeur en zéro. Cette belle identité justifierait à elle seule l'introduction de la notion de sous-différentiel.

Pour y arriver, il nous faut d'abord redéfinir ce que l'on entend par multiplicateur optimal (de Lagrange ou de KKT) si l'on ne suppose pas que les fonctions f et c sont différentiables. Les multiplicateurs optimaux ont en effet été jusqu'à présent définis comme formant le vecteur λ_* permettant d'écrire les conditions d'optimalité de Karush, Kuhn et Tucker (4.32), dans lesquelles les dérivées des fonctions f et c interviennent (dans le gradient du lagrangien essentiellement). Il sera utile d'introduire l'ensemble

$$\Lambda := \{\lambda \in \mathbb{R}^m : \lambda_I \geqslant 0\}$$

dans lequel les mutiplicateurs optimaux résident. Le concept qui va nous permettre ici de nous libérer du besoin de différentiabilité de f et c est celui de point-selle (définition 3.73) du lagrangien ℓ de (P_{EI}) sur $\Omega \times \Lambda$, où Ω est une partie de $\mathbb{E}$, c'est-à-dire de couple $(x_*, \lambda_*) \in \Omega \times \Lambda$ tel que

$$\forall\, (x, \lambda) \in \Omega \times \Lambda : \quad \ell(x_*, \lambda) \leqslant \ell(x_*, \lambda_*) \leqslant \ell(x, \lambda_*). \tag{4.66}$$

Cette notion est plus forte que la stationnarité, car elle exprime aussi la minimalité *globale* sur Ω (voir la proposition 4.51 ci-dessous), mais elle ne requiert pas la differentiabilité de f et c. Par ailleurs, l'utilisation de l'ensemble Ω permet d'obtenir une certaine localisation de la minimalité en x. Nous reviendrons plus longuement sur cette approche utilisant la notion de point-selle au chapitre 13 sur la dualité.

Commençons par établir une expression équivalente de l'inégalité de gauche dans (4.66). Comme $f(x_*)$ est présent dans les deux membres de cette inégalité, elle peut aussi s'écrire $\lambda^\mathsf{T} c(x_*) \leqslant \lambda_*^\mathsf{T} c(x_*)$, qui est le point (i) de la proposition ci-dessous.

Proposition 4.50 (admissibilité et maximalité de $\ell(x_*, \cdot)$) *Soit $(x_*, \lambda_*) \in \mathbb{E} \times \Lambda$. Alors les propriétés suivantes sont équivalentes :*
(i) $\lambda^\mathsf{T} c(x_*) \leqslant \lambda_*^\mathsf{T} c(x_*)$ pour tout $\lambda \in \Lambda$,
(ii) $c_E(x_*) = 0$ et $0 \leqslant (\lambda_*)_I \perp c_I(x_*) \leqslant 0$.

Démonstration. [$(i) \Rightarrow (ii)$] Pour obtenir l'admissibilité de x_*, on prend d'abord $\lambda_E = (\lambda_*)_E + c_E(x_*)$ et $\lambda_I = (\lambda_*)_I \in \mathbb{R}^{m_I}_+$, qui montre que $c_E(x_*) = 0$, et ensuite $\lambda_I = (\lambda_*)_I + c_I(x_*)^+ \in \mathbb{R}^{m_I}_+$, qui montre que $c_I(x_*)^+ = 0$ ou $c_I(x_*) \leqslant 0$. Pour obtenir la complémentarité, on prend $\lambda_I = 0$, qui donne $(\lambda_*)_I c_I(x_*) \geqslant 0$, puis $\lambda_I = 2(\lambda_*)_I$,

qui donne $(\lambda_*)_I c_I(x_*) \leqslant 0$ (on peut aussi utiliser le fait que $(\lambda_*)_I \geqslant 0$ et $c_I(x_*) \leqslant 0$), d'où l'égalité $(\lambda_*)_I c_I(x_*) = 0$.

$[(ii) \Rightarrow (i)]$ Soit $\lambda \in \Lambda$. Comme $c_E(x_*) = 0$ par (ii), il suffit de montrer que $\lambda_I c_I(x_*) \leqslant (\lambda_*)_I c_I(x_*)$. Or $(\lambda_*)_I c_I(x_*) = 0$ par la complémentarité dans (ii) et $\lambda_I c_I(x_*) \leqslant 0$ car $\lambda_I \geqslant 0$ pour des λ dans Λ et $c_I(x_*) \leqslant 0$ par (ii). □

Le résultat suivant montre que la « partie primale » x_* d'un point-selle (x_*, λ_*) du lagrangien de (P_{EI}) sur $\Omega \times \Lambda$ est un minimum de f sur $X \cap \Omega$ (rappelons que X désigne l'ensemble admissible de (P_{EI})). Ce résultat est à rapprocher de la condition suffisante CS1 de la proposition 4.31, excepté qu'il n'y a ici aucune hypothèse de différentiabilité ou de convexité. Il est parfois utilisé pour montrer qu'un point est solution globale d'un problème d'optimisation (voir la démonstration du théorème **??** et l'exercice 13.7).

Proposition 4.51 (CS0 globale par point-selle) *Soient X l'ensemble admissible de (P_{EI}) et $\Omega \subseteq \mathbb{E}$. Si (x_*, λ_*) est un point-selle du lagrangien de (P_{EI}) sur $\Omega \times \Lambda$, alors x_* minimise f sur $X \cap \Omega$.*

Démonstration. On utilise toutes les conditions exprimant que (x_*, λ_*) est un point-selle du lagrangien sur $\Omega \times \Lambda$. Observons d'abors que $x_* \in X$ (proposition 4.50) et que $x_* \in \Omega$ (par le fait même que (x_*, λ_*) est un point-selle sur $\Omega \times \Lambda$). Maintenant, si $x \in X \cap \Omega$, on a :

$$\begin{aligned} f(x_*) &= \ell(x_*, \lambda_*) && [c_E(x_*) \text{ et } (\lambda_*)_I^\intercal c_I(x_*) = 0 \text{ (proposition 4.50)}] \\ &\leqslant \ell(x, \lambda_*) && [x_* \text{ minimise } \ell(\cdot, \lambda_*) \text{ sur } \Omega \text{ et } x \in \Omega] \\ &= f(x) + (\lambda_*)_I^\intercal c_I(x) && [c_E(x) = 0] \\ &\leqslant f(x) && [(\lambda_*)_I \geqslant 0 \text{ (proposition 4.50) et } c_I(x) \leqslant 0]. \end{aligned}$$

Ceci montre que x_* minimise f sur $X \cap \Omega$. □

Notre but à présent est d'analyser le sous-différentiel de la fonction valeur en zéro. Celle dont nous parlons tient compte de la localisation par Ω. Nous la noterons

$$v_\Omega : p \in \mathbb{R}^m \to v_\Omega := \inf_{x \in \mathbb{E}} \left(f(x) + \mathcal{I}_{X^p \cap \Omega}(x) \right) \in \overline{\mathbb{R}}. \tag{4.67}$$

C'est donc la fonction marginale de la fonction

$$\varphi_\Omega : (p, x) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{E} \mapsto \varphi_\Omega(p, x) := f(x) + \mathcal{I}_{X^p \cap \Omega}(x), \tag{4.68}$$

Pour que le concept de sous-différentiel ait un sens il faut que la fonction valeur soit convexe. La proposition suivante montre qu'il en est bien ainsi si le problème (P_{EI}) est convexe au sens de la définition 4.24 et si Ω est convexe.

Proposition 4.52 (fonction valeur convexe) *Si f et les $\{c_i\}_{i\in I}$ sont convexes, si c_E est affine et si Ω est convexe, la fonction valeur v_Ω définie par (4.67) est convexe.*

Démonstration. Comme fonction marginale de la fonction φ_Ω définie par (4.68), la fonction valeur v_Ω sera convexe si l'on montre que φ_Ω est convexe (proposition 3.34). Le premier terme de la somme définissant φ_Ω étant convexe par hypothèse, il suffit de s'intéresser au second terme et de montrer que pour x, $x' \in \mathbb{E}$, p, $p' \in \mathbb{R}^m$ et $t \in]0,1[$, on a

$$\mathcal{I}_{X^{(1-t)p+tp'}\cap\Omega}((1-t)x+tx') \leqslant (1-t)\,\mathcal{I}_{X^p\cap\Omega}(x)+t\,\mathcal{I}_{X^{p'}\cap\Omega}(x'),$$

ou encore que

$$x \in X^p\cap\Omega \text{ et } x' \in X^{p'}\cap\Omega \quad\Longrightarrow\quad (1-t)x+tx' \in X^{(1-t)p+tp'}\cap\Omega.$$

Clairement $(1-t)x+tx' \in \Omega$ par convexité de Ω. Par ailleurs, si $x \in X^p$ et $x' \in X^{p'}$, on a

$$c_E(x)+p_E=0, \quad c_E(x')+p'_E=0, \quad c_I(x)+p_I\leqslant 0 \quad\text{et}\quad c_I(x')+p'_I\leqslant 0.$$

En utilisant l'affinité de c_E et la convexité des c_i $(i\in I)$, on trouve

$$c_E((1-t)x+tx')+(1-t)p_E+tp'_E=0 \quad\text{et}\quad c_I((1-t)x+tx')+(1-t)p_I+tp'_I\leqslant 0,$$

ce qui montre l'implication ci-dessus. □

Venons-en maintenant au résultat décrivant $\partial v_\Omega(0)$ comme l'ensemble des multiplicateurs optimaux. Le résultat ne suppose pas la convexité du problème (P_{EI}), ni celle de Ω, mais requiert que v_Ω soir convexe. On rappelle que X est l'ensemble admissible de (P_{EI}).

Proposition 4.53 (sous-différentiel de v_Ω en 0) *Soient $\Omega\subseteq\mathbb{E}$ et x_* est un minimiseur de f sur $X\cap\Omega$. On suppose que la fonction valeur v_Ω déinie par (4.67) est dans* Conv$(\mathbb{R}^m)$. *Alors*

$$\partial v_\Omega(0)=\{\lambda_* : (x_*,\lambda_*) \text{ est point-selle de } \ell \text{ sur } \Omega\times\Lambda\}.$$

En particulier, $\partial v_\Omega(0)\neq\varnothing$ si, et seulement si, il existe un multiplicateur λ_* tel que (x_*,λ_*) soit point-selle de ℓ sur $\Omega\times\Lambda$.

Démonstration. Comme v_Ω est la fonction marginale de la fonction φ_Ω définie en (4.68), la proposition 3.69 nous apprend que

$$\begin{aligned}
\lambda_*\in\partial v_\Omega(0) &\iff (\lambda_*,0)\in\partial\varphi_\Omega(0,x_*)\\
&\iff \varphi_\Omega(p,x)\geqslant\varphi_\Omega(0,x_*)+\lambda_*^{\mathsf{T}}p, \quad \forall p\in\mathbb{R}^m, \quad \forall x\in\mathbb{E}\\
&\iff f(x)\geqslant f(x_*)+\lambda_*^{\mathsf{T}}p, \quad \forall p\in\mathbb{R}^m, \quad \forall x\in X^p\cap\Omega. \quad (4.69)
\end{aligned}$$

Il reste à montrer que cette dernière condition (4.69) est équivalente au fait que (x_*, λ_*) est un point-selle de ℓ sur $\Omega \times \Lambda$.

Supposons que (4.69) ait lieu. On peut prendre dans (4.69), $x \in \Omega$ et $p = -c(x)$, ce qui donne (pour obtenir la seconde inégalité, on prend $x = x_*$)

$$\ell(x, \lambda_*) \geqslant f(x_*) \qquad \text{et} \qquad \lambda_*^\mathsf{T} c(x_*) \geqslant 0. \tag{4.70}$$

On peut aussi prendre dans (4.69), $p = c(x_*)$ et $x = x_*$, ce qui donne

$$0 \geqslant \lambda_*^\mathsf{T} c(x_*). \tag{4.71}$$

Conclusion : pour tout $x \in \Omega$ et tout $\lambda \in \Lambda$, on a

$$\begin{array}{rcll} \ell(x_*, \lambda) & \leqslant & f(x_*) & [\lambda^\mathsf{T} c(x_*) \leqslant 0, \text{ car } x_* \in X \text{ et } \lambda \in \Lambda] \\ & = & \ell(x_*, \lambda_*) & [\lambda_*^\mathsf{T} c(x_*) = 0 \text{ par (4.70) et (4.71)}] \\ & \leqslant & \ell(x, \lambda_*) & [(4.70)]. \end{array}$$

Inversement, supposons que (x_*, λ_*) soit un point-selle de ℓ sur $\Omega \times \Lambda$. Alors pour tout $x \in \Omega$:

$$\begin{array}{rcll} f(x_*) & = & \ell(x_*, \lambda_*) & [\lambda_*^\mathsf{T} c(x_*) = 0 \text{ par la proposition 4.50}] \\ & \leqslant & \ell(x, \lambda_*) & [x_* \in \arg\min\{\ell(x, \lambda_*) : x \in \Omega\}] \\ & = & f(x) + \lambda_*^\mathsf{T} c(x). \end{array}$$

Soient $p \in \mathbb{R}^m$ et $x \in X^p \cap \Omega$. On a $(\lambda_*)_E^\mathsf{T} c_E(x) = -(\lambda_*)_E^\mathsf{T} p_E$ et $(\lambda_*)_I^\mathsf{T} c_I(x) \leqslant -(\lambda_*)_I^\mathsf{T} p_I$ (car $(\lambda_*)_I \geqslant 0$ lorsque $\lambda_* \in \Lambda$). Dès lors $\lambda_*^\mathsf{T} c(x) \leqslant -\lambda_*^\mathsf{T} p$ et les membres extrêmes de la relation ci-dessus conduisent à (4.69). □

Terminons cette section par un résultat assurant la non vacuité de $\partial v(0)$, ce qui, par la proposition 4.53, revient à affirmer l'existence d'un point-selle (x_*, λ_*) de ℓ sur $\mathbb{R}^n \times \Lambda$. Il s'agit donc de conditions nécessaires d'optimalité du type de celles conduisant au système d'optimalité de Karush, Kuhn et Tucker (4.32). Comme dans le cas différentiable, l'existence de multiplicateurs optimaux n'est garantie que sous une condition de qualification de contrainte. Nous ferons l'hypothèse de Slater, dans une version moins restrictive que (QC-S) : on ne suppose pas la différentiabilité des contraintes d'inégalité.

Théorème 4.54 (CN0 pour problèmes convexes) *Supposons que f et les $\{c_i\}_{i \in I}$ soient convexes et que c_E soit affine. On accepte un critère $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ prenant la valeur $+\infty$, pour autant que son domaine soit non vide. On suppose que les contraintes sont qualifiées au sens de Slater : c'_E est surjective, il existe $\hat{x} \in (\operatorname{dom} f)^\circ$ tel que $c_I(\hat{x}) < 0$ et c est continue en $\hat{x}$. Si x_* est solution de (P_{EI}), alors v est localement lipschitzienne dans un voisinage de 0 et il existe un $\lambda_* \in \mathbb{R}^m$ tel que (x_*, λ_*) soit un point-selle de ℓ sur $\mathbb{R}^n \times \Lambda$.*

Démonstration. D'après la proposition 4.53, il suffit de montrer que $\partial v(0) \neq \varnothing$. D'après la proposition 3.56, cette propriété de non vacuité sera vérifiée si $v \in$

$\mathrm{Conv}(\mathbb{R}^m)$ et $0 \in (\mathrm{dom}\, v)^\oplus$. On sait que v est convexe par la proposition 4.52. D'autre part $v(0) = f(x_*) \in \mathbb{R}$, donc $0 \in \mathrm{dom}\, v \neq \varnothing$. En montrant que $0 \in (\mathrm{dom}\, v)^\oplus$, on assure du même coup que v est propre (exercice 3.3) et que $\partial v(0) \neq \varnothing$. Soit p voisin de $0 \in \mathbb{R}^m$. Alors, du fait de la surjectivité de $A_E := c'_E$, $h := -A_E^\mathsf{T}(A_E A_E^\mathsf{T})^{-1} p_E$ est voisin de $0 \in \mathbb{E}$ et $c_E(\hat{x} + h) + p_E = 0$; d'autre part, grâce à la continuité de c_I et au fait que $c_I(\hat{x}) < 0$, on a $c_I(\hat{x} + h) + p_I \leqslant 0$. On en déduit que $\hat{x} + h$ est admissible pour (P^p_{EI}), si bien que $v(p) \leqslant f(\hat{x} + h) < +\infty$ ($\hat{x} \in (\mathrm{dom}\, f)^\oplus$).

On notera que v est localement lipschitzienne dans un voisinage de 0 en utilisant le lemme 3.12, qui s'applique puisque v a une minorante affine (proposition 3.6) et que l'on vient de montrer qu'elle est bornée supérieurement dans un voisinage de 0. □

L'exercice 4.22 examine l'allure de la fonction valeur d'un problème sans qualification de contraintes, dans une situation semblable à celle illustrée par le dessin de gauche à la figure 4.5. La fonction valeur est sous-différentiable en zéro si et seulement si le gradient est dans l'espace vectoriel de dimension un engendré par les gradients des contraintes, qui sont colinéaires.

4.6.2 Construction de chemins réguliers dans l'ensemble perturbé ⊖

Voir le syllabus complet.

4.6.3 Continuité directionnelle de la fonction valeur ⊖

Voir le syllabus complet.

4.6.4 Étude des sous-suites convergentes de solutions ⊖

Voir le syllabus complet.

Notes

La condition d'optimalité (4.15) des problèmes sans contrainte est parfois appelée *équation de Fermat* pour rappeler une condition similaire trouvée, dans le cas d'un polynôme réel d'une variable réelle, par Pierre de Fermat. Cette découverte, dont il est fait allusion dans l'épigraphe de ce chapitre, daterait de 1629, c'est-à-dire environ quarante ans avant l'invention *officielle* du calcul différentiel par Newton et Leibniz ! Elle ne fut pleinement exposée qu'en 1638 dans une lettre à Roberval. Johannes Kepler avait déjà exprimé cela de manière qualitative en 1615 dans sa *Nouvelle stéréométrie des tonneaux de vins*, en observant qu'une fonction réelle varie très peu au voisinage d'un maximum. Ceci lui permit de résoudre quelques problèmes d'extrémum comme celui du plus grand cylindre inscrit dans une sphère. L'emploi explicite de la dérivée dans ces problèmes est dû à Leibniz (1684)[1], qui utilise déjà les dérivées secondes pour

[1] *Nova methodus pro maximis et minimis, itemque tangentibus, qua nec irrationales quantitates moratur.* C'est aussi dans cet ouvrage que Leibniz donne pour la première fois les formules bien connues de dérivation d'un produit, d'un quotient et d'une puissance entière.

distinguer les minima des maxima. La généralisation au cas des fonctions de deux variables est due à Euler. Celui-ci utilise cette condition en *Calcul des Variations*, où elle porte le nom d'équation d'Euler ou d'Euler-Lagrange. [76, 7, 382]

La célèbre méthode des multiplicateurs (théorème 4.17) est attribuée à Lagrange qui l'énonça dans sa *Méchanique analytique* [345 ; 1788, pages 77-112]. On en trouve toutefois déjà des traces dans des travaux d'Euler sur les problèmes isopérimétriques (1744). Lagrange utilisa d'abord cette méthode pour résoudre un problème de calcul des variations sous contraintes, en dimension infinie donc ! Neuf ans plus tard, dans sa *Théorie des fonctions analytiques* (1797), il applique cette méthode aux problèmes de dimension finie sous contraintes d'égalité de la forme (P_E). [76, 7]

L'étude des problèmes avec contraintes d'inégalité de la forme (P_{EI}) est beaucoup plus récente [1, 192]. La condition nécessaire d'optimalité du premier ordre $\nabla f(x_*) \in (\mathrm{T}_{x_*} X)^+$ du théorème 4.6 pour un ensemble admissible X général, qui nous a servi de point de départ pour établir les conditions d'optimalité du premier ordre de problèmes structurés, était déjà exprimée ainsi par Peano [430, 431] dès 1887, puis par Kantorovitch [321] en 1940, mais ce résultat est passé inaperçu ou a été oublié [437, 158]. La définition 4.28 de condition de qualification des contraintes est parfois associée au nom d'Abadie [193]. Les conditions nécessaires d'optimalité (4.32) ont longtemps été attribuées à Kuhn et Tucker [342 ; 1951]. Après bien des années, on constata que ces conditions avaient déjà été données par Karush [324 ; 1939] dans une thèse qui ne fut jamais publiée, mais qui est décrite dans le compte rendu historique de Kuhn [341]. Une approche différente conduisant au même résultat a été suivie par John [315 ; 1948], également avant les travaux de Kuhn et Tucker. C'est aussi ce point de vue qu'ont pris Mangasarian et Fromovitz [375 ; 1967] pour introduire la condition de qualification (QC-MF) qui porte leur nom. Les conditions de qualification de Slater (QC-S) ont été introduites dans [495 ; 1950]. Sur ces sujets, on lira avec profit la revue de Rockafellar [471 ; 1993] sur les conditions du premier ordre et le petit livre didactique d'Hiriart-Urruty [293]. La monographie de Gauvin [216] est vivifiante, avec une approche qui demande une bonne maîtrise de l'optimisation linéaire. Il donne les conditions nécessaires du second ordre les plus fines, celles des théorèmes 4.46 et 4.47.

Pour obtenir les conditions d'optimalité des problèmes avec contraintes générales de la section 4.5, nous nous sommes mis comme contrainte de garder l'esprit de la démarche suivie pour l'obtention des conditions d'optimalité des problèmes qui précèdent, celle faisant usage du lemme de Farkas. La condition générale de qualification de contrainte de la définition **??** s'impose alors naturellement et les conditions du premier ordre en découlent aisément (cette qualification de contrainte se retrouve chez Guignard [273 ; 1969]). La borne d'erreur de Robinson [458] (section **??**) a été obtenue en suivant Bonnans et Shapiro [67 ; 2000] pour le théorème **??** (en apportant les simplifications permises par la dimension finie des espaces sous-jacents) et Cominetti [120 ; 1990] pour le lemme **??** de Lyusternik et la proposition **??** sur la diffusion de la régularité métrique. Ces deux sources contiennent beaucoup d'autres références sur l'origine de ces résultats. La démonstration de la proposition **??** a bénéficié de la lecture de [565, 67].

L'étude de l'effet de perturbations sur des problèmes d'optimisation, abordée à la section 4.6, est d'une importance considérable et ne cesse d'être le sujet de publications dans des situations les plus variées. La présentation qui en est donnée s'inspire de [216]. On trouvera un approfondissement de ces questions dans les ouvrages de Levitin [362 ;

1994] et de Bonnans et Shapiro [67 ; 2000], ainsi que chez Rockafellar [470 ; 1981] et beaucoup d'autres.

La théorie en dimension infinie est présentée par Ekeland et Temam [177 ; 1974], Barbu et Precupanu [31 ; 1975], Aubin et Ekeland [22 ; 1984], Bonnans et Shapiro [67 ; 2000], Mordukhovich [398 ; 2006] et Ito et Kunisch [306 ; 2008].

Exercices

4.1. *Propriétés du cône tangent.* Soient $\{X_i\}_{i\in I}$ une famille de parties d'un espace vectoriel $\mathbb{E}$ et $x \in \mathbb{E}$. Alors

1) $\mathrm{T}_x(\cap_{i\in I} X_i) \subseteq \cap_{i\in I}(\mathrm{T}_x\, X_i)$,
2) $\mathrm{T}_x(\cup_{i\in I} X_i) \supseteq \cup_{i\in I}(\mathrm{T}_x\, X_i)$, avec égalité si I est fini,
3) $\mathrm{T}_{(x,y)}(X \times Y) \subseteq (\mathrm{T}_x\, X) \times (\mathrm{T}_y\, Y)$, si X (resp. Y) est une partie d'un espace vectoriel $\mathbb{E}$ (resp. $\mathbb{F}$), avec égalité si X et Y sont convexes.

Montrez par des contre-exemples que l'on n'a pas nécessairement égalité au point 1, ni au point 2 si I est infini dénombrable.

4.2. *Cônes tangent et normal à un convexe.* Lorsque C est un convexe fermé et $x \in C$, les définitions de cône tangent données aux sections 2.5.7 et 4.1.1 coïncident. De même, les définitions de cône normal données aux sections 2.5.3 et 4.1.1 coïncident.

4.3. *Transport affine des cônes tangent et normal à un convexe.* Soient $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ deux espaces vectoriels et $a : \mathbb{E} \to \mathbb{F} : x \mapsto Ax + b$ une application affine ($A : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ est linéaire et $b \in \mathbb{F}$). On désigne par $f^{-1}(P)$ l'image réciproque d'un ensemble P par une application f.

1) Si C est un convexe de $\mathbb{E}$ et si $x \in C$, alors
$$\mathrm{T}_{a(x)}\, a(C) = \overline{A(\mathrm{T}_x\, C)}. \tag{4.72}$$
2) Si C est un convexe de $\mathbb{F}$ et si $x \in a^{-1}(C)$, alors
$$\mathrm{T}_x(a^{-1}(C)) = A^{-1}(\mathrm{T}_{a(x)}[C \cap \mathcal{R}(a)]). \tag{4.73}$$

On suppose à présent que $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ sont des espaces euclidiens et on note A^* l'adjoint de A.

3) Si C est un convexe de $\mathbb{E}$ et si $x \in C$, alors
$$\mathrm{N}_{a(x)} a(C) = (A^*)^{-1}(\mathrm{N}_x C). \tag{4.74}$$
4) Si C est un convexe de $\mathbb{F}$ et si $x \in a^{-1}(C)$, alors
$$\mathrm{N}_x(a^{-1}(C)) = A^*(\mathrm{N}_{a(x)}[C \cap \mathcal{R}(a)]). \tag{4.75}$$

En particulier, l'ensemble $A^*(\mathrm{N}_{a(x)}[C \cap \mathcal{R}(a)])$ est fermé.

4.4. *CS2 diffuse pour problèmes sans contrainte.* Considérons le problème sans contrainte (4.14). Supposons que f soit deux fois différentiable dans un voisinage de $x_* \in \mathbb{E}$, que $f'(x_*) = 0$ et que $f''(x) \cdot h^2 \geqslant 0$ pour tout $h \in \mathbb{E}$ et tout x dans un voisinage de x_*. Montrez qu'alors x_* est un minimum local de f. Montrez par un contre-exemple que la réciproque est fausse.

4.5. *CS2 pour un maximum sans contrainte.* Supposons que $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R}$ soit C^1 dans un voisinage d'un point $x_* \in \mathbb{E}$ et deux fois dérivable en x_*. Supposons également que $\nabla f(x_*) = 0$ et que $\nabla^2 f(x_*)$ soit définie *négative*. Alors x_* est un *maximum* local strict de f.

Remarque. Il y a des CN2 analogues.

4.6. *Optimisation quadratique sans contrainte.* Soient $A \in \mathcal{S}^n$ et $b \in \mathbb{R}^n$. On considère le problème $\min\{f(x) : x \in \mathbb{R}^n\}$, où $f(x) = \frac{1}{2}x^\mathsf{T}Ax + b^\mathsf{T}x$.

1) Montrez que, si $A \succ 0$, le problème a une solution unique.
2) Montrez que les propriétés suivantes sont équivalentes :
   (a) le problème a une solution,
   (b) $A \succcurlyeq 0$ et $b \in \mathcal{R}(A)$,
   (c) f est bornée inférieurement,
   et que dans ce cas, l'ensemble des solutions est de la forme $x_0 + \mathcal{N}(A)$, où x_0 est une solution particulière du problème, et la valeur optimale vaut $-b^\mathsf{T}A^\dagger b$, où $A^\dagger$ est le pseudo-inverse de A.

   Remarque : ce résultat ne peut s'étendre à des polynômes de degré strictement supérieur à 2 ; par exemple, le *polynôme quartique* $x \in \mathbb{R}^2 \mapsto x_1^2 + (1 - x_1x_2)^2$ est strictement positif sur $\mathbb{R}^2$; il n'atteint donc pas sa borne inférieure qui est nulle (on l'approche en prenant $x_1 \to 0$, $x_1 \neq 0$ et $x_2 = 1/x_1$) [206 ; 1956, annexe (i)].
3) Montrez que la valeur optimale du problème est donnée par

$$\inf_{x\in\mathbb{R}^n} \left(\frac{1}{2}x^\mathsf{T}Ax + b^\mathsf{T}x\right) = -\frac{1}{2} \inf_{\substack{\alpha \geqslant 0 \\ \alpha A \succcurlyeq bb^\mathsf{T}}} \alpha.$$

4.7. *Approximation de rang un d'une matrice symétrique.* Soit M une matrice symétrique d'ordre n. On considère le problème

$$\inf_{v\in\mathbb{R}^n} \frac{1}{2}\|M - vv^\mathsf{T}\|_F^2.$$

qui consiste à trouver une matrice de rang $\leqslant 1$ qui soit la plus proche de M au sens de la norme de Frobenius. Montrez que ce problème a une solution et déterminez ses solutions.

4.8. *CS2 pour un maximum avec contraintes d'égalité.* Supposons que f et c soient C^1 dans un voisinage d'un point $x_* \in \mathbb{E}$ et deux fois dérivables en x_*. Supposons également que $c(x_*) = 0$ et qu'il existe $\lambda_* \in \mathbb{R}^m$ tel que l'on ait $\nabla_x \ell(x_*, \lambda_*) = 0$ et $\langle L_* d, d\rangle < 0$, pour tout $d \in \mathcal{N}(c'(x_*)) \setminus \{0\}$. Alors x_* est un *maximum* local strict de f sur $\{x \in \mathbb{E} : c(x) = 0\}$.

Remarque. Il y a des CN2 analogues.

Remarque. Les CS2 pour avoir un maximum de f sous contraintes d'inégalité ne s'obtiennent pas directement en changeant le signe de l'inégalité (4.58) dans le théorème 4.47. Par exemple, dans le problème $\min\{x_1^2 - x_2^2 : x_1 \geqslant 1\}$, l'unique point stationnaire est $x_* = (1, 0)$ avec pour multiplicateur $\lambda_* = 2$. La hessienne du lagrangien $L_* = \mathrm{diag}(2, -2)$ est tel que $\langle L_* d, d\rangle < 0$ pour toute direction non nulle dans le cône critique $C_* = \{d : d_1 = 0\}$. Pourtant, x_* n'est pas un maximum local strict puisque pour tout $t > 0$, $x_* + (t, 0)$ est admissible et $f(x_* + (t, 0)) > f(x_*)$.

4.9. *Élimination hasardeuse de contrainte.* L'exemple suivant montre qu'il faut être très prudent lorsqu'on élimine des contraintes. On considère le problème

$$\begin{cases} \min_{(x_1,x_2)} x_1^2 + (x_2 - 1)^2 \\ \alpha\, x_1^2 = x_2, \end{cases} \tag{4.76}$$

dans lequel $\alpha > 0$. On déterminera les solutions de ce problème (4.76) en fonction de $\alpha > 0$. On remplace à présent dans le critère de (4.76), x_1^2 par sa valeur donnée par la contrainte, ce qui conduit au problème

$$\min_{x_2} \frac{1}{\alpha} x_2 + (x_2 - 1)^2. \tag{4.77}$$

Déterminez l'unique solution du problème (4.77). Celle-ci n'est pas nécessairement solution de (4.76). Pourquoi ?

4.10. *Minimisation d'une fonction cubique sur le cercle.* On considère le problème d'optimisation en $(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2$ suivant

$$\begin{cases} \min \frac{1}{3}(x_1^3 + x_2^3) \\ \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2 - 1) = 0. \end{cases} \tag{4.78}$$

Ce problème admet les 6 points stationnaires suivants $x = \pm(0,1)$, $x = \pm(1,0)$ et $x = \pm(1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2})$. En utilisant les conditions d'optimalité du second ordre, déterminez si ces points sont des minima ou des maxima locaux.

4.11. *Minimisation d'une fonction linéaire sur une boule.* Soit $c \in \mathbb{R}^n$ *non nul* (le cas où $c = 0$ est trivial). Calculez les solutions du problème $\min\{c^\mathsf{T} x : x \in \bar{B}_p\}$, où $\bar{B}_p$ est la boule unité fermée de $\mathbb{R}^n$ pour la norme ℓ_p définie par (A.5) ; considérez séparément les cas où $p = 1$, $1 < p < \infty$ et $p = \infty$. En déduire l'*inégalité de Hölder* : pour tout x et $y \in \mathbb{R}^n$ et tout $p \in [1, \infty]$, on a

$$|x^\mathsf{T} y| \leqslant \|x\|_p \|y\|_{p'}, \quad \text{avec } \tfrac{1}{p} + \tfrac{1}{p'} = 1.$$

On dit que les nombres p et p' sont *conjugués*. Montrez que, lorsque $1 < p < +\infty$, on a égalité dans celle-ci si, et seulement si, si x est parallèle au vecteur de composante $\operatorname{sgn}(y_i)|y_i|^{p'/p}$ (qui est y si $p = 2$).

4.12. *Quotient de Rayleigh.* Soient $\mathbb{E}$ un espace euclidien, muni du produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle$ et de la norme associée $\| \cdot \| := \langle \cdot, \cdot \rangle^{1/2}$ et $A : \mathbb{E} \to \mathbb{E}$ une application linéaire auto-adjointe (pour ce produit scalaire : pour tout x, $y \in \mathbb{E}$, on a $\langle Ax, y \rangle = \langle x, Ay \rangle$). Le *quotient de Rayleigh* $q(x)$ de A en $x \in \mathbb{E} \setminus \{0\}$ est défini par

$$q(x) = \frac{\langle Ax, x \rangle}{\|x\|^2}. \tag{4.79}$$

On s'intéresse au problème de la minimisation de q (et plus généralement de la description de ses points stationnaires) en considérant le problème équivalent

$$\inf_{\substack{x \in \mathbb{E} \\ \|x\|^2 = 1}} \langle Ax, x \rangle, \tag{4.80}$$

qui est plus simple par la quadraticité de son critère et de sa contrainte.

1) Dans quel sens les problèmes (4.79) et (4.80) sont-ils équivalents ? Montrez que ces problèmes ont une solution.
2) Soit $(\bar{x}, \bar{\lambda}) \in \mathbb{E} \times \mathbb{R}$. Montrez que $\bar{x}$ est un vecteur propre unitaire (i.e., de norme 1) de A, de valeur propre $\bar{\lambda}$, si, et seulement si, $\bar{x}$ est un point stationnaire de (4.80) de multiplicateur $\bar{\lambda}$. De plus, $\bar{\lambda}$ est la valeur du critère en ce point stationnaire (ou valeur critique).
3) Montrez que les solutions de (4.80) sont les vecteurs propres unitaires de A de valeur propre minimale $\lambda_{\min}(A)$. En particulier,

$$\forall\, x \in \mathbb{E} : \quad \langle Ax, x \rangle \geqslant \lambda_{\min}(A) \|x\|^2. \tag{4.81}$$

4) Montrez que la condition suffisante du second ordre (4.26) du problème (4.80) est vérifiée en une solution si, et seulement si, la plus petite valeur propre de A est simple (i.e., l'espace vectoriel associé est de dimension 1).

5) On note λ_i les valeurs propres de A. Montrez que

$$\begin{aligned} \max_i |\lambda_i| &= \|A\| \\ \lambda_{\max}(A) &= \|A\| \quad (\text{si } A \succcurlyeq 0) \\ \lambda_{\min}(A) &= \|A^{-1}\|^{-1} \quad (\text{si } A \succ 0). \end{aligned}$$

4.13. *Valeurs singulières d'une matrice.* Rappelons le cadre défini à la section B.5.4. On note $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ deux espaces euclidiens sur $\mathbb{R}$ (produits scalaires notés $\langle\cdot,\cdot\rangle$ et normes associées notées $\|\cdot\|$), de dimension respective $n := \dim \mathbb{E}$ et $m := \dim \mathbb{F}$. On considère une application linéaire $A : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ de rang $r \geqslant 1$ et on note $A^* : \mathbb{F} \to \mathbb{E}$ son adjointe. On considère le problème de maximisation en $(x, y) \in \mathbb{E} \times \mathbb{F}$ suivant :

$$\begin{cases} \sup \langle Ax, y\rangle \\ \|x\|^2 = 1 \\ \|y\|^2 = 1. \end{cases} \tag{4.82}$$

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

1) Montrez que le problème (4.82) a une solution, que ses contraintes sont qualifiées en tout point admissible et que chaque point stationnaire est un vecteur propre de $\hat{A}$, de valeur propre égale à la valeur du critère en ce point stationnaire.
2) Soit $(\bar{x}, \bar{y})$ une solution de (4.82) et $\bar{\sigma} = \langle A\bar{x}, \bar{y}\rangle$. Montrez que $\bar{\sigma}$ est la valeur propre maximale de $\hat{A}$ (c'est la valeur singulière maximale si $A \neq 0$).

4.14. *Remplacer des contraintes d'égalité par des contraintes d'inégalité.* Si $I \subseteq [1\,{:}\,n]$, on note ci-dessous I^c le complémentaire de I dans $[1\,{:}\,n]$. Soient A une matrice $m \times n$, $b \in \mathbb{R}^m$, $I \subseteq [1\,{:}\,n]$ et $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R}$ une fonction convexe différentiable. Si $\bar{x}$ est solution du problème 5

$$\min \{f(x) : Ax = b,\ x_I \geqslant 0,\ x_{I^c} = 0\},$$

alors il existe un sous-ensemble d'indices $J \subseteq [1\,{:}\,n]$, contenant I, tel que $\bar{x}$ est aussi solution du problème

$$\min \{f(x) : Ax = b,\ x_J \geqslant 0,\ x_{J^c} \leqslant 0\}.$$

4.15. *Qualification sans conditions de Mangasarian-Fromovitz.* Soit $X = \{x \in \mathbb{R}^2 : 0 \leqslant x_2 \leqslant x_1^2\}$. Montrez que les contraintes sont qualifiées en $x = 0$, alors que les conditions de qualification de Mangasarian-Fromovitz n'ont pas lieu.

4.16. *Stabilité des conditions de Mangasarian-Fromovitz.* Soit $x \in X_{EI}$ (ensemble défini en (4.28)). Si c est C^1 dans un voisinage de x et si (QC-MF) a lieu en x, (QC-MF) a aussi lieu aux points de X_{EI} voisins de x.

4.17. *Aspect topologique des conditions de Mangasarian-Fromovitz.* Soient A_E et A_J deux matrices de type $m_E \times n$ et $m_J \times n$ vérifiant la condition de régularité (4.38). Montrez, qu'il existe une constante C telle que pour tout $v \in \mathbb{R}^{m_E+m_J}$, on peut trouver $d \in \mathbb{E}$ tel que $A_E d = v_E$, $A_J d \leqslant v_J$ et $\|d\| \leqslant C\|v\|$.

4.18. *Autres expressions de la stationnarité.* On considère le problème (P_{EI}), dont on note X l'ensemble admissible. Soit $x_* \in X$. On suppose que f et $c_{E\cup I^0_*}$ sont dérivables en x_* et que les contraintes sont qualifiées en x_*. Montrez que les propriétés suivantes sont équivalentes :

(i) il existe $\lambda_* \in \mathbb{R}^m$ tel que l'on ait les conditions de KKT (4.32) ;
(ii) zéro est solution du problème d'optimisation linéaire

$$\begin{cases} \min_v \langle \nabla f(x_*), v\rangle \\ c'_E(x_*) \cdot v = 0 \\ c'_{I^0_*}(x_*) \cdot v \leqslant 0\,; \end{cases}$$

(*iii*) $\forall \alpha \geqslant \|\nabla f(x_*)\|$ et $\forall v \in \mathbb{E}$, on a $\langle \nabla f(x_*), v\rangle + \alpha \operatorname{dist}(v, \mathrm{T}_{x_*} X) \geqslant 0$ ($\operatorname{dist}(\cdot, C)$ désigne la distance à C).

4.19. *Conditions d'optimalité de Fritz-John.* On considère le problème (P_{EI}), avec f et c régulières. Soit $x \in \mathbb{E}$ un point admissible pour ce problème. Si

$$\{d \in \mathbb{E} : f'(x) \cdot d < 0,\ c'_E(x) \cdot d = 0,\ c'_{I_x^0}(x) \cdot d < 0\} = \varnothing,$$

alors il existe $(\lambda_0, \lambda) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^m$ tel que $(\lambda_0, \lambda) \neq 0$, $\lambda_I \geqslant 0$, $c_I(x)^{\mathsf{T}} \lambda_I = 0$ et

$$\lambda_0 \nabla f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla c_i(x) = 0.$$

La réciproque a lieu si $c'_E(x)$ est surjective.

4.20. *Un minimum fort est un point stationnaire isolé* [459 ; théorème 2.4]. On considère le problème (P_{EI}) et on suppose que les hypothèses du théorème 4.47 sont vérifiées, avec en plus : f et c deux fois dérivables dans un voisinages de x_*, (4.58) est remplacée par (4.62) (CS2 fortes) et les contraintes sont qualifiées en x_* au sens de (QC-MF). Montrez que, dans ces conditions, x_* est un point stationnaire isolé (il n'y a pas d'autres points stationnaires que x_* dans un voisinage de x_*).

4.21. *CN2 fortes avec (QC-A) ou (QC-IL).* Soit x_* un minimum local du problème (P_{EI}). On suppose que f et c sont deux fois dérivables en x_* et que la condition de qualification (QC-A) ou (QC-IL) a lieu en x_*. Soit Λ_* l'ensemble des multiplicateurs optimaux associés à x_*, que l'on sait être non vide. Pour $\lambda_* \in \Lambda_*$, on définit

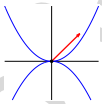
$$\tilde{X}_{\lambda_*} := \{x \in \mathbb{E} : c_{E \cup I_*^{0+}}(x) = 0,\ c_{I \setminus I_*^{0+}}(x) \leqslant 0\}.$$

On note C_* le cône critique en x_* et $L_* := \nabla^2_{xx} \ell(x_*, \lambda_*)$ pour un $\lambda_* \in \mathbb{R}^m$ donné.

1) Montrer que $\forall\, \lambda_* \in \Lambda_*$, $\mathrm{T}_{x_*} \tilde{X}_{\lambda_*} = C_*$,
2) Montrer que $\forall\, \lambda_* \in \Lambda_*$, $\forall\, d \in C_*$, $\langle L_* d, d\rangle \geqslant 0$,
3) Dans l'exemple (4.47), (QC-MF) a lieu en x_* mais pas (QC-A) ni (QC-IL). Montrer que l'égalité du point 1 n'est pas vérifiée, quel que soit $\lambda_* \in \Lambda_*$.

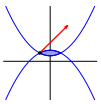
4.22. *Fonction valeur d'un problème sans qualification de contraintes.* On considère le problème d'optimisation dans $\mathbb{R}^2$ à gauche ci-dessous, ainsi que le problème perturbé par $p \in \mathbb{R}^2$ à droite :

$$\begin{cases} \inf\ \alpha x_1 + x_2 \\ x_1^2 - x_2 \leqslant 0 \\ x_1^2 + x_2 \leqslant 0 \end{cases}$$



et

$$\begin{cases} \inf\ \alpha x_1 + x_2 \\ x_1^2 - x_2 + p_1 \leqslant 0 \\ x_1^2 + x_2 + p_2 \leqslant 0, \end{cases}$$



où $\alpha \in \mathbb{R}$ est un paramètre. On note $v(p)$ la valeur optimale du problème de droite (v est donc la fonction valeur du problème de gauche, voir la section 4.6.1).

1) Montrez que v est convexe et prend pour valeur

$$v(p) = \begin{cases} p_1 - \alpha^2/4 & \text{si } p_1 + p_2 \leqslant -\alpha^2/2 \\ (p_1 - p_2)/2 - |\alpha| \sqrt{|p_1 + p_2|/2} & \text{si } p_1 + p_2 \in\,]-\alpha^2/2, 0[\\ p_1 & \text{si } p_1 + p_2 = 0 \\ +\infty & \text{si } p_1 + p_2 > 0. \end{cases}$$

2) En déduire que v est sous-différentiable en zéro si, et seulement si, $\alpha = 0$.
3) On suppose que $\alpha = 0$. Montrez que $\partial v(0) = \{p^* \in \mathbb{R}^2 : 1 \leqslant p_1^* = p_2^* + 1\}$ (pour le produit scalaire euclidien), et que cet ensemble est bien l'ensemble des multiplicateurs optimaux de KKT du problème non perturbé.

4.23. *Minimisation d'un maximum de fonctions.* Soit $\{f_i\}_{i\in[1:m]}$ une famille formée de $m \in \mathbb{N}^*$ fonctions $f_i : \mathbb{E} \to \mathbb{R}$ différentiables définies sur une espace vectoriel $\mathbb{E}$. On considère le problème de minimiser la fonction $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R}$ définie en $x \in \mathbb{E}$ par

$$f(x) = \max_{i\in[1:m]} f_i(x).$$

Montrez que si $\bar{x}$ est un minimum local de f et $I := \{i \in [1:m] : f_i(\bar{x}) = \inf_{x\in\mathbb{E}} f(x)\}$, alors il existe $\alpha_I \in \mathbb{R}^{|I|}$ tels que

$$\alpha_I \geqslant 0, \qquad \sum_{i\in I} \alpha_i = 1 \qquad \text{et} \qquad \sum_{i\in I} \alpha_i \nabla f_i(\bar{x}) = 0.$$

4.24. *Exemple d'utilisation des conditions du second ordre.* On considère le problème en $x \in \mathbb{R}^2$:

$$\begin{cases} \min -\frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2) \\ x_2 \geqslant x_1^2 - 1 \\ x_1 \geqslant 0. \end{cases}$$

Déterminez analytiquement les points stationnaires de ce problème et, parmi eux, ceux qui sont des minima/maxima locaux/globaux (stricts ou pas).

5 Prolégomènes à l'algorithmique

Les quelques nouveaux qui réussissent à passer le font tout au moins en partie parce qu'ils ont de la chance, mais surtout parce qu'ils font ce qu'il faut : ils excellent à construire des machines à survivre.

R. Dawkins (1976), *Le Gène Égoïste*. [143]

Avec ce chapitre nous commençons l'étude des algorithmes de résolution des problèmes d'optimisation. Quelques réponses aux questions communes à tout algorithme, à leur implémentation ou utilisation, ont été rassemblées ici. Celles relatives à la comparaison des algorithmes en fonction de la vitesse de convergence des suites qu'ils génèrent ou du nombre d'opérations qu'ils requièrent sont respectivement abordées aux sections 5.1 et 5.2. La section 5.3 fait quelques remarques sur le (pré-)conditionnement des problèmes d'optimisation, c'est-à-dire sur les moyens de les transformer analytiquement de manière à les rendre plus faciles à résoudre numériquement et moins sensibles aux erreurs d'arrondi, lesquelles sont inévitablement commises en calcul flottant. Le calcul d'un gradient est une opération fondamentale, mécanique et fastidieuse, de l'optimisation numérique. La méthode de l'état adjoint, qui est souvent la bonne méthode à utiliser dans les problèmes de commande optimale, est exposée à la section 5.4. Il ne faudra jamais perdre de vue qu'il existe une méthode générale, théoriquement efficace, pour évaluer un gradient : la différentiation automatique. Nous détaillons les modes de différentiation direct et inverse à la section 5.5. Nous concluons avec la section 5.6 qui discute de deux aspects des codes d'optimisation : des différentes structures que peut avoir un code utilisant un module d'optimisation et des profils de performance qui apportent une image graphique de l'efficacité relative de solveurs sur un banc d'essai de problèmes-tests.

5.1 Vitesse de convergence des suites

In those days, we needed faster convergence to get results in the few hours between expected failures of the Avidac's large roomful of a few thousand bytes of temperamental electrostatic memory.

W.C. Davidon, dans la nouvelle introduction de son article fondateur des méthodes de quasi-Newton, écrit en 1959, mais qui ne fut publié qu'en 1991, lors de la parution du premier numéro de la revue *SIAM Journal on Optimization* [141, 142].

Les algorithmes d'optimisation génèrent des suites $\{x_k\}_{k\geqslant 1}$ convergeant vers une solution x_* du problème (dans les bons cas !). Ils procèdent ainsi parce que, dans la plupart des problèmes que nous allons rencontrer, il n'est pas possible de calculer une solution en un nombre fini d'opérations arithmétiques. Les éléments x_k de la suite générée sont appelés des *itérés*. Étant donné un itéré x_k, on calcule l'itéré suivant x_{k+1} de telle sorte que celui-ci soit, si possible, plus proche de la solution cherchée x_* que ne l'est x_k.

Se pose alors le problème de comparer l'efficacité des algorithmes par l'examen des suites qu'ils génèrent, dans le pire des cas. La notion de vitesse de convergence permet de qualifier le comportement asymptotique (pour x_k proche de x_*) d'une suite. On distingue deux classes de vitesses de convergence : les vitesses de convergence en quotient (section 5.1.1) et en racine (section 5.1.2). Ces notions sont motivées par des considérations pratiques : on peut en effet démontrer que les suites générées par les algorithmes étudiés dans cet ouvrage ont de telles vitesses de convergence.

5.1.1 Vitesses de convergence en quotient

Dans cette section, on cherche à qualifier la vitesse de convergence d'une suite $\{x_k\}$ d'un espace normé $\mathbb{E}$, de norme notée $\|\cdot\|$, en comparant la norme de l'*erreur* $x_k - x_*$ de deux itérés successifs, c'est-à-dire en comparant $\|x_k - x_*\|$ et $\|x_{k+1} - x_*\|$. On supposera toujours que l'erreur ne s'annule pas ($x_k \neq x_*$, pour tout indice k). Cette hypothèse est raisonnable, car dans les algorithmes bien conçus, dès que $x_k = x_*$, la suite devient stationnaire après x_k (tous les itérés suivants sont égaux à x_*) et il n'y a plus de sens à parler de vitesse de convergence. On s'intéresse donc au *quotient*

$$\frac{\|x_{k+1} - x_*\|}{\|x_k - x_*\|^\alpha}, \tag{5.1}$$

où α est un entier non nul. L'intérêt pour ce quotient provient du fait qu'on peut souvent l'estimer en faisant un développement de Taylor autour de x_* des fonctions définissant le problème que l'on cherche à résoudre et dont x_* est solution.

Les noms des vitesses de convergence de cette section seront préfixés par « q- » pour rappeler qu'il s'agit de vitesse de convergence en quotient.

Numériquement, plus rapide est la convergence, plus vite augmente le *nombre de chiffres significatifs corrects* de x_k, c'est-à-dire de chiffres significatifs identiques à ceux de x_*. Donnons une définition plus précise de cette notion. Si x_k est un vecteur, on ne peut pas définir par un scalaire la correction des chiffres significatifs de toutes

ses composantes, mais on peut le faire *en moyenne* au sens de la norme sur $\mathbb{E}$. On suppose que $x_* \neq 0$ car on ne peut définir ce que sont les chiffres significatifs de zéro. Si $\|x_k - x_*\|/\|x_*\|$ vaut 10^{-4}, on dira que x_k a 4 chiffres significatifs corrects. Ceci conduit à la définition suivante.

Définition 5.1 (nombre de chiffres significatifs corrects) Le *nombre de chiffres significatifs corrects* de x_k par rapport à $x_* \neq 0$ est le nombre réel défini par

$$\sigma_k := -\log_{10} \frac{\|x_k - x_*\|}{\|x_*\|}. \qquad \square$$

Lorsque $x_* \neq 0$, on peut exprimer les vitesses de convergence en quotient en utilisant σ_k plutôt que le quotient (5.1), ce que nous ferons.

Il est parfois intéressant de vérifier numériquement que les suites générées par un algorithme ont bien la vitesse de convergence attendue, celle démontrée théoriquement pour l'algorithme considéré. Bien sûr, c'est une manière de vérifier que l'algorithme est bien implémenté, mais il y a une autre motivation. Par exemple, sous certaines hypothèses de régularité, on verra que l'algorithme de Newton converge q-quadratiquement (théorème 9.2) ; cet algorithme procède par linéarisation de la fonction qu'il cherche à annuler ; vérifier que la convergence des suites générées est bien q-quadratique est alors une indication sur la correction du calcul des dérivées.

Comme on ne connaît pas la solution, on ne peut vérifier la vitesse de convergence en quotient attendue par l'examen du quotient (5.1), qu'en résolvant deux fois le problème ; la première fois pour calculer une approximation précise de la solution x_*, la seconde pour faire l'examen des quotients susmentionnés ; c'est dommage. On pourrait aussi mémoriser tous les itérés et considérer que le dernier itéré est la solution, mais en grande dimension, cette une opération est bien trop gourmande en place mémoire. On peut éviter cette double résolution ou la mémorisation des itérés si l'on arrive à exprimer la vitesse de convergence en termes d'une quantité dont la limite est connue, typiquement nulle. Il en est ainsi si l'algorithme cherche à annuler une fonction

$$F : \mathbb{E} \to \mathbb{E},$$

pourvu que

$$F(x_*) = 0 \qquad \text{et} \qquad F(x) \sim (x - x_*). \tag{5.2}$$

L'écriture $F(x) \sim (x - x_*)$ signifie ici que, pour une norme $|||\cdot|||$ sur $\mathbb{E}$,

$$\exists\, C \geqslant 1,\ \forall\, x \text{ voisin de } x_* :\ C^{-1}|||F(x)||| \leqslant |||x - x_*||| \leqslant C|||F(x)|||. \tag{5.3}$$

En dimension finie, cette propriété ne dépend pas du choix de la norme $|||\cdot|||$ et est vérifiée dans les codnitions énoncées dans la proposition suivante.

Proposition 5.2 (équivalence asymptotique) *Si F est différentiable en x_*, si $F(x_*) = 0$ et si $F'(x_*)$ est inversible, alors (5.3) a lieu.*

Démonstration. Par la différentiablité de F en x_* et la nullité de $F(x_*)$, on a

$$F(x) = F'(x_*) \cdot (x - x_*) + o(\|x - x_*\|).$$

On en déduit directement que $\|F(x)\| = O(\|x - x_*\|)$ pour x voisin de x_*. Inversement, grâce à l'inversibilité de $F'(x_*)$, on a $x - x_* = F'(x_*)^{-1}F(x) + o(\|x - x_*\|)$, d'où l'on déduit que $\|x - x_*\| = O(\|F(x)\|)$. □

Les vitesses de convergence d'une suite $\{x_k\}$ présentées ci-dessous seront également exprimées en termes du logarithme de $\|F(x_k)\|$ pour une fonction F vérifiant (5.2) et une autre norme $\|\cdot\|$, de manière à permettre une vérification numérique de cette convergence.

La mise en évidence de l'équivalence (5.2) n'est pas toujours aussi aisée que dans la démonstration de la proposition 5.2, en particulier lorsque F n'est pas différentiable en x_* dans le sens classique de Fréchet. C'est le cas, par exemple, pour la fonction que l'on cherche à annuler par l'algorithme newtonien en optimisation avec contraintes (chapitre 14). Pour certaines vitesses de convergence de $\{x_k\}$ vers x_*, on dispose d'un autre moyen de les mettre en évidence théoriquement ou numériquement sans la connnaissance de la limte x_*, à savoir par l'examen de la vitesse de convergence vers zéro de la suite $\{s_k\}$ des déplacements

$$s_k := x_{k+1} - x_k. \tag{5.4}$$

L'intérêt de cette suite est, en l'occurrence, de converger vers une limite connue, zéro, lorsque $x_k \to x_*$. L'estimation de la vitesse de convergence peut alors se faire au cours des itérations.

Nous rencontrerons essentiellement trois vitesses de convergence en quotient : les vitesses de convergence q-linéaire, q-superlinéaire et q-quadratique. Le préfixe « q » utilisé dans ces appellations, qui rappelle le mot « quotient », on l'a dit, est parfois omis.

Convergence q-linéaire

Définition 5.3 (convergence q-linéaire) On dit qu'une suite $\{x_k\} \subseteq \mathbb{E}$ converge *q-linéairement* vers x_* s'il existe une norme $\|\cdot\|$, un scalaire $\tau \in [0, 1[$ et un indice $k_1 \geqslant 1$, tels que pour tout $k \geqslant k_1$ on ait

$$\|x_{k+1} - x_*\| \leqslant \tau \|x_k - x_*\|. \tag{5.5}$$

Le paramètre τ est appelé le *taux de convergence linéaire*. □

Il faut donc que la norme de l'erreur décroisse strictement à chaque itération à partir d'une certaine itération, avec un taux de convergence τ strictement plus petit que 1. Cette propriété dépend du choix de la norme que l'on utilise pour mesurer l'erreur, car l'estimation (5.5) peut être vraie pour une norme et, malgré l'équivalence des normes, peut ne plus être vérifiée avec $\tau < 1$ pour une autre norme.

Le résultat suivant fait le lien entre la convergence q-linéaire et le nombre σ_k de chiffres significatifs corrects des itérés (définition 5.1). Sa démonstration est proposée à l'exercice 5.2.

Proposition 5.4 (convergence q-linéaire en termes de σ_k) *La suite $\{x_k\}_{k\geqslant 1}$ converge q-linéairement vers $x_* \neq 0$ pour une norme $\|\cdot\|$ si, et seulement si, il existe une constante $\sigma > 0$ et un indice $k_1 \geqslant 1$ tels que pour tout $k \geqslant k_1$ on ait*

$$\sigma_{k+1} \geqslant \sigma_k + \sigma,$$

où σ_k est défini avec la norme $\|\cdot\|$.

Il est difficile d'établir un lien entre la convergence linéaire de la suite $\{x_k\}$ et celle de la suite $\{F(x_k)\}$ où la fonction F vérifie (5.2), à cause de la constante C intervenant dans (5.3) et du taux de convergence τ qui doit être strictement inférieur à 1. On trouve la même difficulté pour établir une équivalence entre la convergence linéaire de $\{x_k\}$ et celle des déplacements $s_k := x_{k+1} - x_k$.

En général, on s'attend à ce qu'un algorithme d'optimisation différentiable calcule des suites convergeant plus rapidement que q-linéairement.

Exemple d'algorithme générant des suites q-linéairement convergentes

- L'algorithme du gradient pour minimiser une fonction quadratique strictement convexe (proposition 7.2).

Convergence q-superlinéaire

Définition 5.5 (convergence q-superlinéaire) On dit qu'une suite $\{x_k\} \subseteq \mathbb{E}$ converge *q-superlinéairement* vers x_* si pour tout $\tau > 0$, il existe un indice $k_\tau \geqslant 1$, tels que pour tout $k \geqslant k_\tau$ on ait

$$\|x_{k+1} - x_*\| \leqslant \tau \|x_k - x_*\|.$$

Il revient au même de dire que $\|x_{k+1} - x_*\|/\|x_k - x_*\| \to 0$ ou encore que

$$\|x_{k+1} - x_*\| = o(\|x_k - x_*\|). \qquad \square$$

Cette propriété est indépendante du choix de la norme. Clairement, une suite convergeant q-superlinéairement converge q-linéairement.

Le résultat suivant fait le lien entre la convergence q-superlinéaire et le nombre σ_k de chiffres significatifs corrects des itérés (définition 5.1). Sa démonstration est proposée à l'exercice 5.2.

Proposition 5.6 (convergence q-superlinéaire en termes de σ_k) *La suite $\{x_k\}_{k\geqslant 1}$ converge q-superlinéairement vers $x_* \neq 0$ pour une norme $\|\cdot\|$ si, et seulement si,*

$$\sigma_{k+1} - \sigma_k \to +\infty,$$

où σ_k est défini avec la norme $\|\cdot\|$.

Voici une manière de vérifier numériquement la convergence q-superlinéaire d'une suite par l'intermédiaire d'une fonction s'annulant au point limite. La démonstration de la proposition est proposée à l'exercice 5.3.

Proposition 5.7 (convergence q-superlinéaire en termes *F*) *Soit* $F : \mathbb{E} \to \mathbb{E}$ *une fonction vérifiant* (5.2)*. La suite* $\{x_k\}$ *converge q-superlinéairement vers* x_* *si, et seulement si,*

$$\log \|F(x_{k+1})\| - \log \|F(x_k)\| \to -\infty.$$

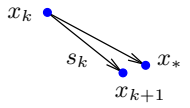
On peut le dire autrement : la suite $\{x_k\}$ converge q-superlinéairement si, et seulement si, le tracé $k \mapsto \log \|F(x_k)\|$ a une « pente » estimée par la différence $\log \|F(x_{k+1})\| - \log \|F(x_k)\|$ qui tend vers $-\infty$.

Pour des suites $\{z_k\}$ et $\{z'_k\}$ dans un espace normé, convergeant vers zéro, on utilisera occasionnellement la notation

$$z_k \sim z'_k \tag{5.6}$$

pour dire qu'il existe une constante $C \geqslant 1$ telle que, pour tout indice k, on a $C^{-1}\|z_k\| \leqslant \|z'_k\| \leqslant C\|z_k\|$, ce que l'on peut aussi écrire $z_k = O(\|z'_k\|)$ et $z'_k = O(\|z_k\|)$. En mots simples : $\{z_k\}$ et $\{z'_k\}$ convergent vers zéro à la même « vitesse ».

Si $\{x_k\}$ converge superlinéairement vers x_*, asymptotiquement, la norme de l'erreur à l'itération suivante $\|x_{k+1} - x_*\|$ est très petite devant celle de l'itération courante $\|x_k - x_*\|$, ce qui implique que le déplacement $s_k := x_{k+1} - x_k$ est proche de $x_* - x_k$ (voir le dessin ci-contre). Ceci a pour conséquence que $(x_k - x_*) \sim s_k$, comme le montre le lemme ci-dessous.



Lemme 5.8 (suites équivalentes) *Si la suite* $\{x_k\}$ *converge superlinéairement vers* x_**, alors* $(x_k - x_*) \sim s_k$*.*

Démonstration. On a

$$s_k = (x_{k+1} - x_*) - (x_k - x_*) = -(x_k - x_*) + o(\|x_k - x_*\|).$$

On en déduit le résultat. □

Cette équivalence entre la suite des erreurs $\{x_k - x_*\}$ et celle des déplacements $\{s_k\}$ permet de montrer que celles-ci convergent superlinéairement vers leur limite respective simultanément.

Proposition 5.9 (convergence q-superlinéaire en termes de s_k)
1) *Si une suite $\{x_k\}$ converge superlinéairement vers x_*, alors la suite des déplacements $\{s_k\}$, définie par (5.4), converge superlinéairement vers zéro.*
2) *Inversement, si, pour une suite donnée $\{x_k\}$, la suite des déplacements $\{s_k\}$ converge superlinéairement vers zéro, alors $\{x_k\}$ est une suite de Cauchy qui converge superlinéairement vers sa limite.*

DÉMONSTRATION. 1) D'après le lemme 5.8, la convergence superlinéaire de x_k vers x_* implique que $s_k \sim (x_k - x_*)$. On déduit alors de $x_{k+1} - x_* = o(\|x_k - x_*\|)$ que $s_{k+1} = o(\|s_k\|)$, qui est la marque de la convergence superlinéaire de s_k vers zéro.

2) On peut supposer que $s_k \neq 0$ pour tout $k \geqslant 1$ (si $s_k = 0$ avec k assez grand, la convergence superlinéaire de $\{s_k\}$ implique alors que $s_i = 0$ pour tout $i \geqslant k$ et donc que la suite $\{x_k\}$ est stationnaire, ce qui implique immédiatement le résultat). Du fait de la convergence superlinéaire de $\{s_k\}$ vers zéro et du fait que l'on s'intéresse au comportement asymptotique des suites, on peut aussi supposer que, pour tout $k \geqslant 1$, on a

$$\varepsilon_k := \sup_{i \geqslant k} \frac{\|s_{i+1}\|}{\|s_i\|} < 1. \tag{5.7}$$

Observons que la suite $\{\varepsilon_k\}$ tend vers zéro en décroissant.

Commençons par montrer que, pour $k \geqslant 1$ et $i \geqslant 1$, on a

$$\|s_{k+i}\| \leqslant \varepsilon_k^i \|s_k\|. \tag{5.8}$$

Fixons $k \geqslant 1$ et montrons l'inégalité par récurrence sur i. Par (5.7), l'inégalité a lieu pour $i = 1$. Supposons maintenant qu'elle ait lieu pour un $i \geqslant 1$ et montrons la pour $i + 1$. Par (5.7), la décroissance de $\{\varepsilon_k\}$ et l'hypothèse de récurrence, nous pouvons conclure

$$\|s_{k+i+1}\| \leqslant \varepsilon_{k+i}\|s_{k+i}\| \leqslant \varepsilon_k \|s_{k+i}\| \leqslant \varepsilon_k^{i+1}\|s_k\|.$$

Montrons à présent que $\{x_k\}$ est une suite de Cauchy, qui converge donc vers une limite que l'on note x_*, et que, pour tout $\varepsilon > 0$, il existe un k_ε tel que, pour tout $k \geqslant k_\varepsilon$, on a

$$\|x_k - x_*\| \leqslant (1 + \varepsilon)\|s_k\|. \tag{5.9}$$

Soit $\varepsilon > 0$. Pour $l > k$ et k suffisamment grand pour que $1/(1 - \varepsilon_k) \leqslant 1 + \varepsilon$, on a

$$\begin{aligned}
\|x_k - x_l\| &= \|\textstyle\sum_{i=0}^{l-k-1} s_{k+i}\| \\
&\leqslant \textstyle\sum_{i=0}^{l-k-1} \|s_{k+i}\| \\
&\leqslant (\textstyle\sum_{i=0}^{l-k-1} \varepsilon_k^i)\|s_k\| \qquad [(5.8)] \\
&\leqslant \tfrac{1}{1-\varepsilon_k}\|s_k\| \qquad [\varepsilon_k < 1] \\
&\leqslant (1 + \varepsilon)\|s_k\| \qquad [1/(1 - \varepsilon_k) \leqslant 1 + \varepsilon].
\end{aligned}$$

Ceci montre que $\{x_k\}$ est une suite de Cauchy, dont la limite est notée x_*. En faisant tendre $l \to \infty$ dans l'inégalité ci-dessus, on obtient (5.9).

Montrons à présent que, pour tout $\varepsilon > 0$, il existe un k_ε tel que, pour tout $k \geqslant k_\varepsilon$, on a

$$\|x_k - x_*\| \geqslant (1-\varepsilon)\|s_k\|. \tag{5.10}$$

Soit $\varepsilon > 0$. Pour $l > k$ et k suffisamment grand pour que $\varepsilon_k/(1-\varepsilon_k) \leqslant \varepsilon$, on a

$$\begin{aligned}
\|x_k - x_l\| &= \|\textstyle\sum_{i=0}^{l-k-1} s_{k+i}\| \\
&\geqslant \|s_k\| - \|\textstyle\sum_{i=1}^{l-k-1} s_{k+i}\| \\
&\geqslant \|s_k\| - \textstyle\sum_{i=1}^{l-k-1} \|s_{k+i}\| \\
&\geqslant (1 - \textstyle\sum_{i=1}^{l-k-1} \varepsilon_k^i)\|s_k\| \qquad [(5.8)] \\
&\geqslant (1 - \tfrac{\varepsilon_k}{1-\varepsilon_k})\|s_k\| \qquad [\varepsilon_k < 1] \\
&\geqslant (1-\varepsilon)\|s_k\| \qquad [\varepsilon_k/(1-\varepsilon_k) \leqslant \varepsilon].
\end{aligned}$$

En faisant tendre $l \to \infty$, on obtient (5.10).

Les inégalités (5.9) et (5.10), avec $\varepsilon \in]0,1[$, montrent que $s_k \sim (x_k - x_*)$. Alors la convergence superlinéaire de $\{s_k\}$ vers zéro, $\|s_{k+1}\| = o(\|s_k\|)$, implique celle de $\{x_k\}$ vers x_*. □

Exemple d'algorithme générant des suites q-superlinéairement convergentes

- Les algorithmes de quasi-Newton en optimisation (proposition **??**) ou pour résoudre un système d'équations non linéaires.

Convergence q-quadratique

Définition 5.10 (convergence q-quadratique) On dit qu'une suite $\{x_k\} \subseteq \mathbb{E}$ converge *q-quadratiquement* vers x_* s'il existe une constante $C \geqslant 0$, telle que pour tout $k \geqslant 1$ on ait

$$\|x_{k+1} - x_*\| \leqslant C\|x_k - x_*\|^2. \qquad \square$$

Le quotient des erreurs successives $\|x_{k+1} - x_*\|/\|x_k - x_*\| \leqslant C\|x_k - x_*\|$ d'une suite quadratiquement convergente tend vers zéro ; une telle suite converge donc q-superlinéairement.

Le résultat suivant fait le lien entre la convergence q-quadratique et le nombre σ_k de chiffres significatifs corrects des itérés (définition 5.1). Sa démonstration est proposée à l'exercice 5.2.

Proposition 5.11 (convergence q-quadratique en termes de σ_k) *La suite $\{x_k\}_{k\geqslant 1}$ converge q-quadratiquement vers $x_* \neq 0$ pour une norme $\|\cdot\|$ si, et seulement si, il existe une constante $C \in \mathbb{R}$ telle que*

$$\sigma_{k+1} \geqslant 2\sigma_k + C,$$

où σ_k est défini avec la norme $\|\cdot\|$. Dans ce cas

$$\liminf_{k\to\infty} \frac{\sigma_{k+1}}{\sigma_k} \geqslant 2. \tag{5.11}$$

Remarque 5.12 (odublement du nombre de chiffres significatifs corrects à chaque itération) De manière imagée, on peut exprimer verbalement l'inégalité (5.11) en disant qu'« une suite $\{x_k\}$ convergeant q-quadratiquement a des éléments x_k dont le nombre de chiffres significatifs corrects double à chaque itération *asymptotiquement* ». C'est une convergence très rapide puisque l'on atteint alors très vite le nombre maximal de chiffres significatifs qu'un ordinateur donné peut représenter (15..16 pour des nombres en double précision pour la *norme IEEE 754*). □

Voici à présent deux manières de vérifier numériquement la convergence q-quadratique d'une suite, sans connaître le point limite x_*. La première méthode (proposition 5.13) utilise une fonction s'annulant au point limite et vérifiant (5.2), ce qui requiert l'existence d'une telle fonction (voir la proposition 5.2). La seconde méthode (proposition 5.14) utilise la suite des déplacements $\{s_k\}$, où $s_k := x_{k+1} - x_k$. Les démonstrations de ces propositions sont proposées aux exercices 5.3 et 5.4.

Proposition 5.13 (convergence q-quadratique en termes F) *Soit $F : \mathbb{E} \to \mathbb{E}$ une fonction vérifiant (5.2). La suite $\{x_k\}$ converge q-quadratiquement vers x_* si, et seulement si, il existe une constante $C \in \mathbb{R}$ telle que*

$$\log \|F(x_{k+1}\| \leqslant 2 \log \|F(x_k)\| + C.$$

Dans ce cas

$$\liminf_{k\to\infty} \frac{\log \|F(x_{k+1})\|}{\log \|F(x_k)\|} \geqslant 2.$$

Proposition 5.14 (convergence q-quadratique en termes de s_k)
1) *Si une suite $\{x_k\}$ converge quadratiquement vers x_*, alors la suite des déplacements $\{s_k\}$, définie par (5.4), converge quadratiquement vers zéro.*
2) *Inversement, si, pour une suite donnée $\{x_k\}$, la suite des déplacements $\{s_k\}$ converge quadratiquement vers zéro, alors $\{x_k\}$ est une suite de Cauchy qui converge quadratiquement vers sa limite.*

Exemple d'algorithme générant des suites q-quadratiquement convergentes

- L'algorithme de Newton en optimisation ou pour résoudre un système d'équations non linéaires (théorèmes 9.2 et 9.3).

Typiquement, ce sont donc les algorithmes qui procèdent par linéarisation des équations à résoudre qui génèrent des suites convergeant q-quadratiquement.

Convergence avec q-ordre plus élevé

Définition 5.15 (convergence avec q-ordre) On dit qu'une suite $\{x_k\} \subseteq \mathbb{E}$ converge avec un *q-ordre* $\alpha \in \mathbb{R}_{++}$ vers x_* s'il existe une constante $C \geqslant 0$, telle que pour tout $k \geqslant 1$ on ait

$$\|x_{k+1} - x_*\| \leqslant C\|x_k - x_*\|^\alpha.$$

On dit que la convergence est *q-cubique* si $\alpha = 3$, qu'elle est *q-quartique* si $\alpha = 4$ et qu'elle est *q-quintique* si $\alpha = 5$. □

Clairement, la convergence avec un q-ordre α implique la convergence avec un q-ordre $\alpha' \in]0, \alpha]$.

Une vitesse de convergence avec un q-ordre $\alpha > 2$ est garantie par certains algorithmes, mais ceux-ci ne se rencontrent pas souvent. D'ailleurs, on cherche rarement à construire un algorithme assurant une telle vitesse de convergence à ses suites, parce que la convergence q-quadratique ($\alpha = 2$) permet d'avoir une solution très précise en très peu d'itérations (remarque 5.12) et requiert déjà une itération qui peut être couteuse en place mémoire et temps de calcul lorsque la dimension du problème est grande.

5.1.2 Vitesses de convergence en racine ▲ ⊖

On dit que $\{x_k\}$ converge *r-linéairement* vers x_* s'il existe un scalaire $\tau \in [0, 1[$ tel que

$$\limsup_{k\to\infty} \|x_k - x_*\|^{\frac{1}{k}} \leqslant \tau. \tag{5.12}$$

Le scalaire τ est appelé le *taux de convergence* r-linéaire.

Contrairement à la convergence q-linéaire, la notion de convergence r-linéaire ne dépend pas de la norme utilisée pour mesurer l'erreur. En effet, si $|\cdot|$ est une autre norme, il existe une constante $C > 0$ telle que $C|\cdot| \leqslant \|\cdot\|$ (équivalence des normes). Comme $C^{1/k} \to 1$ lorsque $k \to \infty$, (5.12) implique que l'on a aussi $\limsup_{k\to\infty} |x_k - x_*|^{1/k} \leqslant \tau$.

D'autre part, une suite convergeant q-linéairement converge r-linéairement, comme cela se voit sur l'estimation $\|x_k - x_*\| \leqslant r^{k-k_1}\|x_{k_1} - x_*\|$ que l'on a pour les indices assez grand ($> k_1$) d'une suite q-linéairement convergente. Nous avons donc introduit une notion plus faible que la convergence q-linéaire. En fait la convergence r-linéaire est liée à la convergence q-linéaire d'une suite majorant la norme de l'erreur $\|x_k - x_*\|$. C'est parce que l'on peut parfois montrer la convergence q-linéaire d'un majorant de l'erreur que cette notion est utile.

Proposition 5.16 *Soit $\{x_k\}$ une suite convergeant vers x_*. La convergence est r-linéaire si, et seulement si, il existe une suite $\{\beta_k\}$ convergeant q-linéairement vers 0 telle que $\|x_k - x_*\| \leqslant \beta_k$ pour tout $k \geqslant 1$.*

Démonstration. Supposons que $\{x_k\}$ vérifie (5.12) et choisissons $r_1 \in]r, 1[$. Alors il existe un indice k_1 tel que pour tout $k \geqslant k_1$: $\|x_k - x_*\|^{1/k} \leqslant r_1$. En définissant $\beta_k := \|x_k - x_*\|$ si $k < k_1$ et $\beta_k := r_1^k$ si $k \geqslant k_1$, on a $\|x_k - x_*\| \leqslant \beta_k$ et la suite $\{\beta_k\}$ converge q-linéairement vers 0.

Inversement, si $\|x_k - x_*\| \leqslant \beta_k$, avec $\{\beta_k\}$ convergeant q-linéairement vers 0, on a pour k plus grand qu'un indice k_1 et pour un nombre $r \in [0, 1[$:

$$\|x_k - x_*\|^{\frac{1}{k}} \leqslant \beta_k^{\frac{1}{k}} \leqslant r^{\frac{k-k_1}{k}} \beta_{k_1}^{\frac{1}{k}} \to r < 1.$$

□

5.2 Notions de complexité ▲ ⊖

On peut trouver la solution de certains problèmes d'optimisation, ou une solution à une précision $\varepsilon > 0$ donnée, en un nombre fini d'étapes. Il en va ainsi des problèmes d'optimisation linéaire ou plus généralement d'optimisation quadratique convexe et même de certains problèmes d'optimisation convexe ou non convexe. Dans ce cas, la notion de vitesse de convergence introduite à la section 5.1 n'est plus très pertinente, puisque la suite générée est stationnaire à partir d'un certain indice. Pour apprécier la qualité des algorithmes de résolution de tels problèmes on préfère compter le nombre d'étapes qu'ils requièrent. Une étape de l'algorithme peut être une itération (concept un peu flou), une opération arithmétique, une opération sur un bit, *etc.* Il faudra toujours bien préciser cet unité élémentaire du calcul. La *théorie de la complexité* s'intéresse à ces questions. Dans cette section, nous passons en revue les notions de cette théorie les plus souvent rencontrées en optimisation. Des présentations allant plus en profondeur sont données par Garey et Johnson [213] et Papadimitriou et Steiglitz [427]. Nous nous plaçons ici dans l'esprit du livre de Vavasis [531] qui présente cette théorie en vue de son application à l'optimisation.

5.2.1 Famille de problèmes, machine de Turing

Dans la théorie de la complexité, on regroupe les problèmes en familles dans le but de pouvoir comparer l'efficacité des algorithmes en fonction de la « taille » des problèmes d'une même famille. On parlera par exemple de la *famille* OL *des problèmes d'optimisation linéaire* (ensemble des problèmes qui consistent à minimiser une fonction linéaire sur un polyèdre convexe, voir les chapitres 15 et 16), de la *famille* OQ *des problèmes d'optimisation quadratique* (ensemble des problèmes qui consistent à minimiser une fonction quadratique sur un polyèdre convexe, voir le chapitre **??**), *etc.* Un problème d'une famille est spécifié par un jeu de données, dont la structure dépend de la famille considérée et dont la représentation ou l'*encodage* doit être précisé.

Étant donné la diversité des problèmes et la variété des questions que l'on peut se poser sur un problème donné, les spécialistes de la théorie de la complexité ont ressenti le besoin de décrire plus formellement ce qu'est une famille de problèmes. Un problème d'une famille doit pouvoir être décrit par un nombre fini de caractères d'un alphabet donné. Un problème ainsi décrit est appelé une *instance* de la famille de problèmes. De manière formelle, une *famille de problèmes* est alors une application

$$F : I \to S$$

entre la collection I des instances de la famille et un certain ensemble S qui pourra dépendre de la famille considérée et de ce que l'on considère comme une solution du problème. En réalité, « évaluer F en i » signifie le plus souvent « résoudre le problème i de la famille ». Considérons par exemple, la famille OL des problèmes d'optimisation linéaire.

Famille 5.17 (OL) On se donne deux entiers $n \geqslant 1$ et $m \geqslant 0$, $c \in \mathbb{Q}^n$, $A \in \mathbb{Q}^{m \times n}$ et $b \in \mathbb{Q}^m$. On considère le problème d'optimisation

$$\begin{cases} \inf\ c^{\mathsf{T}}x \\ Ax = b \\ x \geqslant 0. \end{cases}$$

Une instance i de la famille OL pourra prendre la forme d'un quintuplet $(n, m, c, A, b) \in \mathbb{N}^* \times \mathbb{N} \times \mathbb{Q}^n \times \mathbb{Q}^{mn} \times \mathbb{Q}^m$. L'ensemble S pourra être $\mathbb{Q} \cup \{-\infty, +\infty\}$, si l'on s'intéresse à la valeur optimale $F(i)$ du problème et au fait qu'il peut ne pas être réalisable ($F(i) = +\infty$) ou ne pas être borné ($F(i) = -\infty$). Il pourra aussi être $\mathbb{Q}^n \cup \{-\infty, +\infty\}$, si l'on s'intéresse à la solution x du problème et au fait que ce problème peut ne pas être réalisable ou borné. □

Dans la famille OL, on a choisi de décrire les problèmes en prenant l'ensemble des nombres rationnels $\mathbb{Q}$ comme alphabet. On aurait aussi pu choisir l'ensemble $\{0, 1\}$ des bits représentant ces rationnels. Les nombres réels $\mathbb{R}$ sont parfois utilisés [59], mais il n'est pas clair que l'on puisse alors bien faire la distinction entre la minimisation de problèmes d'optimisation quadratiques convexes et non convexes [531]. Quant aux nombres flottants, utilisés par les ordinateurs, ils semblent peu adaptés à l'étude de la complexité pour des raisons qui sont discutées dans [531 ; page 33 et chapitre 3].

Plus un problème est de grande dimension, plus il faut de caractères pour le décrire. Comme on est particulièrement intéressé par l'influence de la dimension d'un problème sur le nombre d'opérations à effectuer pour le résoudre, la longueur de l'instance jouera un rôle important. On la note

$$L(i) \quad \text{ou} \quad L,$$

selon qu'il est important ou pas de préciser l'instance considérée.

On dira qu'une famille $F : I \to S$ est formée de *problèmes de décision* si S est formé de deux éléments, traditionnellement dénommés `vrai` et `faux`. La théorie de la complexité traite principalement de ces familles de problèmes. Un problème d'optimisation « $\inf\{f(x) : x \in X\}$ » n'est cependant pas un problème de décision. Pour ce ramener à cette notion, on considère parfois la *version décisionnelle* d'un problème d'optimisation : étant donnés f, X et un seuil σ, il s'agit de déterminer si $\inf\{f(x) : x \in X\} \leqslant \sigma$.

Pour parler de la complexité d'un problème calculatoire et donc compter le nombre d'opérations à réaliser pour le résoudre, il faut spécifier la machine effectuant les calculs en précisant les opérations qui peuvent y être exécutées. Le nombre d'opérations à effectuer pour évaluer $F(i)$ sera d'autant plus grand que le nombre d'opérations licites est réduit. Par exemple, on peut considérer que l'addition de deux entiers est une unique opération ou que ce sont les opérations sur les bits représentant ces entiers qui sont les opérations élémentaires. Dans le premier cas, le nombre d'opérations élémentaires pour réaliser une addition est égal à un; dans le second cas, il dépendra de la grandeur ou longueur des entiers.

On a imaginé différents modèles de machines, mais celui qui semble le mieux refléter les capacités des ordinateurs actuels pour résoudre les problèmes que l'on se pose est, selon les spécialistes de ces questions, celui de la *Machine de Turing* [535 ; 2009]. Dans cette brève introduction, nous n'aurons jamais besoin de savoir ce que peut faire exactement une telle machine, ni quelles sont ses opérations licites, si bien que nous renvoyons le lecteur aux ouvrages cités au début de cette section pour une description précise de ce calculateur. On peut toutefois le décrire approximativement.

Il prend en entrée la description de l'instance i du problème à résoudre et il fournit en sortie la réponse $F(i)$. Le calculateur dispose d'une *mémoire linéaire* et d'un *pointeur* adressant une case-mémoire. Il agit en fonction de son *état*, qui fait partie d'une liste *finie*, et du *symbole* de la case-mémoire adressée par le pointeur. Il y a une *liste finie de règles*, définissant ce que le calculateur doit faire en fonction de chaque couple état-symbole possible, ce qui signifie que la machine est *déterministe*. Les actions du calculateur comprennent la modification du contenu de la case-mémoire sous le pointeur, le déplacement du pointeur d'un nombre fini de positions, la modification de ses états, *etc.*

5.2.2 Classes P et NP

On dit qu'une famille de problèmes $F : I \to S$ peut être *évaluée en temps polynomial* pour une machine de Turing de référence, si celle-ci peut évaluer cette fonction en toute instance $i \in I$, et que cette évaluation se fait en un nombre fini d'opérations qui est majoré par une fonction polynomiale de $L(i)$.

Définition 5.18 (classe P, problème polynomial) On dit qu'une famille de problèmes de décision $F : I \to \{\texttt{vrai}, \texttt{faux}\}$ est dans P, on dit aussi que ses problèmes sont *polynomiaux*, si F peut être évaluée en temps polynomial (pour une machine de Turing de référence). □

Beaucoup de familles de problèmes sont dans P et on peut voir là une première raison d'introduire cette classe. Très souvent le degré du polynôme est faible, si bien que ces problèmes peuvent être résolus pour des dimensions (ou plus précisément, des longueurs d'instance L) assez élevées. Les propriétés des polynômes rendent aussi cette notion très souple. Ainsi, parce qu'une composition de polynômes est un polynôme, un algorithme sera polynomial s'il se décompose en un nombre polynomial de modules pouvant chacun être exécuté en temps polynomial de degré constant.

Exemples 5.19 *Familles de problèmes* P : OL (optimisation linéaire, voir le chapitre 16), OQC (optimisation quadratique convexe). □

Pour un alphabet $\mathcal{A}$, on note $\mathcal{A}^*$ l'ensemble de toutes les chaînes finies formées de caractères de $\mathcal{A}$.

Définition 5.20 (classe NP) On dit qu'une famille de problèmes de décision $F : I \to \{\texttt{vrai}, \texttt{faux}\}$ est dans NP, on dit aussi que ses problèmes sont *NP*, s'il existe un polynôme p, un alphabet fini $\mathcal{A}$ et une fonction $G : I \times \mathcal{A}^* \to \{\texttt{vrai}, \texttt{faux}\}$ qui peut être évaluée en temps polynomial, tels que

(NP$_1$) $\forall i \in I$ tel que $F(i) = \texttt{vrai}$, $\exists j \in \mathcal{A}^*$ tel que $L(j) \leqslant p(L(i))$ et $G(i, j) = \texttt{vrai}$,
(NP$_2$) $\forall i \in I$ tel que $F(i) = \texttt{faux}$, $\forall j \in \mathcal{A}^*$, on a $G(i, j) = \texttt{faux}$. □

Cette définition compliquée mérite quelques éclaircissements.

1. On ne demande pas ici que F soit polynomial (F serait alors dans la classe P), mais que G le soit.

2. On peut interpréter l'évaluation de $F(i)$ comme la recherche d'une solution de l'instance $i \in I$, alors que l'évaluation de $G(i,j)$ peut être interprétée comme une vérification que $j \in \mathcal{A}^*$ est une solution de i : si i a une solution (c.-à-d., $F(i) = \texttt{vrai}$), disons $j \in \mathcal{A}^*$ (avec la condition $L(j) \leqslant p(L(i))$, de manière à ce que l'on ne puisse pas prendre pour j, hormis cas triviaux, la réunion de tous les candidats-solutions possibles), on peut vérifier en temps polynomial qu'il en est ainsi (c.-à-d., $G(i,j) = \texttt{vrai}$); si i n'a pas de solution (c.-à-d., $F(i) = \texttt{faux}$), on peut vérifier en temps polynomial qu'un candidat-solution arbitraire $j \in \mathcal{A}^*$ n'est en fait pas une solution (c.-à-d., $G(i,j) = \texttt{faux}$). De manière approximative (en négligeant (NP_2) en particulier), on peut dire qu'on ne demande pas que les instances des familles de la classe NP soient résolubles en temps polynomial, mais que l'on puisse vérifier en temps polynomial qu'une solution en est effectivement une (c'est (NP_1), cette description passe aussi sous silence la condition $L(j) \leqslant p(L(i))$).
3. On a
$$\mathsf{P} \subseteq \mathsf{NP}.$$
En effet, si F est polynomial, on peut prendre pour $\mathcal{A}$ un alphabet fini quelconque et définir G par $G(i,j) = F(i)$ pour tout $(i,j) \in I \times \mathcal{A}^*$.
4. On ne sait pas si $\mathsf{P} = \mathsf{NP}$ (beaucoup pense aujourd'hui que $\mathsf{P} \neq \mathsf{NP}$). Beaucoup de familles de problèmes sont dans NP, sans que l'on sache si elles sont dans P. Cela justifie l'introduction de cette notion.

La définition de la classe NP traite des familles de problèmes de décision. Il ne semble pas simple de l'étendre aux problèmes qui ne le soient pas.

5.2.3 Problèmes NP-complets et NP-ardus

On dit qu'une famille de problèmes de décision $F_1 : I_1 \to \{\texttt{vrai}, \texttt{faux}\}$ est *polynomialement réductible* en une autre famille de problèmes de décision $F_2 : I_2 \to \{\texttt{vrai}, \texttt{faux}\}$, s'il existe une fonction $\rho : I_1 \to I_2$ transformant *toutes* les instances de I_1 en instances de I_2 avec les deux propriétés suivantes :

(PR_1) $\forall i_i \in I_1$, $\rho(i_1)$ peut être évaluée en temps polynomial,
(PR_2) $\forall i_i \in I_1$, $F_1(i_1) = \texttt{vrai}$ si, et seulement si, $F_2(\rho(i_1)) = \texttt{vrai}$.

L'opérateur ρ est appelé une *réduction*. On peut montrer que cette relation est transitive : si F_1 est polynomialement réductible en F_2 et si F_2 est polynomialement réductible en F_3, alors F_1 est polynomialement réductible en F_3. D'autre part, il est clair que si F_1 est polynomialement réductible en F_2 et si $F_2 \in \mathsf{P}$, alors $F_1 \in \mathsf{P}$.

Définition 5.21 (classe NPC, problème NP-complet) On dit qu'une famille de problèmes de décision $F : I \to \{\texttt{vrai}, \texttt{faux}\}$ est dans NPC, on dit aussi que ses problèmes sont *NP-complets*, si elle est dans NP et si toute famille de problèmes dans NP est polynomialement réductible en F. □

En quelque sorte, c'est la sous-classe des familles de problèmes « les plus difficiles » de NP. Si on pouvait montrer qu'une famille de problèmes de NPC est dans P, alors on aurait $\mathsf{P} = \mathsf{NP}$. D'autre part, grâce à la relation de transitivité énoncée ci-dessus,

$$\left.\begin{array}{r} F_1 \in \mathsf{NPC} \\ F_2 \in \mathsf{NP} \\ F_1 \text{ polynomialement réductible en } F_2 \end{array}\right\} \quad \Longrightarrow \quad F_2 \in \mathsf{NPC}.$$

Pour montrer qu'une famille F est dans NPC, on utilise souvent cette dernière implication : on montre que $F \in \mathsf{NP}$ et on montre qu'une famille de NPC est polynomialement réductible en F. Il faut pour cela connaître des problèmes NPC. En voici quelques-uns.

Exemples 5.22 *Familles de problèmes* NP*-complets* : une version décisionnelle de OQ (proposition **??**), CLIQUE, SOUS-SOMME (famille 5.24). □

Famille 5.23 (SAT) Un *littéral* est une variable booléenne v (pouvant prendre la valeur 0 ou 1) ou sa négation (notée $\neg v := 1 - v$). Une *clause* est un OU (noté $\vee$; $v_1 \vee v_2 = 1$ sauf si $v_1 = v_2 = 0$) entre un nombre fini de littéraux (par exemple $v_1 \vee \neg v_2$). Enfin, une *forme normale conjonctive* est un ET (noté $\wedge$; $v_1 \wedge v_2 = 1$ si, et seulement si, $v_1 = v_2 = 1$) entre un nombre fini de clauses; par exemple

$$(v_1) \wedge (v_1 \vee \neg v_2 \vee v_3) \wedge (\neg v_1 \vee \neg v_3).$$

Un problème SAT consiste à déterminer s'il existe une affectation des variables booléennes v_i d'une forme normale conjonctive qui lui donne la valeur 1. Il s'agit d'une famille de problèmes NP*-complets*. □

Famille 5.24 (SOUS-SOMME) On se donne un nombre fini $n \geqslant 1$ d'entiers $a_1, \ldots, a_n$, un entier b et on se pose la question de savoir si l'on peut trouver un sous-ensemble d'indices $I \subseteq \{1, \ldots, n\}$ tel que

$$\sum_{i \in I} a_i = b.$$

Il s'agit donc d'un problème de décision. □

Beaucoup de problèmes de calcul scientifique, en particulier les problèmes d'optimisation, ne sont pas des problèmes de décision. Afin d'éviter de passer par une version décisionnelle de ces problèmes, qui est parfois éloignée du problème que l'on se pose au départ, on introduit des notions de complexité qui leurs sont propres, comme la suivante.

Définition 5.25 (classe NP-ardu, problème NP-ardu) On dit qu'une famille de problèmes $F : I \to S$ est dans NP-ardu, on dit aussi que ses problèmes sont *NP-ardus*, si une (ou n'importe quelle) famille de problèmes de NPC peut être évaluée en temps polynomial par une machine de Turing utilisant F comme un oracle (c'est-à-dire que cette machine est supposée évaluer F en une étape). □

Par conséquent, une famille F de NP-ardu doit être formée de problèmes suffisamment difficiles à résoudre pour que, lorsque évaluer $F(i)$ devient une opération élémentaire du calculateur, les problèmes de NPC deviennent polynomiaux pour de tels calculateurs. Évidemment, on a

$$\mathsf{NPC} \subseteq \mathsf{NP\text{-}ardu}$$

puisque si $F \in \mathsf{NPC}$, on peut évaluer F (un problème de NPC) en une opération (donc en temps polynomial) en utilisant F comme oracle.

Exemple 5.26 *Famille de problèmes* NP-*ardus* : OQ (proposition **??**). □

Nous avons représenté à la figure 5.1 les liens entre les différentes classes de familles

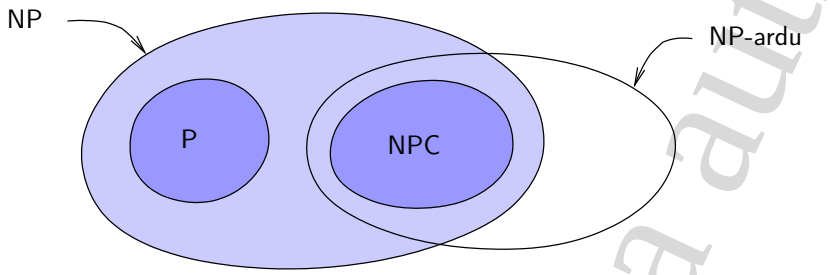


Fig. 5.1. Quelques classes de familles de problèmes si P ≠ NP

de problèmes présentées dans cette section, en supposant que P ≠ NP (ce qui peut être remis en question dans l'avenir). Si P = NP, les trois classes P, NP et NPC sont confondues.

5.3 Conditionnement d'un problème d'optimisation ▲ ⊖

5.3.1 Notions de conditionnement

Le calcul numérique des solutions d'un problème (d'optimisation ou pas) se fait sur des calculateurs qui utilisent des nombres flottants, avec une précision finie donc. Le *conditionnement* d'un problème est un indicateur de l'effet de cette précision finie sur le résultat. On cherche par cette mesure à savoir si une petite perturbation des données (celle due à cette présicion finie par exemple) peut avoir une grande incidence sur la ou les solutions. Cette incidence dépendra du problème, mais peut aussi dépendre de l'algorithme qui le résout. On comprend alors pourquoi il n'y a pas une unique définition du conditionnement, ou que l'on fait parfois allusion à celui-ci de manière peu précise, ou encore que celui-ci sert de bouc émissaire permettant de justifier le mauvais comportement d'une approche algorithmique !

Résoudre un problème d'optimisation quadratique convexe sans contrainte revient à résoudre sa condition d'optimalité qui est un système linéaire (chapitre 8). Le conditionnement d'un tel problème d'optimisation est, par définition, celui défini pour un système linéaire $Ax = b$. L'effet d'une perturbation de b sur la solution x est estimé par la proposition suivante.

Proposition 5.27 (conditionnement d'un système linéaire) *Soit* $\|\cdot\|$ *une norme matricielle subordonnée à une norme vectorielle notée de la même manière*

re. Si A est inversible, $b \neq 0$, $x = A^{-1}b$ et $x' = A^{-1}b'$, alors

$$\frac{\|x' - x\|}{\|x\|} \leqslant \|A\| \, \|A^{-1}\| \, \frac{\|b' - b\|}{\|b\|}.$$

DÉMONSTRATION. Clairement $x' - x = A^{-1}(b' - b)$, si bien que $\|x' - x\| \leqslant \|A^{-1}\| \, \|b' - b\|$. On obtient le résultat en utilisant l'inégalité $\|b\| \leqslant \|A\| \, \|x\|$. □

Le scalaire $\|A\| \, \|A^{-1}\|$ permet donc d'avoir une estimation de l'erreur *relative* commise sur x à partir de l'erreur relative sur b. On le prend comme définition du conditionnement de A.

Définition 5.28 (conditionnement d'une matrice) *Le conditionnement d'une matrice inversible A pour une norme matricielle $\|\cdot\|$ est le nombre*

$$\kappa(A) := \|A\| \, \|A^{-1}\|.$$

On note $\kappa_p(A)$ le conditionnement de A pour la norme matricielle ℓ_p.

Si $\|\cdot\|$ est subordonnée à une norme vectorielle, $\kappa(A) \geqslant 1$ (en effet $1 = \|I\| = \|AA^{-1}\| \leqslant \|A\| \, \|A^{-1}\|$).

C'est la même notion que pour la résolution d'un système linéaire. La définir comme distance à l'ensemble des problèmes « singuliers ». Par exemple, Kahan [317 ; 1966] montre que le conditionnement ℓ_p mesure la distance relative en norme ℓ_p à l'ensemble des matrices singulières :

$$\kappa_p(A) = \min_{X \text{ singular}} \frac{\|X - A\|_p}{\|A\|_p}.$$

On appelle *préconditionnement*, toute méthode destinée à améliorer le conditionnement du problème. En général, on transforme le problème en un problème équivalent dont le conditionnement est meilleur.

Noter ce qu'en dit Moré [400 ; 1983; Section 2: scaling and preconditioning]. Dans N et qN, noter que ces algorithmes sont invariants par changement de variables, localement.

5.3.2 Préconditionnement par changement de variables

5.3.3 Préconditionnement par changement de produit scalaire

5.4 Calcul de dérivées par état adjoint ⊖

La méthode de l'état adjoint est une technique souvent utilisée pour calculer les dérivées d'une fonction dépendant *implicitement* des variables par rapport auxquelles on veut la dériver. Elle permet d'éviter le calcul coûteux de la dérivée de la fonction implicite et est d'une utilisation constante dans les problèmes de commande

optimale [356, 369]. Nous allons dans un premier temps donner un cadre formel au problème que nous nous posons, ainsi que des exemples de problèmes d'optimisation où cette technique peut être utile (section 5.4.1). À la section 5.4.2, nous montrons comment l'état adjoint peut être utilisé pour calculer un gradient et ceci est illustré sur des problèmes de commande optimale à la section 5.4.3. Enfin, le calcul de produits hessienne-vecteur par état adjoint est abordé à la section 5.4.4.

5.4.1 Position du problème

Soient $\mathbb{Y}$, $\mathbb{U}$ et $\mathbb{Z}$ trois espaces vectoriels et

$$F : \mathbb{Y} \times \mathbb{U} \to \mathbb{Z} : (y, u) \mapsto F(y, u)$$

une fonction régulière utilisée pour décrire un système par ce que l'on appelle son *équation d'état*

$$F(y, u) = 0. \tag{5.13}$$

Cela peut être l'équation d'équilibre d'un système statique ou l'équation d'évolution d'un modèle dynamique. Dans le cadre des problèmes de commande optimale, les variables u sont appelées *variables de commande* du système et les variables y sont appelées *variables d'état* du système.

Ce qui distingue y et u est le rôle que jouent ces variables dans l'équation d'état. Pour une valeur donnée aux variables de commande u, on suppose que l'équation (5.13) détermine l'état y du système. Ceci sera certainement vrai, localement, dans le voisinage d'un couple état-commande (y_0, u_0) vérifiant (5.13), si F est C^1 dans un voisinage de (y_0, u_0) et si la jacobienne de F en (y_0, u_0) par rapport à y

$$F'_y(y_0, u_0) \text{ est inversible.} \tag{5.14}$$

En effet, on sait alors, en vertu du théorème des fonctions implicites (théorème C.14), qu'il existe une unique *fonction implicite*

$$u \in U_0 \mapsto y(u) \in Y_0 \tag{5.15}$$

définie dans un voisinage U_0 de u_0 et à valeurs dans un voisinage Y_0 de y_0. Celle-ci vérifie

$$\begin{cases} y(u_0) = y_0 \\ F(y(u), u) = 0, \quad \forall u \in U_0. \end{cases} \tag{5.16}$$

Cette fonction implicite décrit l'état $y(u)$ du système lorsque la commande u varie dans U_0.

Supposons à présent que l'on donne une fonction scalaire φ dépendant de y et de u :

$$\varphi : \mathbb{Y} \times \mathbb{U} \to \mathbb{R} : (y, u) \mapsto \varphi(y, u).$$

Si y est fonction implicite de u pour l'équation d'état (5.13), on peut considérer φ comme une fonction de u seul, ou plus précisément considérer la fonction $\psi : U_0 \to \mathbb{R}$ définie par

$$\psi(u) = \varphi(y(u), u).$$

Le problème que l'on se pose est de calculer, *de manière efficace*, le gradient de ψ par rapport à u.

Commençons par calculer les dérivées directionnelles de ψ. Si $v \in \mathbb{U}$, on a

$$\psi'(u) \cdot v = \varphi'_y(y(u), u) \cdot y'(u) \cdot v + \varphi'_u(y(u), u) \cdot v. \tag{5.17}$$

Donnons nous un produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle$ sur $\mathbb{U}$ pour pouvoir calculer le gradient de ψ. Nous aurons également besoin d'un produit scalaire sur $\mathbb{Y}$ que l'on notera de la même manière. On note alors A^* l'adjoint d'un opérateur linéaire $A \in \mathcal{L}(\mathbb{U}, \mathbb{Y})$ pour ces produits scalaires. Avec $y = y(u)$, on a

$$\nabla\psi(u) = y'(u)^* \nabla_y \varphi(y, u) + \nabla_u \varphi(y, u).$$

Si cette formule contenait $y'(u)$ au lieu de $y'(u)^*$, il s'agirait simplement d'évaluer une dérivée directionnelle de y, ce qui n'est pas une opération coûteuse : si la direction est w, $y'(u) \cdot w$ s'obtient en résolvant un seul système linéaire

$$F'_y(y, u)\,(y'(u) \cdot w) = -F'_u(y, u) \cdot w.$$

Mais avec $y'(u)^*$, il semble bien qu'il faille évaluer $y'(u)$ complètement, ce qui demande a priori le calcul de $\dim \mathbb{U}$ dérivées directionnelles ou encore de $\dim \mathbb{U}$ systèmes linéaires :

$$F'_y(y, u) y'(u) = -F'_u(y, u). \tag{5.18}$$

La méthode de l'état adjoint que nous présentons ci-après permet d'éviter ces $\dim \mathbb{U}$ résolutions. La présence de l'adjoint d'un opérateur de dérivation montre en fait qu'il s'agit d'une « dérivation cotangente », situation à laquelle la méthode de l'état adjoint est bien adaptée.

Avant cela donnons deux exemples dans le domaine de l'optimisation où cette technique peut être utilisée.

Optimisation avec contraintes d'égalité

Supposons que l'on cherche à résoudre le problème d'optimisation sous contrainte d'égalité suivant

$$\begin{cases} \min f(x) \\ F(x) = 0, \end{cases}$$

où x se partitionne en $x = (y, u)$ et $F'_y(y, u)$ est inversible. L'approche est particulièrement efficace lorsque F est linéaire en y, puisque dans ce cas l'évaluation de la fonction implicite $u \mapsto y(u)$ peut se faire en résolvant un unique système linéaire.

Dans ce cas, il est possible et souvent préférable de remplacer le problème avec contraintes d'égalité en x ci-dessus par le problème en u sans contrainte équivalent

$$\min_u f(y(u), u),$$

où $y(u)$ est la fonction implicite donnée par l'équation d'état $F(y, u) = 0$. Ce problème est en effet d'une dimension ($\dim \mathbb{U}$) qui peut être beaucoup plus petite que celle du problème original ($\dim \mathbb{Y} + \dim \mathbb{U}$).

Lors de la résolution numérique de ce problème, le calcul du gradient de $u \mapsto \psi(u) = f(y(u), u)$ se fera sans difficulté par la technique de l'état adjoint (avec $\varphi = f$) si le calcul de l'état $y(u)$ associé à une commande u est aisé, ce qui est souvent le cas lorsque F est linéaire en y. Si F n'est pas linéaire en y, il sera souvent nécessaire d'utiliser un processus itératif pour calculer $y(u)$, si bien que la technique de l'état adjoint s'impose moins.

Optimisation avec contraintes d'égalité et d'inégalité

La même idée peut être utilisée si l'on a en plus des contraintes d'inégalité *en petit nombre* :

$$\begin{cases} \min f(x) \\ F(x) = 0 \\ c(x) \leqslant 0, \end{cases}$$

où c est à valeurs vectorielles. On suppose toujours que x se partitionne en $x = (y, u)$ et que F'_y est inversible. Ici aussi on aura intérêt à ce que F soit linéaire en y.

Dans ce cas également, il pourra être préférable de remplacer le problème original par le problème équivalent en u seulement :

$$\begin{cases} \min f(y(u), u) \\ c(y(u), u) \leqslant 0. \end{cases}$$

Les gradients de $u \mapsto f(y(u), u)$ et des $u \mapsto c_i(y(u), u)$ se calculeront par la technique de l'état adjoint (avec $\varphi = f$ ou un des c_i), d'où la nécessité de ne pas avoir trop de contraintes. Il n'est pas nécessaire que c soit linéaire en y.

5.4.2 Calcul de gradients

Étant donné l'importance pratique de cette méthode, très simple, nous donnons deux approches permettant de déduire les formules. La première est la plus rapide dans ce cadre formel, mais fait intervenir l'expression de la dérivée de la fonction implicite donnée par (5.18), qu'il n'est pas toujours aisé d'écrire. Celle-ci n'est pas nécessaire dans la seconde approche, qui s'avère souvent la plus utile dans les applications.

Calcul direct

On remplace dans (5.17) la valeur de $y'(u)$ donnée par (5.18), à savoir

$$y'(u) = -F'_y(y, u)^{-1} F'_u(y, u).$$

Ceci donne

$$\psi'(u) \cdot v = \varphi'_y(y(u), u) \cdot \left(-F'_y(y, u)^{-1} F'_u(y, u) \cdot v \right) + \varphi'_u(y(u), u) \cdot v.$$

Avec le produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle$ supposé donné et en simplifiant les notations par $y \equiv y(u)$, cette relation s'écrit aussi

$$\begin{aligned} \langle \nabla\psi(u), v \rangle &= -\langle \nabla_y \varphi(y, u), F'_y(y, u)^{-1} F'_u(y, u) \cdot v \rangle + \langle \nabla_u \varphi(y, u), v \rangle \\ &= -\langle F'_u(y, u)^* \left(F'_y(y, u)^{-1} \right)^* \nabla_y \varphi(y, u), v \rangle + \langle \nabla_u \varphi(y, u), v \rangle \\ &= \langle F'_u(y, u)^* p, v \rangle + \langle \nabla_u \varphi(y, u), v \rangle, \end{aligned}$$

si p est solution du système linéaire

$$F'_y(y,u)^* p = -\nabla_y \varphi(y,u). \tag{5.19}$$

Cette équation est appelée l'*équation de l'état adjoint* ou plus simplement l'*équation adjointe* (elle fait intervenir l'opérateur adjoint de $F'_y(y,u)$). Elle est linéaire en p. Pour u donné et $y = y(u)$ calculé, elle permet de déterminer $p = p(u)$, appelé *état adjoint*. Alors, d'après ce qui précède, le gradient de ψ en u s'écrit comme fonction de u, $y = y(u)$ et de $p = p(u)$:

$$\nabla\psi(u) = F'_u(y,u)^* p + \nabla_u \varphi(y,u). \tag{5.20}$$

Utilisation d'un lagrangien

Pour $p \in \mathbb{Z}$, on introduit le *lagrangien*

$$\ell(y,u,p) = \varphi(y,u) + \langle p, F(y,u)\rangle.$$

La valeur du vecteur p sera choisie plus tard. Elle dépendra du point u_0 où l'on veut calculer le gradient de ψ, mais dans la démarche qui suit on considère p indépendant de u. Si $u \mapsto y(u)$ est une fonction implicite pour (5.13), on a grâce à (5.16)

$$\psi(u) = \ell(y(u),u,p), \quad \forall u \in U_0,$$

si bien que le gradient de ψ peut aussi s'obtenir en calculant celui de $u \mapsto \ell(y(u),u,p)$. On choisira p de manière à ce que ce dernier calcul soit simple.

Pour $v \in \mathbb{U}$, on a en $y = y(u)$

$$\begin{aligned} \psi'(u)\cdot v &= \varphi'_y(y,u)\cdot y'(u)\cdot v + \varphi'_u(y,u)\cdot v + \langle p, F'_y(y,u)\cdot y'(u)\cdot v + F'_u(y,u)\cdot v\rangle \\ &= \langle \nabla_u\varphi(y,u), v\rangle + \langle F'_u(y,u)^* p, v\rangle + \langle \nabla_y\varphi(y,u) + F'_y(y,u)^* p, y'(u)\cdot v\rangle, \end{aligned}$$

où on a regroupé les termes dépendant de $y'(u)\cdot v$. L'idée maîtresse de cette approche est maintenant de faire disparaître les termes où $y'(u).v$ intervient (on se rappelle qu'on essaye d'éviter le calcul de $y'(u)$!), en *choisissant* p de telle sorte que le dernier terme s'annule :

$$F'_y(y,u)^* p = -\nabla_y \varphi(y,u).$$

On retrouve l'équation adjointe (5.19). Alors, d'après ce qui précède le gradient de ψ en u s'écrit comme fonction de u, $y = y(u)$ et de $p = p(u)$:

$$\nabla\psi(u) = \nabla_u \varphi(y,u) + F'_u(y,u)^* p.$$

On retrouve (5.20).

Résumé des opérations

Pour résumer, la méthode de l'état adjoint pour le calcul de $\nabla\psi(u_0)$ se déroule en trois étapes. On suppose $u_0 \in \mathbb{U}$ donné. Ensuite, on on procède de la manière suivante.

Schéma 5.29 (calcul d'un gradient par état adjoint)

1. On calcule l'état y_0, solution de l'équation d'état (5.13), avec $u = u_0$, qui peut être non linéaire.

2. On calcule l'état adjoint p_0, solution de l'équation adjointe (5.19), avec $u = u_0$ et $y = y_0$, qui est toujours linéaire en p.
3. On calcule le gradient de ψ en u_0 par la formule (5.20), avec $u = u_0$, $y = y_0$ et $p = p_0$.

Comme annoncé, ce calcul ne fait pas intervenir $y'(u_0)$.

On se rappelle souvent les formules (5.19) et (5.20), en remarquant que l'équation adjointe s'écrit également

$$\nabla_y \ell(y_0, u_0, p) = 0$$

et que le gradient est aussi donné par

$$\nabla\psi(u_0) = \nabla_u \ell(y_0, u_0, p_0).$$

Cependant, dans certains cas, il est préférable de reprendre la démarche suivie pour arriver à ces formules plutôt que de les appliquer directement. En particulier, si les équations d'état sont des équations aux dérivées partielles ou des équations d'évolution, les conditions aux limites ou initiales se trouvent plus facilement en reprenant la démarche que nous avons exposée, plutôt qu'en appliquant les formules de dérivation du lagrangien (voir la section 5.4.3).

Une interprétation de l'état adjoint

Comme un multiplicateur de Lagrange, l'état adjoint p a une interprétation marginaliste, que nous énonçons dans la proposition 5.30 ci-dessous. Pour cela, considérons le système perturbé par le vecteur λ :

$$F(y, u) + \lambda = 0.$$

Si $F'_y(y_0, u_0)$ est inversible, on peut encore exprimer la solution de ce système perturbé dans un voisinage de $(u, \lambda) = (u_0, 0)$ par une fonction implicite

$$(u, \lambda) \mapsto \tilde{y}(u, \lambda).$$

Comme $F(\tilde{y}(u, 0), u) = 0$ pour tout u voisin de u_0, l'unicité de la fonction implicite implique que $\tilde{y}(u, 0) = y(u)$ est la valeur en u de la fonction implicite du problème non perturbé. On peut aussi considérer la fonction

$$\tilde{\psi}(u, \lambda) = \varphi(\tilde{y}(u, \lambda), u).$$

Proposition 5.30 *L'état adjoint p associé à (y, u), solution du système non perturbé, donne la variation de la valeur de $\tilde{\psi}$ en $(u, 0)$ par rapport à une perturbation des équations d'état :*

$$p = \nabla_\lambda \tilde{\psi}(u, 0).$$

Démonstration. Pour montrer cela, on calcule $\nabla_\lambda \tilde{\psi}(u, 0)$ par la méthode de l'état adjoint. On introduit le lagrangien du problème perturbé

$$\tilde{\ell}(y,u,\lambda,p) = \varphi(y,u) + \langle p, F(y,u) + \lambda \rangle.$$

Soit u donné. L'état du système perturbé correspondant à ce u et à $\lambda = 0$ est l'état y du système non perturbé correspondant à la commande u. L'état adjoint du système perturbé en $(y,u,0)$ s'obtient par

$$\nabla_y \tilde{\ell}(y,u,0,p) \equiv \nabla_y \varphi(y,u) + F'_y(y,u)^* p = 0.$$

Il est donc identique à l'état adjoint correspondant à (y,u) dans le système non perturbé. Enfin, le gradient de $\tilde{\psi}$ par rapport à λ en $(u,0)$ s'obtient par

$$\nabla_\lambda \tilde{\psi}(u,0) = \nabla_\lambda \tilde{\ell}(y,u,0,p) = p.$$

D'où le résultat. □

5.4.3 Exemples

Nous donnons ci-dessous deux exemples illustrant l'utilisation de la méthode de l'état adjoint. Ils sont paradigmatiques. Dans le premier exemple, l'équation d'état est une équation différentielle ordinaire. On est donc dans une situation plus générale que dans le cadre abstrait ci-dessus, puisque les objets manipulés appartiennent à un espace vectoriel de dimension infinie, mais les principes à appliquer sont identiques. Dans le second exemple, l'équation d'état est une équation différentielle ordinaire discrétisée. On pourrait alors appliquer les formules de la section 5.4.2 précédente pour obtenir le gradient, mais, comme nous l'avons déjà dit, il est plus efficace d'appliquer le principe ayant conduit à ces formules, de manière à en dégager la structure. Dans certains cas, il faut un peu de doigté pour aboutir à une formulation opérationnelle. La démarche exposée peut aussi s'appliquer lorsque les équations d'état sont des équations aux dérivées partielles. Ce sujet sort du cadre de cette monographie. Il est traité en détail dans [369].

Cas où l'équation d'état est une équation différentielle

On suppose que l'état du système est une fonction dépendant du temps, définie sur un intervalle $[0,T]$ de $\mathbb{R}$ $(T > 0)$, à valeurs dans $\mathbb{R}^n$:

$$y : t \in [0,T] \to y(t) \in \mathbb{R}^n.$$

Cet état est supposé déterminé par une équation différentielle ordinaire et sa condition initiale :

$$\begin{cases} \dot{y}(t) = \varphi(y(t),t), & \text{pour tout } t \in]0,T[\\ y(0) = Au, \end{cases} \tag{5.21}$$

appelée *équation d'état* du système. Dans (5.21), $\dot{y}$ désigne la dérivée de y par rapport à t, $\varphi : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}^n$ est une application régulière, A est une matrice $n \times m$ et $u \in \mathbb{R}^m$ est la variable de commande. Dans certains problèmes de commande optimale, on cherche à déterminer la commande u, qui agit ici sur la condition initiale du système, de manière à minimiser un critère de la forme

$$f(u) = \int_0^T J(y(t,u),t)\,\mathrm{d}t + J^u(u) + J^T(y(T,u)),$$

où J est une fonction de $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$ dans $\mathbb{R}$ représentant un coût distribué dans le temps, J^u est une fonction de $\mathbb{R}^m$ dans $\mathbb{R}$ représentant un coût sur la commande du système et J^T est une fonction de $\mathbb{R}^n$ dans $\mathbb{R}$ représentant un coût sur l'état final du système. Nous avons écrit $y(t) \equiv y(t,u)$ et $y(T) \equiv y(T,u)$ pour expliciter la dépendance de y en u, qui provient de l'équation d'état (5.21).

On s'intéresse ici au calcul de $\nabla f(u)$, le gradient de f en u. Il se déduira aisément de $f'(u)\cdot v$, la dérivée directionnelle de f en u dans la direction $v \in \mathbb{R}^m$. La difficulté est de prendre en compte la dépendance de y en u. Le calcul proposé est formel, car il ne précise pas les espaces fonctionnels, dont le choix sort du cadre de cette monographie.

Comme dans le cadre abstrait ci-dessus, on écrit $f(u)$ comme un lagrangien au moyen d'un état adjoint, qui est ici une fonction $p : t \in [0,T] \to p(t) \in \mathbb{R}^n$:

$$\begin{aligned} f(u) &= \int_0^T J(y(t,u),t)\,\mathrm{d}t + J^u(u) + J^T(y(T,u)) \\ &\quad + \int_0^T p(t)^{\mathsf{T}} \left(\dot{y}(t,u) - \varphi(y(t,u),t)\right)\,\mathrm{d}t. \end{aligned}$$

Cette identité a lieu quel que soit p, pourvu que y vérifie l'équation d'état (5.21). On choisira p ultérieurement, de manière à éliminer la dérivée de la fonction implicite $u \mapsto y(\cdot,u)$. On a

$$\begin{aligned} f'(u)\cdot v &= \int_0^T J'_y(y,t)\cdot(y'(t,u)\cdot v)\,\mathrm{d}t \\ &\quad + (J^u)'(u)\cdot v + (J^T)'(y(T,u))\cdot(y'(T,u)\cdot v) \\ &\quad + \int_0^T p(t)^{\mathsf{T}}\left(\dot{y}'(t,u)\cdot v - \varphi'_y(y,t)\cdot(y'(t,u)\cdot v)\right)\,\mathrm{d}t. \end{aligned}$$

Pour faire disparaître la dérivée en temps de $y'(t,u)$, on intègre par parties :

$$\begin{aligned} &\int_0^T p(t)^{\mathsf{T}}\left(\dot{y}'(t,u)\cdot v\right)\,\mathrm{d}t \\ &= -\int_0^T \dot{p}(t)^{\mathsf{T}}\left(y'(t,u)\cdot v\right)\,\mathrm{d}t + p(t)^{\mathsf{T}}\left(y'(t,u)\cdot v\right)\Big|_0^T \\ &= -\int_0^T \dot{p}(t)^{\mathsf{T}}\left(y'(t,u)\cdot v\right)\,\mathrm{d}t + p(T)^{\mathsf{T}}\left(y'(T,u)\cdot v\right) - p(0)^{\mathsf{T}}Av, \end{aligned}$$

où on a utilisé le fait que $y(0,u) = Au$ pour tout $u \in \mathbb{R}^n$ et donc $y'(0,u)\cdot v = Av$. On aurait pu faire cette intégration par parties dans l'expression de $f(u)$, avant dérivation. En regroupant les termes contenant $y'(t,u)\cdot v$ et $y'(T,u)\cdot v$ dans $f'(u)\cdot v$, on obtient

$$\begin{aligned} f'(u)\cdot v &= (J^u)'(u)\cdot v \\ &\quad + \int_0^T \left(-\dot{p}(t) - \varphi'_y(y,t)^{\mathsf{T}}p(t) + \nabla_y J(y,t)\right)^{\mathsf{T}}\left(y'(t,u)\cdot v\right)\,\mathrm{d}t \\ &\quad + \Big(p(T) + \nabla J^T(y(T))\Big)^{\mathsf{T}}\Big(y'(T,u)\cdot v\Big) - p(0)^{\mathsf{T}}Av. \end{aligned}$$

On a désigné de la même façon la dérivée $\varphi'_y(y,t)$ et la matrice jacobienne associée. L'étape importante de ce calcul est maintenant d'éliminer $y'(t,u)\cdot v$ et $y'(T,u)\cdot v$, qui sont coûteux à calculer, en annulant leur facteur par un choix adéquat de p. Ceci conduit à l'*équation adjointe*, qui est une équation différentielle ordinaire linéaire en p, avec une condition *finale*

$$\left\{\begin{array}{l} -\dot p(t) = \varphi'_y(y(t),t)^{\mathsf T} p(t) - \nabla_y J(y(t),t), \quad \text{pour tout } t\in\,]0,T[\\ p(T) = -\nabla J^T(y(T)). \end{array}\right. \tag{5.22}$$

On obtient alors

$$f'(u)\cdot v = (J^u)'(u)\cdot v - p(0)^{\mathsf T} A v$$

et donc

$$\nabla f(u) = \nabla J^u(u) - A^{\mathsf T} p(0). \tag{5.23}$$

Pour résumer, le gradient $\nabla f(u)$ de f en u s'obtient en déterminant d'abord y comme solution de l'équation d'état (5.21), qui est souvent non linéaire, ensuite p comme solution de l'équation adjointe (5.22), toujours linéaire, et enfin le gradient par (5.23). Ce calcul permet d'éviter la détermination des m trajectoires $t\mapsto y'(t,u)\cdot e_i$, pour $i=1,\dots,m$, formant la dérivée de la fonction implicite $u\mapsto y(\cdot,u)$.

On observera que, si l'équation d'état est progressive (c.-à-d., elle s'intègre à partir d'une condition initiale), l'équation adjointe est rétrograde (c.-à-d., elle s'intègre à partir d'une condition finale). Notons également que, pour intégrer l'équation adjointe, il faut connaître l'état y à chaque instant. En pratique (sur les modèles discrétisés), il faut donc mémoriser cet état, ce qui peut demander beaucoup d'espace-mémoire : l'efficacité du calcul est donc contrebalancée par un besoin de mémoire. On retrouvera cette propriété dans le mode inverse de différentiation (section 5.5.3).

Cas où l'équation d'état est une équation différentielle discrétisée

Supposons à présent que l'état $y : t\in[0,T]\to y(t)\in\mathbb{R}^n$ du système considéré soit décrit par l'équation différentielle

$$\left\{\begin{array}{l} \dot y(t) = \varphi(y(t),u(t),t), \quad \text{pour tout } t\in\,]0,T[\\ y(0) = y_0, \end{array}\right. \tag{5.24}$$

dans laquelle $y_0\in\mathbb{R}^n$ est la valeur donnée de l'état à l'instant initial et la commande est à présent une fonction $u : t\in[0,T]\to u(t)\in\mathbb{R}^m$ agissant à chaque instant sur le système par l'intermédiaire de $\varphi : \mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^m\times\mathbb{R}\to\mathbb{R}^n$. Le critère que l'on cherche à minimiser par rapport à u est le suivant :

$$\int_0^T J(y(t,u),u(t),t)\,\mathrm{d}t + J^T(y(T,u)), \tag{5.25}$$

où $J : \mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^m\times\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ représente le coût instantané et $J^T : \mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ représente le coût associé à l'état final du système. Nous avons encore écrit $y(t)\equiv y(t,u)$ pour insister sur le fait que y dépend de u par l'intermédiaire de l'équation d'état (5.24).

On s'intéresse cette fois à la forme discrétisée de ce modèle. Pour cela, on décompose l'intervalle d'intégration $[0,T]$ en N pas de temps $\Delta t_i > 0$, $1\leqslant i\leqslant N$, tels que

$T = \sum_{i=1}^{N} \Delta t_i$. On note $t_0 = 0$, puis $t_i = t_{i-1} + \Delta t_i$, pour $1 \leqslant i \leqslant N$, (donc $t_N = T$) et $u_i = u(t_i) \in \mathbb{R}^m$. Pour simplifier, on supposera que l'approximation $y_i \in \mathbb{R}^n$ de $y(t_i)$ est obtenue par le *schéma d'Euler implicite* (pour d'autres schémas d'intégration, on pourra consulter [214 ; 1997] par exemple) :

$$y_{i+1} = y_i + \Delta t_i \, \varphi(y_{i+1}, u_{i+1}, t_i), \quad \text{pour } 0 \leqslant i \leqslant N-1, \tag{5.26}$$

démarrant sur la condition initiale y_0. On prendra comme approximation du critère continu, le critère discret suivant

$$f(\mathbf{u}) = \sum_{i=1}^{N} J(y_i(\mathbf{u}), u_i, t_i) \, \Delta t_i + J^T(y_N(\mathbf{u})),$$

où $\mathbf{u} = \{u_i\}_{i=1}^N \subseteq \mathbb{R}^m$ et où la notation $y_i \equiv y_i(\mathbf{u})$ met en évidence la dépendance de y_i par rapport à $\mathbf{u}$. On cherche à calculer le gradient de f.

Comme dans le cadre abstrait et le cas continu ci-dessus, on écrit $f(\mathbf{u})$ comme un lagrangien au moyen d'un état adjoint, qui est ici un ensemble de $N+1$ vecteurs $\mathbf{p} = \{p_i\}_{i=0}^N \subseteq \mathbb{R}^n$ (le vecteur $p_N \in \mathbb{R}^n$ apparaîtra plus loin) :

$$\begin{aligned} f(\mathbf{u}) \;&=\; \sum_{i=1}^{N} J(y_i(\mathbf{u}), u_i, t_i) \, \Delta t_i + J^T(y_N(\mathbf{u})) \\ &\quad + \sum_{i=0}^{N-1} p_i^{\mathsf{T}} \Big(y_{i+1} - y_i - \Delta t_i \, \varphi(y_{i+1}, u_{i+1}, t_i) \Big). \end{aligned}$$

Cette identité a lieu quel que soit $\mathbf{p}$, pourvu que $\mathbf{y} = \{y_i\}_{i=0}^N$ vérifie l'équation d'état (5.26). On choisira $\mathbf{p}$ ultérieurement, de manière à éliminer la dérivée de la fonction implicite $\mathbf{u} \mapsto \mathbf{y}(\mathbf{u})$. Pour varier, commençons par faire une « somme par parties » (équivalent de l'intégration par parties de l'exemple précédent), avant dérivation. On a

$$\sum_{i=0}^{N-1} p_i^{\mathsf{T}}(y_{i+1} - y_i) = \sum_{i=1}^{N} p_{i-1}^{\mathsf{T}} y_i - \sum_{i=0}^{N-1} p_i^{\mathsf{T}} y_i = \sum_{i=1}^{N} (p_{i-1} - p_i)^{\mathsf{T}} y_i + p_N^{\mathsf{T}} y_N - p_0^{\mathsf{T}} y_0.$$

Il en résulte

$$\begin{aligned} f(\mathbf{u}) \;&=\; \sum_{i=1}^{N} J(y_i(\mathbf{u}), u_i, t_i) \, \Delta t_i + J^T(y_N(\mathbf{u})) \\ &\quad + \sum_{i=1}^{N} \Big((p_{i-1} - p_i)^{\mathsf{T}} y_i - \Delta t_{i-1} \, p_{i-1}^{\mathsf{T}} \varphi(y_i, u_i, t_{i-1}) \Big) \\ &\quad + p_N^{\mathsf{T}} y_N - p_0^{\mathsf{T}} y_0. \end{aligned}$$

On peut à présent calculer la dérivée directionnelle de f en $\mathbf{u}$ dans une direction $\mathbf{v} = \{v_i\}_{i=1}^N \subseteq \mathbb{R}^m$:

$$
\begin{aligned}
f'(\mathbf{u})\cdot\mathbf{v} \;=\; & \sum_{i=1}^{N}\Big(J'_y(y_i,u_i,t_i)\cdot(y'_i(\mathbf{u})\cdot\mathbf{v})+J'_u(y_i,u_i,t_i)\cdot v_i\Big)\Delta t_i\\
& +(J^T)'(y_N)\cdot(y'_N(\mathbf{u})\cdot\mathbf{v})\\
& +\sum_{i=1}^{N}\Big((p_{i-1}-p_i)^{\mathsf{T}}(y'_i(\mathbf{u})\cdot\mathbf{v})\\
& \qquad -\Delta t_{i-1}\,p_{i-1}^{\mathsf{T}}\varphi'_y(y_i,u_i,t_{i-1})\cdot(y'_i(\mathbf{u})\cdot\mathbf{v})\\
& \qquad -\Delta t_{i-1}\,p_{i-1}^{\mathsf{T}}\varphi'_u(y_i,u_i,t_{i-1})\cdot v_i\Big)\\
& +p_N^{\mathsf{T}}(y'_N(\mathbf{u})\cdot\mathbf{v}).
\end{aligned}
$$

Comme précédemment, l'étape importante du calcul consiste à éliminer les dérivées $y'_i(\mathbf{u})\cdot\mathbf{v}$ $(1\leqslant i\leqslant N)$, qui sont coûteuses à évaluer, en annulant ses facteurs par un choix approprié de $\mathbf{p}$. Ceci conduit à l'*équation adjointe* suivante

$$
\left\{\begin{array}{l}\Big(I-\Delta t_{i-1}\,\varphi'_y(y_i,u_i,t_{i-1})^{\mathsf{T}}\Big)p_{i-1}=p_i-\Delta t_i\,\nabla_y J(y_i,u_i,t_i),\quad \text{pour } i=N,\dots,1\\ p_N=-\nabla J^T(y_N).\end{array}\right. \tag{5.27}
$$

On obtient alors

$$
\nabla f(\mathbf{u})=\Big\{\Delta t_i\,\nabla_u J(y_i,u_i,t_i)-\Delta t_{i-1}\,\varphi'_u(y_i,u_i,t_{i-1})^{\mathsf{T}}p_{i-1}\Big\}_{i=1}^{N}, \tag{5.28}
$$

qui est un vecteur de $\mathbb{R}^{Nm}$.

Résumons les opérations. Le gradient $\nabla f(\mathbf{u})$ de f en $\mathbf{u}=\{u_i\}_{i=1}^N\in\mathbb{R}^{Nm}$ s'obtient en déterminant d'abord $\mathbf{y}=\{y_i\}_{i=1}^N\in\mathbb{R}^{Nn}$ à partir de sa condition initiale y_0 comme solution de l'équation d'état (5.26), qui est souvent non linéaire. Ensuite $\mathbf{p}=\{p_i\}_{i=0}^{N-1}\in\mathbb{R}^{Nn}$ est déterminé à partir de sa condition finale $p_N=-\nabla J^T(y_N)$ comme solution de l'équation adjointe (5.27), toujours linéaire. Enfin le gradient est obtenu par (5.28). Comme dans le cas continu analysé précédemment, l'équation d'état est progressive et l'équation adjointe est rétrograde.

5.4.4 Calcul de produits hessienne-vecteur

On se place à nouveau dans le cadre de la section 5.4.1, où des variables y et u sont reliées par une *équation d'état*

$$
F(y,u)=0,
$$

permettant d'écrire localement y comme une fonction de u et où l'on cherche à dériver la fonction

$$
u\mapsto\psi(u):=\varphi(y(u),u).
$$

On s'intéresse à présent au produit de la hessienne de ψ en u (pour un produit scalaire $\langle\cdot,\cdot\rangle$ donné) par un vecteur v.

Le schéma de calcul 5.29 peut être vu comme évaluant successivement, à partir de u donné, les variables y, puis p, et enfin $\nabla\psi$, toutes vues comme des fonctions de u.

Il suffit donc de calculer la dérivée directionnelle de ces quantités dans la direction v, pour obtenir finalement $\nabla^2\psi(u)v$. On note $\dot{y} = y'(u)$ et $\dot{p} = p'(u)$. La dérivation de l'équation d'état donne une équation linéaire permettant de calculer $\dot{y}$:

$$F'_y(y,u)\,\dot{y} = -F'_u(y,u).$$

La dérivation de l'équation adjointe donne une équation linéaire permettant de calculer $\dot{p}$:

$$F'_y(y,u)^*\,\dot{p} = -\left(F''_{yy}(y,u)\cdot\dot{y} + F''_{yu}(y,u)\cdot v\right)^*\,p - \left(\varphi''_{yy}(y,u)\cdot\dot{y} + \varphi''_{yu}(y,u)\cdot v\right).$$

Il reste à dériver l'équation donnant le gradient de ψ pour obtenir le produit hessienne-vecteur :

$$\psi''(u)\cdot v = \left(F''_{yu}(y,u)\cdot\dot{y} + F''_{uu}(y,u)\cdot v\right)^*\,p + \left(\varphi''_{yu}(y,u)\cdot\dot{y} + \varphi''_{uu}(y,u)\cdot v\right).$$

On observera que les systèmes linéaires intervenant dans le calcul de $\nabla\psi(u)$ ou $\nabla^2\psi(u)v$, utilisent tous la matrice $F'_y(y,u)$ ou son adjointe. Si une factorisation de cette matrice s'impose, celle-ci ne devra être faite qu'une seule fois par valeur de u.

5.5 Différentiation automatique ⊖

En optimisation, l'objet numérique de base est le gradient. Les méthodes numériques qui peuvent fonctionner sans calcul de gradients sont lentes. On peut alors se demander si les n quantités formant le gradient d'une fonction scalaire définie sur $\mathbb{R}^n$ peuvent se calculer en un temps raisonnable, en particulier si n est très grand. On pourrait en effet penser que cela prend n fois plus de temps que le calcul de la fonction elle-même. S'il en était ainsi, les techniques numériques utilisant le gradient devraient être cantonnées à l'optimisation de problèmes de taille petite ou moyenne. Nous montrerons dans cette section (proposition 5.32) que, par le mode inverse de différentiation automatique, on peut toujours calculer le gradient d'une fonction en un temps qui est du même ordre que celui nécessaire au calcul de la fonction elle-même (sans facteur proportionnel à n). Il s'agit donc d'un résultat fondamental pour l'optimisation numérique.

La *différentiation automatique*[1] est un ensemble de techniques permettant d'obtenir les dérivées exactes (aux erreurs d'arrondi près) d'une fonction représentée par un programme informatique, écrit par exemple en Fortran ou en C. Si c'est un programme qui représente la fonction à dériver, c'est aussi un programme qui est généré par le différentiateur. Il faudra l'exécuter pour obtenir la valeur de la dérivée de la fonction en un point donné.

La méthode se distingue donc de la différentiation symbolique, qui suppose que la fonction à dériver admet une représentation symbolique au moyen de formules mathématiques et qui génère une représentation, également symbolique, de la fonction dérivée. On la trouve dans des codes comme Macsyma [532 ; 1985] ou Maple [103 ;

[1] En anglais, le vocable *Automatic Differentiation* tend à être remplacé par *Computational Differentiation* ou *Algorithmic Differentiation* [268, 271]. En français, on rencontre parfois l'expression *Différentiation par Programme*.

1988]. Elle se distingue aussi de la différentiation par différences finies, méthode par laquelle les dérivées partielles d'une fonction $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ sont *approchées* en faisant varier insensiblement et successivement chacune des variables, tout en gardant les autres fixées :

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}(x) \simeq \frac{f(x + t_i e_i) - f(x)}{t_i}, \quad i = 1, \ldots, n,$$

où e_i est le i-ième vecteur de la base canonique de $\mathbb{R}^n$ et $t_i > 0$ est « bien choisi » (ni trop grand ni trop petit !). Avec cette dernière technique les dérivées ne peuvent pas être calculées avec précision. De plus, par cette technique le calcul d'un gradient demande l'évaluation de f aux n points $x + t_i e_i$, $1 \leqslant i \leqslant n$, ce qui peut demander beaucoup de temps de calcul.

Un des attraits de la différentiation automatique est de pouvoir générer un programme calculant le gradient d'une fonction à valeurs scalaires, dont le temps d'exécution relatif à celui du programme original est indépendant du nombre de variables par rapport auxquelles on dérive. Il s'agit en fait de génération automatique de codes adjoints. Cette technique s'est concrétisée dans des codes de différentiation tels que ADOL-C [], ADIFOR [] ou TAPENADE [].

Dans cette section, nous présentons quelques aspects théoriques de la différentiation automatique. Pour plus de détails, on consultera les ouvrages et monographies cités en fin de chapitre.

5.5.1 Modèle de programme

Pour obtenir les formules permettant de générer de manière automatique un code calculant les dérivées d'une fonction représentée par un programme, on commence par considérer le cas d'un programme formé d'une suite d'instructions d'affectation. Un tel programme a l'avantage d'avoir une représentation mathématique simple avec laquelle on peut travailler. Les règles que l'on déduit de ce modèle permettent alors de comprendre les règles de transformation de codes à mettre en œuvre sur des programmes plus complexes, voire généraux, tels que ceux écrits en Fortran ou C.

On note $v_1, v_2, \ldots, v_N$ les N variables du code informatique (ou cases-mémoire) sur lesquelles travaille le programme modèle. Il n'y a aucun ordre sur ces variables. En particulier, il n'est pas nécessaire qu'elles soient évaluées dans l'ordre de leur indice. C'est simplement une manière commode de les désigner toutes. On supposera que les n *variables d'entrée* ($n \leqslant N$), celles par rapport auxquelles on dérive, encore appelée *variables indépendantes*, sont les variables $v_1, \ldots, v_n$. Les m *variables de sortie* ($m \leqslant N$), celles que l'on veut dériver, sont supposées être les variables $v_{N-m+1}, \ldots, v_N$. Des variables peuvent être à la fois d'entrée et de sortie. On dira qu'une variable v_i devient *active* lorsqu'on lui affecte une valeur qui dépend de la valeur donnée aux variables indépendantes.

Le programme modèle que nous considérerons est donc supposé être formé d'une suite de K instructions d'affectation exécutées l'une après l'autre, ce que l'on peut écrire :

$$v_{\mu_k} := \varphi_k(v_{D_k}), \quad k = 1, \ldots, K. \tag{5.29}$$

À chaque instruction k, le programme modifie la variable v_{μ_k} au moyen d'une fonction φ_k, en utilisant les variables v_i, $i \in D_k$, où D_k est une partie de $[1 : N]$. Dans ce modèle, on ne se donne aucune restriction sur $\mu_k \in [1 : N]$, qui peut en particulier faire partie

de D_k. Si on note x les variables d'entrée et f les variables de sorties, on cherche donc à différentier une fonction

$$f : x \in \mathbb{R}^n \mapsto f(x) \in \mathbb{R}^m,$$

qui est représentée par le programme modèle (5.29) et dont la valeur en un point x peut être obtenue en exécutant ce programme.

Pour fixer les idées, considérons l'exemple suivant écrit en Fortran, dans lequel on calcule une variable $f = \texttt{v5}$ à partir de la donnée d'un couple de variables $x = (\texttt{v1}, \texttt{v2})$:

```
v3 = v1 + v2**2
v4 = v1**2 * sin(v3)
v4 = v4/v3
v5 = exp(v4)
```

La correspondance entre ce programme et le modèle (5.29) est détaillée au tableau 5.1.

indice k de l'instruction	instruction	indice de la variable modifiée	fonction φ_k	indices de dépendance
1	`v3=v1+v2**2`	$\mu_1 = 3$	$\varphi_1(a,b) = a + b^2$	$D_1 = \{1, 2\}$
2	`v4=v1**2*sin(v3)`	$\mu_2 = 4$	$\varphi_2(a,b) = a^2 \sin(b)$	$D_2 = \{1, 3\}$
3	`v4=v4/v3`	$\mu_3 = 4$	$\varphi_3(a,b) = b/a$	$D_3 = \{3, 4\}$
4	`v5=exp(v4)`	$\mu_4 = 5$	$\varphi_4(a) = \exp(a)$	$D_4 = \{4\}$

Tableau 5.1. Correspondance entre l'exemple de programme et le modèle (5.29)

On désigne par $\mathcal{F}$ l'ensemble des *fonctions intermédiaires*, c'est-à-dire les fonctions φ_k utilisées dans le programme modèle (5.29). Il n'y a pas de restriction sur ces fonctions, si ce n'est qu'elles doivent être différentiables et à valeurs scalaires (le cas où elles sont à valeurs vectorielles se traite de manière analogue, voir l'exercice 5.7). Elles peuvent représenter les opérations élémentaires (`+`, `-`, `*`, `/`), les fonctions intrinsèques du langage informatique utilisé, des compositions de ces fonctions ou encore des ensembles d'instructions (sous-routines, procédures, fonctions). On notera $\mathcal{F}_{_F} = \{$`+`, `-`, `*`, `/`, `sqrt`, `exp`, `log`, `log10`, `sin`, `cos`, `tan`, `asin`, `acos`, `atan`, `sinh`, `cosh`, `tanh`$\}$ la classe des fonctions utilisables en Fortran (langage choisi pour estimer la complexité des calculs ci-dessous).

5.5.2 Différentiation en mode direct

Le *mode direct* de différentiation est le plus simple et le plus intuitif. Il est bien adapté au calcul des dérivées directionnelles de la fonction f représentée par le programme.

Soit $d \in \mathbb{R}^n$ la direction dans laquelle on veut différentier f. On cherche donc à calculer $f'(x) \cdot d$. Pour cela, il est bon de voir chaque variable du code comme une fonction des variables d'entrée $x = (v_1, \ldots, v_n)$. Donc à chaque v_i $(1 \leqslant i \leqslant N)$

correspond une dérivée directionnelle $\dot{v}_i := v_i'(x)\cdot d$. Alors, en différentiant l'instruction k du programme (5.29), on obtient

$$\dot{v}_{\mu_k} = \sum_{i\in D_k} \frac{\partial \varphi_k}{\partial v_i}(v_{D_k})\dot{v}_i.$$

On a donc une formule permettant de calculer $\dot{v}_{\mu_k} := v_{\mu_k}'(x)\cdot d$ à partir des $\dot{v}_i$, $i \in D_k$. Grâce à celle-ci, on peut « propager » le calcul des dérivées directionnelles des variables évaluées dans le code, parallèlement à leur évaluation. C'est l'idée utilisée dans le mode direct de différentiation.

Remarquons que $\dot{v}_i = d_i$, pour $1 \leqslant i \leqslant n$. Pour calculer $f'(x)\cdot d$, il suffit donc d'initialiser les dérivées directionnelles des variables indépendantes comme suit :

$$\dot{v}_i := d_i, \quad \text{pour } 1 \leqslant i \leqslant n,$$

et ensuite de propager les dérivées directionnelles dans le code par les instructions suivantes :

$$\left.\begin{array}{r} \dot{v}_{\mu_k} := \sum_{i\in D_k} \frac{\partial \varphi_k}{\partial v_i}(v_{D_k})\dot{v}_i \\ v_{\mu_k} := \varphi_k(v_{D_k}) \end{array}\right\}, \quad k = 1,\ldots,K.$$

On calcule $\dot{v}_{\mu_k}$ avant v_{μ_k} au cas où φ_k dépendrait de v_{μ_k}. Il faut en effet évaluer les dérivées partielles $\frac{\partial \varphi_k}{\partial v_i}$ avec la valeur non modifiée de v_{μ_k}. En fin d'exécution, on récupère dans $\dot{v}_{N-m+1}, \ldots, \dot{v}_N$, la dérivée $f'(x)\cdot d$:

$$f'(x)\cdot d := (\dot{v}_{N-m+1},\ldots,\dot{v}_N).$$

Ce mode de différentiation porte le nom de *mode direct* et le code réalisant ces opérations est appelé *code linéaire tangent* de (5.29). Celui-ci peut être résumé ainsi :

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{pour } i = 1,\ldots,n \\ \quad \dot{v}_i := d_i \ ; \\ \text{pour } k = 1,\ldots,K \\ \quad \dot{v}_{\mu_k} := \sum_{i\in D_k} \frac{\partial \varphi_k}{\partial v_i}(v_{D_k})\dot{v}_i \ ; \\ \quad v_{\mu_k} := \varphi_k(v_{D_k}) \ ; \\ f'(x)\cdot d := (\dot{v}_{N-m+1},\ldots,\dot{v}_N) \ . \end{array}} \tag{5.30}$$

On voit que l'on a associé à chaque variable v_i du code, une variable $\dot{v}_i$ contenant sa dérivée directionnelle. Si toutes les variables sont actives, l'espace-mémoire requis est donc exactement le double de celui utilisé par le programme original. En ce qui concerne le temps de calcul $T(f, f'\cdot d)$ nécessaire à l'exécution de (5.30), on peut le comparer au temps $T(f)$ de l'exécution de (5.29).

Proposition 5.31 *Le temps $T(f, f'\cdot d)$ nécessaire au calcul de f et de sa dérivée directionnelle $f'\cdot d$ dans la direction d au moyen de l'algorithme (5.30) vérifie*

l'estimation suivante:

$$\frac{T(f, f'\cdot d)}{T(f)} \leqslant C_{\mathcal{F}},$$

où $T(f)$ est le temps nécessaire au calcul de f par l'algorithme (5.29) et $C_{\mathcal{F}}$ est une constante ne dépendant que des fonctions intermédiaires φ_k de la bibliothèque $\mathcal{F}$.

Démonstration. D'après l'algorithme (5.30), on a

$$T(f, f'\cdot d) = \sum_{k=1}^{K} T(\varphi_k, \varphi'_k).$$

Ensuite, en utilisant l'inégalité de Cauchy-Schwarz généralisée (A.9), on obtient

$$\begin{aligned} T(f, f'\cdot d) &\leqslant \max_{1\leqslant k\leqslant K} \left(\frac{T(\varphi_k, \varphi'_k)}{T(\varphi_k)}\right) \sum_{k=1}^{K} T(\varphi_k) \\ &\leqslant \max_{\varphi\in\mathcal{F}} \left(\frac{T(\varphi, \varphi')}{T(\varphi)}\right) T(f) \\ &= C_{\mathcal{F}}\, T(f), \end{aligned}$$

où la constante

$$C_{\mathcal{F}} = \max_{\varphi\in\mathcal{F}} \left(\frac{T(\varphi, \varphi')}{T(\varphi)}\right)$$

ne dépend que de la classe $\mathcal{F}$ des fonctions intermédiaires. □

Par exemple si toutes les fonctions intermédiaires φ_k sont prises dans $\mathcal{F}_{_F}$ (famille des fonctions Fortran), on montre, sous des hypothèses raisonnables sur le temps respectif de l'évaluation des fonctions de $\mathcal{F}_{_F}$, que

$$\frac{T(f, f'\cdot d)}{T(f)} \leqslant 4,$$

et ceci quel que soit le nombre m de variables dérivées (voir [225 ; 1991]).

À titre d'illustration, voyons comment s'écrit le code linéaire tangent dans le cas de l'exemple de la page 242. Supposons que les deux composantes de la direction d soient données dans les variables `d1` et `d2`. En utilisant le suffixe `tl` pour désigner les variables $\dot{v}_i$ associées aux variables v_i du code et contenant leur dérivée directionnelle, le code linéaire tangent s'écrit :

```
v1tl = d1
v2tl = d2
v3tl = v1tl + 2*v2*v2tl
v3 = v1 + v2**2
v4tl = 2*v1*v1tl*sin(v3) + v1**2*cos(v3)*v3tl
v4 = v1**2 * sin(v3)
```

```
aux = v4/v3
v4tl = (v4tl - aux*v3tl)/v3
v4 = aux
aux = exp(v4)
v5tl = aux * v4tl
v5 = aux
```

On a utilisé une variable auxiliaire `aux`, de manière à éviter de calculer plusieurs fois certaines quantités.

Ce qu'il faut retenir sur le mode direct :

1. Le mode direct de différentiation est le bon mode pour calculer la dérivée d'un grand nombre de variables (ou variables de sortie) par rapport à un petit nombre de variables indépendantes (ou variables d'entrée).
2. C'est donc aussi le bon mode pour calculer une dérivée directionnelle d'une application $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$.
3. À chaque variable v_i du code, on associe une variable $\dot{v}_i$ qui contient la dérivée directionnelle de v_i dans une direction d donnée. Sa valeur est nulle (et alors $\dot{v}_i$ peut ne pas exister dans le code linéaire tangent) si v_i n'est pas influencée par les variables par rapport auxquelles on dérive (c'est-à-dire si elle n'est pas active).
4. Le code linéaire tangent peut s'obtenir en « dérivant » le code original ligne par ligne. Si dans ce dernier une instruction s'interprète comme une application $\{v_i : i \in D_k\} \mapsto v_{\mu_k}$, les instructions à ajouter pour obtenir le code linéaire tangent forment une application entre variables $\dot{v}_i$ de la forme $\{\dot{v}_i : i \in D_k\} \mapsto \dot{v}_{\mu_k}$.

5.5.3 Différentiation en mode inverse

Le *mode inverse* de différentiation est moins intuitif et plus complexe à mettre en œuvre que le mode direct. Il trouve son utilité lorsque l'on veut calculer des dérivées par rapport à un grand nombre de variables. Ce mode est une méthode de génération automatique de codes adjoints, encore appelés codes linéaires cotangents, concept familier en commande optimale.

Il y a plusieurs manières d'introduire le mode inverse. Dans l'état de l'art [225 ; 1991], quatre approches ont été recensées : l'approche du graphe de calcul [479 ; 1984] [304 ; 1984] [305 ; 1984], la méthode des substitutions rétrogrades [503 ; 1980] [330 ; 1984], la méthode de dualité et l'approche de Speelpenning [503 ; 1980]. Chacune de ces approches apporte un éclairage différent sur ce mode de différentiation, toujours surprenant, mais c'est la dernière qui est la plus simple à exposer et à adapter à diverses situations. C'est aussi celle que nous allons présenter.

D'abord, il est intéressant de voir l'instruction k de (5.29) comme une transformation agissant sur l'ensemble des variables $v_1, \ldots, v_N$ du code et qui laisse inchangées toutes ces variables sauf v_{μ_k}. On peut donc lui associer une transformation $\Phi_k : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N$, définie par

$$(\Phi_k(v))_i = \begin{cases} v_i & \text{si } i \neq \mu_k \\ \varphi_k(v_{D_k}) & \text{si } i = \mu_k. \end{cases}$$

À présent, on peut voir le programme (5.29) comme une composition de K fonctions :

$$(\Phi_K \circ \cdots \circ \Phi_1)(v).$$

Afin de lever certaines ambiguïtés, on note $v^0 = v$ et

$$v^k = (\Phi_k \circ \cdots \circ \Phi_1)(v)$$

la valeur des variables du code après exécution des k premières instructions.

Soit alors d dans $\mathbb{R}^m$, espace d'arrivée de f. Avec le mode inverse, on cherche à calculer le gradient de l'application $x \mapsto d^\mathsf{T} f(x)$ pour le produit scalaire euclidien, c'est-à-dire le vecteur des dérivées partielles

$$\nabla(d^\mathsf{T} f)(x) = \left(\frac{\partial(d^\mathsf{T} f)}{\partial x_i}(x)\right)_{1 \leqslant i \leqslant n}.$$

Il s'agit donc d'une dérivation cotangente. On a en notant 0_p le vecteur nul de $\mathbb{R}^p$,

$$d^\mathsf{T} f(x) = \begin{pmatrix} 0_{N-m} \\ d \end{pmatrix}^\mathsf{T} (\Phi_K \circ \cdots \circ \Phi_2 \circ \Phi_1)(x, 0_{N-n}),$$

si bien que

$$(d^\mathsf{T} f)'(x) \cdot y = \begin{pmatrix} 0_{N-m} \\ d \end{pmatrix}^\mathsf{T} \Phi_K'(v^{K-1}) \cdots \Phi_2'(v^1) \Phi_1'(v) \begin{pmatrix} I_n \\ 0_{(N-n)\times n} \end{pmatrix} y,$$

où I_n est la matrice unité d'ordre n et $0_{p\times q}$ est la matrice nulle de type $p \times q$. On en déduit

$$\nabla(d^\mathsf{T} f)(x) = \begin{pmatrix} I_n & 0_{n\times(N-n)} \end{pmatrix} \Phi_1'(v)^\mathsf{T} \Phi_2'(v^1)^\mathsf{T} \cdots \Phi_K'(v^{K-1})^\mathsf{T} \begin{pmatrix} 0_{N-m} \\ d \end{pmatrix}.$$

Dans le produit de matrices du membre de droite, on a un vecteur à droite et une matrice à gauche. Le nombre d'opérations pour l'évaluer sera donc moindre si l'on effectue les multiplications matricielles de droite à gauche. Pour effectuer ces produits, on introduit des *variables duales* $\overline{v} \in \mathbb{R}^N$, que l'on initialise au vecteur à droite de l'expression ci-dessus

$$\overline{v} := \begin{pmatrix} 0_{N-m} \\ d \end{pmatrix}.$$

Ensuite, ces variables duales sont mises à jour en effectuant les produits matriciels sus-mentionnés, c'est-à-dire

$$\overline{v} := \Phi_k(v^{k-1})^\mathsf{T} \overline{v}, \quad \text{pour } k = K, \ldots, 1.$$

Le dernier produit matriciel nous apprend que le gradient $\nabla(d^\mathsf{T} f)(x)$ se trouve dans les n premières composantes du vecteur $\overline{v}$ ainsi obtenu.

Pour écrire cette procédure de façon précise, il reste à observer que la jacobienne de $\Phi_k(v^{k-1})$ est la matrice $N \times N$

$$\Phi'_k(v^{k-1}) = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & \\ & & 1 & & & & & \\ \frac{\partial\varphi_k}{\partial v_1}(v^{k-1}) & \cdots & \cdots & \frac{\partial\varphi_k}{\partial v_{\mu_k}}(v^{k-1}) & \cdots & \cdots & \frac{\partial\varphi_k}{\partial v_N}(v^{k-1}) & \\ & & & & 1 & & & \\ & & & & & \ddots & & \\ & & & & & & 1 & \end{pmatrix},$$

où seule sa μ_k-ième ligne peut ne pas être formée de vecteurs de base de $\mathbb{R}^N$. Alors la mise à jour $\overline{v} := \Phi_k(v^{k-1})^{\mathsf{T}}\overline{v}$ s'écrit

$$\begin{cases} \overline{v}_i := \overline{v}_i & \text{si } i \notin D_k \cup \{\mu_k\} \\ \overline{v}_i := \overline{v}_i + \dfrac{\partial\varphi_k}{\partial v_i}(v^{k-1})\overline{v}_{\mu_k} & \text{si } i \in D_k \setminus \{\mu_k\} \\ \overline{v}_{\mu_k} := \dfrac{\partial\varphi_k}{\partial v_{\mu_k}}(v^{k-1})\overline{v}_{\mu_k}. & \end{cases} \tag{5.31}$$

Il faut d'abord mettre à jour les $\overline{v}_i$ pour $i \neq \mu_k$ avant $\overline{v}_{\mu_k}$, car il est clair que c'est l'ancienne valeur de $\overline{v}_{\mu_k}$ qu'il faut utiliser dans le calcul des $\overline{v}_i$ ($i \in D_k \setminus \{\mu_k\}$).

Ce mode de différentiation porte le nom de *mode inverse* et le code réalisant ces opérations est appelé *code linéaire cotangent*. Il calcule $\nabla(d^{\mathsf{T}}f)(x)$ par le programme suivant

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{pour } i = 1, \ldots, N-m \\ \quad \overline{v}_i := 0\ ; \\ \text{pour } i = N-m+1, \ldots, N \\ \quad \overline{v}_i := d_i\ ; \\ \text{pour } k = K, \ldots, 1 \\ \quad \text{pour } i \in D_k \setminus \{\mu_k\} \\ \qquad \overline{v}_i := \overline{v}_i + \frac{\partial\varphi_k}{\partial v_i}(v^{k-1})\overline{v}_{\mu_k}\ ; \\ \quad \overline{v}_{\mu_k} := \frac{\partial\varphi_k}{\partial v_{\mu_k}}(v^{k-1})\overline{v}_{\mu_k}\ ; \\ \nabla(d^{\mathsf{T}}f)(x) := (\overline{v}_1, \ldots, \overline{v}_n)\ . \end{array}} \tag{5.32}$$

On voit que cette procédure s'adapte bien à la situation où on veut dériver une seule variable ($m = 1$ et d est le scalaire 1) par rapport à beaucoup de variables d'entrée (n grand). Dans ce cas, il suffit d'initialiser toutes les variables duales à 0 sauf $\overline{v}_N$ que l'on initialise à 1.

Illustrons cela en appliquant le mode inverse sur l'exemple de la page 242, lorsque l'on veut dériver la variable `v5` par rapport aux variables `v1` et `v2`. On commence par exécuter le code original en sauvegardant certaines quantités. Le choix de l'information à sauvegarder est délicat. Pour coller à la présentation faite ci-dessus, nous avons choisi de sauvegarder les dérivées partielles $\frac{\partial\varphi_k}{\partial v_i}(v^{k-1})$ dans une pile `p` munie du pointeur `ip`, sans essayer d'optimiser le code de manière à garder une certaine lisibilité.

```
ip = 1
p(ip) = 2*v2
```

```
v3 = v1 + v2**2
ip = ip + 1
p(ip) = 2*v1*sin(v3)
ip = ip + 1
p(ip) = v1**2 * cos(v3)
v4 = v1**2 * sin(v3)
ip = ip + 1
p(ip) = 1/v3
ip = ip + 1
p(ip) = -v4/v3**2
v4 = v4/v3
ip = ip + 1
p(ip) = exp(v4)
v5 = exp(v4)
```

Ensuite vient l'exécution du code linéaire cotangent. On a utilisé le suffixe `ad` pour désigner les variables duales $\overline{v}_i$ associées aux variables v_i.

```
v1ad = 0
v2ad = 0
v3ad = 0
v4ad = 0
v5ad = 1
v4ad = v4ad + p(ip)*v5ad
v5ad = 0
ip = ip - 1
v3ad = v3ad + p(ip)*v4ad
ip = ip - 1
v4ad = p(ip)*v4ad
ip = ip - 1
v3ad = v3ad + p(ip)*v4ad
ip = ip - 1
v1ad = v1ad + p(ip)*v4ad
v4ad = 0
ip = ip - 1
v2ad = v2ad + p(ip)*v3ad
v1ad = v1ad + v3ad
v3ad = 0
```

En fin d'exécution, le gradient de `v5` par rapport à `v1` et `v2` se trouve dans (`v1ad`, `v2ad`).

On peut à présent comprendre la difficulté de la mise en œuvre du mode inverse. Il faut d'abord exécuter le code direct (5.29) afin de mémoriser les « quantités » permettant de reconstituer les dérivées partielles $\frac{\partial \varphi_k}{\partial v_i}(v^{k-1})$ au moment où celles-ci sont utilisées dans le code linéaire cotangent (5.32). Remarquons que cette utilisation se fait en ordre inverse (de $k = K, \ldots, 1$) de l'ordre de mémorisation. Il y a donc un problème de gestion de la mémoire qui ne se posait pas avec le mode direct. Une stratégie extrême consiste à mémoriser, à chaque itération k, toute l'information nécessaire à l'évaluation des dérivées partielles $\frac{\partial \varphi_k}{\partial v_i}(v^{k-1})$, $i \in D_k$. Ceci conduit en général à un besoin en place-mémoire à peu près proportionnel au nombre d'instructions où les variables actives interviennent de façon non linéaire soit, en première approximation,

proportionnel au temps d'exécution du code original (en fait cela dépend beaucoup de ce que l'on mémorise). Cette stratégie ne peut donc fonctionner que pour les petits problèmes. Pour les grands problèmes, il est préférable de mémoriser une partie des variables du code à certains instants de l'exécution de (5.29) (voir [267 ; 1992] pour une technique indépendante de la structure du code).). Dans un problème d'évolution, par exemple, on pourra ne mémoriser que les variables d'état du problème à chaque pas de temps. Ensuite les dérivées partielles $\frac{\partial \varphi_k}{\partial v_i}(v^{k-1})$ sont recalculées à partir des informations mémorisées. On parvient ainsi à obtenir des codes moins gourmands en place-mémoire, au prix d'une augmentation du temps de calcul.

En ce qui concerne, le temps d'exécution du couple (code original, code linéaire cotangent) par rapport au temps d'exécution du code original, on a le résultat suivant.

Proposition 5.32 *Le temps $T(f, \nabla(d^{\mathsf{T}} f))$ nécessaire au calcul de f et de $\nabla(d^{\mathsf{T}} f)$ par (5.29) et (5.32) vérifie l'estimation suivante :*

$$\frac{T(f, \nabla(d^{\mathsf{T}} f))}{T(f)} \leqslant C'_{\mathcal{F}}, \tag{5.33}$$

où $T(f)$ est le temps nécessaire au calcul de f par (5.29) et $C'_{\mathcal{F}}$ est une constante ne dépendant que des fonctions intermédiaires φ_k de la bibliothèque $\mathcal{F}$.

Démonstration. L'examen des algorithmes (5.29) et (5.32) permet d'écrire :

$$T(f, \nabla(d^{\mathsf{T}} f)) = \sum_{k=1}^{K} T(\varphi_k, \nabla \varphi_k).$$

On ne compte pas dans $T(f, \nabla(d^{\mathsf{T}} f))$ le temps nécessaire à l'initialisation des variables p_i. Ensuite, en utilisant l'inégalité de Cauchy-Schwarz généralisée (A.9), on obtient

$$T(f, \nabla(d^{\mathsf{T}} f)) \leqslant \max_{1 \leqslant k \leqslant K} \left(\frac{T(\varphi_k, \nabla \varphi_k)}{T(\varphi_k)} \right) \sum_{k=1}^{K} T(\varphi_k) = C'_{\mathcal{F}}\, T(f),$$

où la constante

$$C'_{\mathcal{F}} := \max_{1 \leqslant k \leqslant K} \left(\frac{T(\varphi_k, \nabla \varphi_k)}{T(\varphi_k)} \right)$$

ne dépend que de la classe $\mathcal{F}$ des fonctions intermédiaires. □

On peut donner une estimation de $C'_{\mathcal{F}}$ lorsque les fonctions φ_k sont prises dans $\mathcal{F}_F$ (famille des fonctions Fortran). Sous des hypothèses raisonnables concernant les temps d'exécution relatifs des fonctions Fortran, on a (voir [266 ; 1989] [225 ; 1991])

$$\frac{T(f, \nabla(d^{\mathsf{T}} f))}{T(f)} \leqslant 5.$$

Par conséquent, le calcul de $f(x)$ et de $\nabla(d^{\mathsf{T}} f(x))$ par la méthode décrite demande un temps de calcul au plus égal à 5 fois celui nécessaire au calcul de $f(x)$ et cela quel que

soit le nombre de variables et quelle que soit la complexité du programme original. Comme cela a été montré dans la démonstration ci-dessus, cette inégalité ne tient pas compte du surcoût lié aux accès-mémoire qui peuvent être importants en mode inverse. En pratique, cette estimation n'est donc pas toujours vérifiée. Cependant, même pour de grands codes, il est courant d'obtenir une borne $C'_{\mathcal{F}}$ voisine de 3.

Ce qu'il faut retenir sur le mode inverse :

1. Le mode inverse de différentiation est le bon mode pour calculer les dérivées partielles d'une seule variable (ou variable de sortie) par rapport à un grand nombre de variables (ou variables d'entrée).
2. C'est donc le bon mode pour calculer le gradient d'une application à valeurs scalaires $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ ou le gradient de $d^{\mathsf{T}} f$ si f est à valeurs vectorielles.
3. À chaque variable v_i du code, on associe une variable duale $\overline{v}_i$ qui contient la variation de la variable de sortie (ou de $d^{\mathsf{T}} f(x)$, pour un vecteur d donné, en cas de sortie vectorielle) par rapport à une perturbation de la variable v_i. Sa valeur est nulle si v_i n'a pas d'influence sur la variable de sortie.
4. Le code linéaire cotangent peut s'obtenir en « dualisant » le code original ligne par ligne. Cette dualisation doit se faire en ordre inverse de l'ordre d'exécution dans le code original. Si dans ce dernier une instruction s'interprète comme une application $\{v_i : i \in D_k\} \mapsto v_{\mu_k}$, les instructions correspondantes dans le code linéaire cotangent forment une application entre variables duales de la forme $(\overline{v}_i : i \in D_k \cup \{\mu_k\}) \mapsto \{\overline{v}_i : i \in D_k \cup \{\mu_k\}\}$.
5. La difficulté principale dans l'écriture de codes linéaires cotangents est la gestion-mémoire permettant de transmettre du code original au code linéaire cotangent, l'information nécessaire à l'évaluation des dérivées partielles $\frac{\partial \varphi_k}{\partial v_i}(v^{k-1})$.

5.6 Développement de codes d'optimisation ⊖

5.6.1 Communication directe et inverse ▲

La communication est bien organisée permettant à des groupes différents d'acteurs d'écrire des programmes indépendamment.

Nous appelons ci-dessous *optimiseur*, un code informatique dans lequel est implémenté un algorithme destiné à résoudre un problème d'optimisation ayant une structure bien précise. On dit que l'optimiseur est écrit en *communication directe* (CD), s'il est destiné à être utilisé comme à la figure 5.2. Dans cette figure, nous avons représenté en bleu et en pointillés la partie qui doit être écrite par l'utilisateur du code d'optimisation et en rouge et en lignes continues la partie du programme qui doit être écrite par l'auteur du code d'optimisation. L'optimiseur sera donc appelé par un programme écrit par l'utilisateur. L'optimiseur est écrit quant à lui indépendamment du problème à résoudre et lorsqu'il a besoin d'information sur ce problème, il appelle un *simulateur*, contenant le code qui évalue les objets définissant le problème et qui ont un sens pour l'optimiseur. Ainsi, en général, le simulateur évalue le critère $f(x)$ et/ou les contraintes $c(x)$ en l'itéré x fourni par l'optimiseur. C'est le fanion

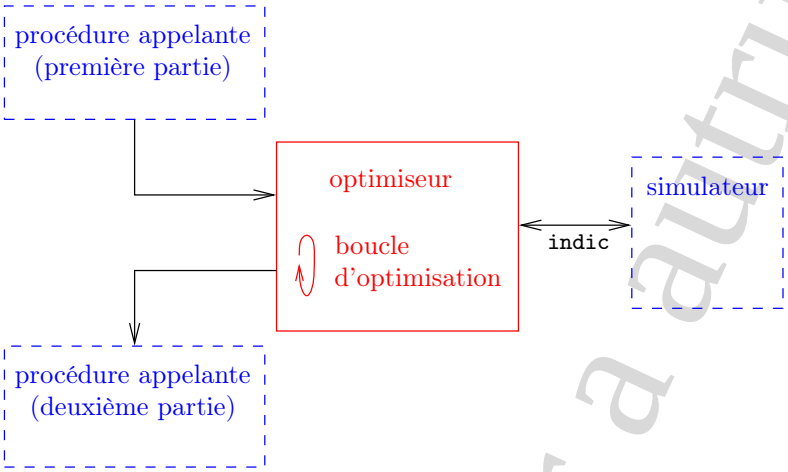


Fig. 5.2. Shéma d'un code avec un optimiseur utilisant la communication directe

`indic`, positionné par l'optimiseur, qui spécifiera ce qui lui est nécessaire. Le rôle de l'optimiseur est de mettre à jour x. Pour le dire autrement, l'optimiseur ne connaît pas le problème qu'il est occupé à résoudre et ne connaît que les objets abstraits qui décrivent la structure du problème; c'est en fait un code généraliste travaillant sur les objets mathématiques, comme nous allons le faire dans cet ouvrage. De son côté, le simulateur ne connaît pas les subtilités propres à la technique algorithmique mise en œuvre pour résoudre le problème (multiplicateur de Lagrange, fonction duale, facteur de pénalisation lui sont étrangers) et est décrit par les grandeurs physiques, chimiques, économiques ou mathématiques..., qui ont du sens pour lui.

Un optimiseur peut aussi être écrit en *communication inverse* (CI). L'organisation d'un tel code est représentée dans le schéma de la figure 5.3.

Le tableau 5.2 compare les deux types de communication. Le signe ⊖ signale que le mode en rapport avec ce signe est plus faible sur la caractéristique considérée que l'autre mode de communication. Le signe ⊕ signale le contraire : en ce qui concerne la caractéristique considérée, le mode en rapport avec ce signe est avantagé par rapport à l'autre mode. Passons en revue ces caractéristiques. L'inconvénient principal de

	communication directe (CD)	communication inverse (CI)
écriture du simulateur	⊖	⊕
environnement multi-langage	⊖	⊕
écriture de l'optimiseur	⊕	⊖

Tableau 5.2. Comparaison des modes de communication directe et inverse

la CD, selon nous, est de demander à l'utilisateur du code d'optimisation de devoir

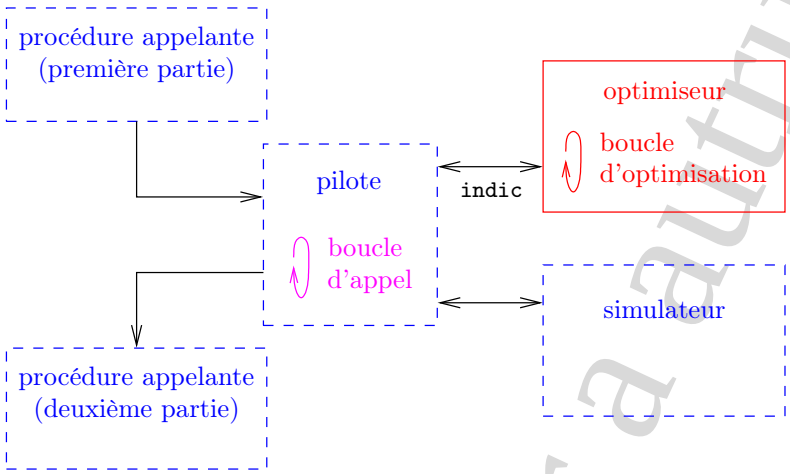


Fig. 5.3. Shéma d'un code avec un optimiseur utilisant la communication inverse

écrire un *simulateur*, c'est-à-dire une procédure à la séquence d'appel stricte réalisant les tâches demandées par l'optimiseur (calcul des fonctions définissant le problème d'optimisation et éventuellement de leurs dérivées). De plus, l'instruction d'appel de ce simulateur a sa structure figée par ce que le code d'optimisation a prévu. Cette rigidité est parfois gênante. Si des langages de programmation différents sont utilisés dans le code utilisateur et dans l'optimiseur, un seul interfaçage devra être introduit en CI et deux en CD. Il faut en effet que le programme appelant prévoit un appel de l'optimiseur dans son propre langage dans les deux modes de communication, mais en CD une interface doit aussi être prévue entre l'optimiseur et le simulateur supposés avoir été écrits dans des langages différents. Ainsi il peut être délicat d'utiliser un optimiseur écrit en Fortran et en CD dans un code Matlab.

5.6.2 Profils de performance

Comment comparer deux codes d'optimisation ? Comment savoir si une idée apporte une amélioration à un algorithme ? Ces questions ne se posent pas seulement en optimisation, mais dans tout domaine du calcul scientifique dans lequel on cherche à améliorer des solveurs généralistes. Il est coutumier de comparer les résultats des solveurs en question sur des bancs d'essai de problèmes-tests. Cela conduit à des tableaux de résultats qu'il n'est pas aisé d'analyser. Il est en effet rare qu'un solveur se comporte mieux qu'un autre sur tous les problèmes-tests de la collection considérée. Les profils de performance, que nous allons introduire, améliorent la situation en remplaçant les tableaux par des courbes dont l'interprétation est plus rapide pourvu que l'on en ait les clés de lecture.

Soient $\mathcal{S}$ un ensemble de solveurs et $\mathcal{P}$ un ensemble de problèmes-tests. Les profils de performance sont utilisés pour comparer l'efficacité *relative* des solveurs de $\mathcal{S}$ sur les problèmes-tests de $\mathcal{P}$. Soit

$$\tau_{p,s} := \text{performance du solveur } s \text{ sur le problème-test } p,$$

où la *performance* est un critère de comparaison, tel que le temps CPU ou le nombre d'évaluations de fonction ou de dérivée. Pour que ce qui suit ait un sens, il faut qu'une telle performance ait une valeur plus faible lorsque le solveur est meilleur. La *performance relative* d'un solveur s (par rapport aux autres solveurs de $\mathcal{S}$) sur un problème-test p est le rapport

$$\rho_{p,s} = \frac{\tau_{p,s}}{\tau_{p,\min}}, \quad \text{où } \tau_{p,\min} := \min\{\tau_{p,s'} : s' \in \mathcal{S}\}.$$

Bien sûr $\rho_{p,s} \geqslant 1$. Par ailleurs, un solveur s ne réussissant pas à résoudre un problème-test p devrait normalement avoir une performance $\tau_{p,s}$ infinie, ce qui ne se traite pas bien numériquement. Pour cette raison, on décide de limiter les performances relatives $\rho_{p,s}$ à une valeur maximale $\bar{\rho} > 1$ (ou de limiter les performances $\tau_{p,s}$ à $\bar{\rho}\,\tau_{p,\min}$). Dès lors, on aura $\rho_{p,s} = \bar{\rho}$, soit parce que le solveur s a en réalité sur le problème-test p une performance supérieure à $\bar{\rho}\,\tau_{p,\min}$, soit parce qu'il ne réussit pas à résoudre le problème p.

Le *profil de performance* du solveur s (par rapport aux autres solveurs de $\mathcal{S}$) est la fonction

$$t \in [1, \bar{\rho}] \mapsto \wp_s(t) := \frac{|\{p \in \mathcal{P} : \rho_{p,s} \leqslant t\}|}{|\mathcal{P}|} \in [0, 1],$$

où $|\cdot|$ désigne le cardinal d'un ensemble (le nombre de ses éléments). Cette fonction est croissante, constante par morceaux et semi-continue supérieurement. Il y a un profil pour chaque solveur de $\mathcal{S}$. La figure 5.4 donne un exemple de profils de performance,

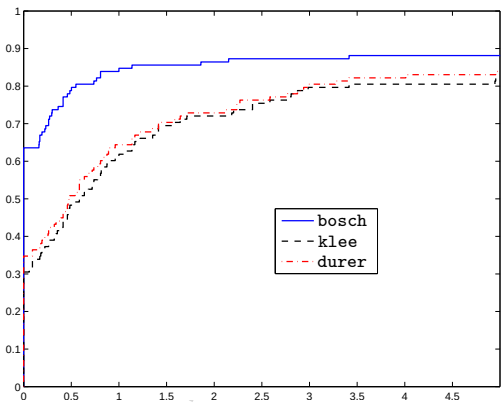


Fig. 5.4. Profils de performance typiques pour trois solveurs

correspondant à trois solveurs appelés `bosch`, `durer` et `klee`. Le solveur `bosch` apparaît plus performant que les deux autres, pour des raisons qui devraient être claires après avoir pris connaissance des clés de lecture données ci-après.

Seuls trois faits doivent être gardés à l'esprit pour avoir une interprétation correcte des profils de performance :

- $\wp_s(1)$ donne la fraction de problèmes-tests pour lesquels le solveur s est le meilleur; comme deux solveurs peuvent avoir le même score et que certains solveurs peuvent ne pas réussir à résoudre un problème-test, il n'est pas garanti que l'on ait $\sum_{s\in\mathcal{S}} \wp_s(1) = 1$;
- par définition de $\bar{\rho}$, $\wp_s(\bar{\rho}) = 1$; par ailleurs, pour $\varepsilon > 0$ petit, $\wp_s(\bar{\rho} - \varepsilon)$ donne la fraction de problèmes-tests que le solveur s peut résoudre; cette valeur est indépendante de la performance choisie pour la comparaison;
- on peut donner l'interprétation suivante de la valeur $\wp_s(t)$, obtenue en inversant l'application $t \mapsto \wp_s(t)$: pour la fraction $\wp_s(t)$ de problèmes-tests de $\mathcal{P}$, la performance du solveur s n'est jamais pire que t fois celle du meilleur solveur (celui-ci varie en général d'un problème-test à l'autre); de ce point de vue, l'argument auquel $\wp_s$ atteint sa valeur « presque » maximale $\wp_s(\bar{\rho} - \varepsilon)$ est significative.

Avec les profils de performance, l'efficacité relative des solveurs s de $\mathcal{S}$ apparaît en un coup d'œil : plus haut est le graphe de $\wp_s$, meilleur est le solveur s.

5.7 Estimation de la précision numérique ▲

Voir ce qu'en disent Hamming [280 ; 1986] et Gill, Murray et Wright [233 ; 1981].

5.8 Pourquoi étudier l'optimisation numérique ?

Pourquoi est-il utile d'étudier les algorithmes d'optimisation ? La question mérite d'être posée. On pourrait en effet penser que ceci n'est plus nécessaire puisqu'il existe un certain nombre de bibliothèques de programmes d'optimisation (voir la section **??**) dans lesquels on pourra souvent trouver le code d'optimisation convenant au problème que l'on veut résoudre. Notons que ce point de vue pourrait être tenu à propos d'autres domaines de l'analyse numérique, tels que l'algèbre linéaire numérique, l'étude des schémas d'intégration des équations différentielles, les techniques de résolution des équations aux dérivées partielles, *etc.* Les remarques suivantes ne font pas le tour de la question, mais devraient permettre de nuancer cette position.

1. Face à un problème d'optimisation à résoudre, il faut faire un choix d'algorithmes. Si le problème a une structure classique (voir la section 1.4 pour une classification simplifiée) et ne demande pas trop de temps de calcul, ce choix pourra se faire facilement et un code de bibliothèque pourra être satisfaisant. Il est cependant nécessaire de bien comprendre les possibilités de ces codes et donc des algorithmes qui y sont implémentés pour faire un bon choix. Il faut aussi pouvoir saisir les subtilités de leur documentation pour pouvoir adapter avec pertinence leurs options au problème à résoudre, ce qui requiert également une bonne maîtrise des algorithmes implémentés.
2. Les codes d'optimisation fonctionnent rarement en boîte noire. Ceci est dû au fait qu'une solution d'un problème d'optimisation s'obtient grâce à un processus qui doit converger. Il ne s'agit donc pas d'un processus ayant un nombre déterminé d'opérations. Diagnostiquer un comportement inattendu est souvent délicat. Les

codes d'optimisation bien conçus fournissent parfois ces diagnostics, mais il faut pouvoir les comprendre. Ici aussi une bonne connaissance des algorithmes est essentielle.

3. Les codes que l'on trouve dans les bibliothèques d'optimisation sont conçus pour résoudre des problèmes à la structure classique. Même si ceux-ci ont été écrits de manière à ce qu'ils puissent être utilisés pour résoudre des problèmes variés, on gagnera souvent à les adapter au problème qui nous intéresse. Ceci est d'autant plus vrai que le problème est de grande taille, lorsque les temps de calcul sont important. Modifier les algorithmes de manière à exploiter au mieux la structure d'un problème demande de solides connaissances en algorithmique.
4. Le développement des algorithmes n'est pas terminé. Il est donc nécessaire d'enseigner ces matières aux futurs chercheurs ou ingénieurs, aux futurs numériciens qui feront progresser la discipline.

Cet ouvrage est donc destiné aux étudiants désirant se familiariser avec les techniques numériques en optimisation. Il s'adresse également aux praticiens souhaitant implémenter un algorithme ou comprendre le comportement d'un code d'optimisation sur un problème particulier. Il sera également utile aux chercheurs voulant connaître les techniques permettant d'analyser les algorithmes, d'étudier et de prévoir leur comportement. L'ouvrage contient en effet de nombreux résultats de convergence que l'on ne trouve que dans les revues spécialisées.

Notes

L'importance de la classe P a été soulignée par Edmonds [175 ; 1965] et Cobham [117 ; 1965]. Comme autres ouvrages sur la théorie de la complexité, citons [58, 428, 429].

L'utilisation de l'état adjoint pour calculer des produits hessienne-vecteur a été proposé en météorologie par Le Dimet, Navon et Daescu [355]. Le livre de Griewank (et Walther) [268, 271] et sa revue [269] constituent d'excellents états de l'art sur les techniques de différentiation automatique. Ils ont été écrits par l'un des spécialistes les plus actifs dans ce domaine. On pourra aussi se référer aux monographies [270] et [225]. Le comportement de la différentiation automatique sur des programmes contenant des processus itératifs est analysé dans [220 ; 1992]. Pour des résultats de complexité en différentiation automatique, nous renvoyons le lecteur à [410 ; 2008] et sa bibliographie.

La notion de profil de performance a été introduite par Dolan et Moré [157 ; 2002] et est maintenant couramment utilisée pour comparer l'efficacité des codes d'optimisation. Divers environnements de comparaison de codes permettent de les générer automatiquement, citons Libopt [224].

Exercices

5.1. Soient $\mathbb{E}$ un espace normé, dont la norme est notée $\|\cdot\|$, et $F : \mathbb{E} \to \mathbb{E}$ une application différentiable en $x_* \in \mathbb{E}$ dont la dérivée $F'(x_*)$ est inversible. Alors $F(x) \sim (x - x_*)$ au sens de (5.3).

5.2. *Vitesse de convergence en termes du nombre de chiffres significatifs corrects.* Démontrer les propositions 5.4, 5.6 et 5.11.

5.3. *Vitesse de convergence en termes d'une fonction s'annulant au point limite.* Démontrer les propositions 5.7 et 5.13.

5.4. *Convergence q-quadratique en termes de déplacements.* Démontrer la proposition 5.14.

5.5. *Suite de Fejér* [483]. Soit $\mathbb{E}$ un espace euclidien (produit scalaire $\langle\cdot,\cdot\rangle$ et norme associée $\|\cdot\|$). La *cible de Fejér* d'une suite $\{x_k\} \subseteq \mathbb{E}$ est l'ensemble

$$C(\{x_k\}) := \{x \in \mathbb{E} : \text{pour tout } k \in \mathbb{N}, \text{ on a } \|x_{k+1} - x\| \leqslant \|x_k - x\|\}.$$

On dit qu'une suite $\{x_k\}$ de $\mathbb{E}$ est une *suite de Fejér* si $C(\{x_k\}) \neq \emptyset$.

1) $C(\{x_k\})$ est un convexe fermé (éventuellement vide).
2) Une suite de Fejér est bornée.
3) Si une suite $\{x_k\}$ a un point d'adhérence $\bar{x} \in C(\{x_k\})$, alors elle converge vers $\bar{x}$.
4) Si $\{x_k\}$ est suite de Fejér, alors

$$x_{k+1} \in \bigcap_{x \in C(\{x_k\})} \bar{B}(x, \|x_k - x\|).$$

Note. *Lipót Fejér* est un mathématicien hongrois (1880-1959). L'étude systématique des suites de Fejér et de leur lien avec l'optimisation a commencé avec le mathématicien russe Eremin [178, 179, 180 ; 1965-1979].

5.6. *Dérivée du critère du problème* (5.24)–(5.25). On considère le problème de commande optimale (5.24)–(5.25). Soit $f(u)$ le critère (5.25). Montrez que, pour $v : [0,T] \to \mathbb{R}^m$,

$$f'(u) \cdot v = \int_0^T \Big(J'_u(y(t),u(t),t) \cdot v(t) - p(t)^{\mathsf{T}} \varphi'_u(y(t),u(t),t) \cdot v(t) \Big)\, \mathrm{d}t,$$

où y est la solution de (5.24) et p est l'état adjoint défini comme solution de l'équation adjointe

$$\begin{cases} \dot{p}(t) = -\varphi'_y(y(t),u(t),t)^{\mathsf{T}} p(t) + \nabla_y J(y(t),u(t),t), & \text{pour tout } t \in]0,T[\\ p(T) = -\nabla J^T(y(T)). \end{cases}$$

5.7. *DA d'instructions à valeurs vectorielles.* Supposons que l'on ait dans le code original une instruction à valeurs vectorielles (par exemple par l'intermédiaire d'une procédure) de la forme

$$v_M := \varphi(v_D),$$

où M et D sont des parties de $[1:N]$, pouvant être disjointes ou non et v_M désigne le vecteur de $\mathbb{R}^{|M|}$ dont les composantes sont les variables v_i du code avec indices $i \in M$ (désignation analogue pour v_D). On indice par $i \in M$ les composantes de φ. Montrez que les instructions du code linéaire tangent s'écrivent

$$\dot{v}_M := \varphi'(v_D)\dot{v}_D, \quad v_M := \varphi(v_D)$$

et celles du code adjoint s'écrivent

$$\overline{v}_D := \overline{v}_{D\setminus M} + \varphi'(v_D)^{\mathsf{T}} \overline{v}_M, \quad \overline{v}_{M\setminus D} := 0. \tag{5.34}$$

5.8. *DA de solveurs linéaires.* Supposons qu'une partie d'un programme consiste à résoudre le système linéaire, ce que l'on peut écrire

$$x := A^{-1} b,$$

où la matrice carrée inversible A et le vecteur $b \in \mathbb{R}^n$ peuvent dépendre des variables indépendantes, qu'il n'est pas nécessaire de spécifier ici. Montrez que les instructions du code linéaire tangent s'écrivent

$$x := A^{-1}b, \quad \dot{x} := A^{-1}(\dot{b} - \dot{A}x)$$

et celles du code adjoint s'écrivent

$$x := A^{-1}b, \quad \overline{x} := A^{-\mathsf{T}}\overline{x}, \quad \overline{b} := \overline{b} + \overline{x}, \quad \overline{A} := \overline{A} - \overline{x}x^{\mathsf{T}}, \quad \overline{x} := 0.$$

Que deviennent les instructions des codes tangent et adjoint si le code original s'écrit $b := A^{-1}b$ (la solution du système linéaire est placée dans b).

Remarque. Dans le cas où la matrice A a une *structure creuse* et où seuls les éléments d'indices $(i,j) \in N$ de A sont mémorisés, il n'est pas nécessaire de s'intéresser aux $\overline{A}_{ij}$ pour $(i,j) \notin N$ et on pourra ne mettre à jour que les éléments de $\overline{A}$ avec indices (i,j) dans N par $\overline{A}_{ij} := \overline{A}_{ij} - \overline{x}_i x_j$. Autrement dit, il ne faut pas introduire de variables duales associées aux éléments de A qui sont toujours nuls.

5.9. *DA d'une fonction quadratique.* Donner les codes direct et adjoint d'un code qui calcule la fonction quadratique

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

Partie II

Méthodes de l'optimisation sans contrainte

6 Méthodes à directions de descente

Il est aisé d'en conclure que la valeur de $f(x-\alpha\nabla f(x))$ *deviendra inférieure à* $f(x)$ *si* α *est suffisamment petit. Si, maintenant,* α *vient à croître, et si, comme nous l'avons supposé, la fonction* f *est continue, la valeur de* $f(x-\alpha\nabla f(x))$ *décroîtra jusqu'à ce qu'elle* [...] *coïncide avec une valeur minimum, déterminée par l'équation à une inconnue* $D_\alpha f(x-\alpha\nabla f(x)) = 0$. *Il suffira donc, ou de résoudre cette dernière équation, ou du moins d'attribuer à* α *une valeur suffisamment petite, pour obtenir une nouvelle valeur de* f *inférieure à* $f(x)$. *Si la nouvelle valeur de* f *n'est pas un minimum, on pourra en déduire, en opérant toujours de la même manière, une troisième valeur plus petite encore ; et, en continuant ainsi, on trouvera successivement des valeurs de* f *de plus en plus petites, qui convergeront vers une valeur minimum de* f.

L.-A. Cauchy, extrait de [97 ; 1847, page 537], récrit avec les notations du présent ouvrage.

Ce chapitre introduit une classe importante d'algorithmes de résolution des problèmes d'optimisation sans contrainte. Le concept central est celui de direction de descente (section 6.1). On le retrouvera dans des contextes variés, également pour résoudre des problèmes avec contraintes. Tous les algorithmes d'optimisation n'entrent pas dans ce cadre. Une autre classe importante de méthodes se fonde sur la notion de région de confiance qui sera vue au chapitre **??**.

Après avoir décrit le fonctionnement d'un algorithme à directions de descente (section 6.1), nous donnons quelques exemples d'algorithmes de ce type (section 6.2), qui seront étudiés plus en détail dans d'autres chapitres. Nous décrivons ensuite les principales règles de recherche linéaire (section 6.3) et étudions la contribution de la recherche linéaire à la convergence et à la complexité itérative des algorithmes à directions de descente (section 6.4). Nous concluons ce chapitre par sa section 6.5, où sont énoncés des critères permettant d'estimer la qualité de la direction de descente proche d'une solution : celui de l'admissibilité asymptotique du pas unité (section 6.5.1) et celui de la convergence superlinéaire (section 6.5.2).

6.1 Principes généraux

Considérons le problème d'optimisation sans contrainte

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} f(x), \tag{6.1}$$

où $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ est supposée régulière. On supposera donné un produit scalaire $\langle\cdot,\cdot\rangle$ sur $\mathbb{R}^n$ et on notera $\|\cdot\| = \langle\cdot,\cdot\rangle^{1/2}$ la norme associée. On note aussi $\nabla f(x)$ et $\nabla^2 f(x)$ le gradient et la hessienne de f en x pour ce produit scalaire.

On s'intéresse ici à une classe d'algorithmes qui sont fondés sur la notion de direction de descente. On dit que d est une *direction de descente* de f en $x \in \mathbb{R}^n$ si

$$f'(x) \cdot d < 0.$$

Par définition du gradient (section 7.1), il revient au même de dire que $\langle \nabla f(x), d\rangle < 0$ ou encore que d fait avec l'opposé du gradient $-\nabla f(x)$ un angle θ, appelé *angle de descente*, qui est strictement plus petit que $90°$:

$$\theta := \arccos \frac{\langle -\nabla f(x), d\rangle}{\|\nabla f(x)\|\,\|d\|} \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right[. \tag{6.2}$$

La notion d'angle définie ci-dessus dépend du produit scalaire et n'est pas invariante par rotation des vecteurs ! L'ensemble des directions de descente de f en x,

$$\{d \in \mathbb{R}^n : \langle \nabla f(x), d\rangle < 0\},$$

forme un demi-espace ouvert de $\mathbb{R}^n$ (illustration à la figure 6.1).

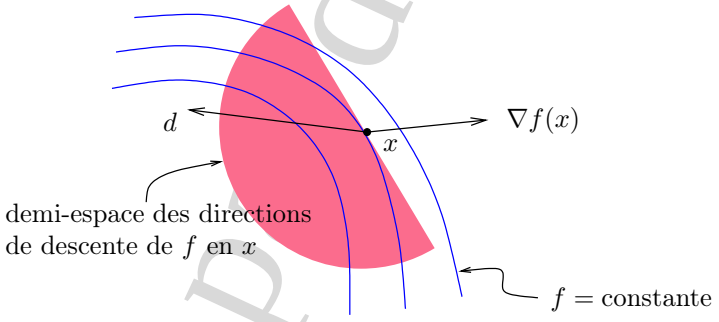


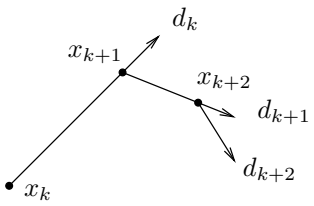
Fig. 6.1. Demi-espace (translaté) des directions de descente d de f en x.

Par définition de la dérivée, on voit que si d est une direction de descente,

$$f(x + \alpha d) < f(x), \text{ pour tout } \alpha > 0 \text{ suffisamment petit}$$

et donc que f décroît strictement dans la direction d. De telles directions sont intéressantes en optimisation car, pour faire décroître f, il suffit de faire un déplacement le

long de d. Les méthodes à directions de descente utilisent cette idée pour minimiser une fonction (voir ce qu'en disait Cauchy dans le texte en épigraphe de ce chapitre, lorsque $d = -\nabla f(x)$). Elles construisent la suite des itérés $\{x_k\}_{k\geqslant 1}$ approchant une solution x_* de (6.1) par la récurrence



$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k, \quad \text{pour } k \geqslant 1, \tag{6.3}$$

où $\alpha_k > 0$ est appelé le *pas* et d_k est une direction de descente de f en x_k. Pour définir une méthode à directions de descente il faut donc spécifier deux choses :

- dire comment la direction d_k est calculée; la manière de procéder donne le nom à l'algorithme;
- dire comment on détermine le pas α_k; c'est ce que l'on appelle la *recherche linéaire*; la section 6.3 sera consacrée à la description des principales techniques de recherche linéaire.

Décrivons cette classe d'algorithmes de manière précise.

Algorithme 6.1 (méthode à directions de descente — une itération)

On suppose qu'au début de l'itération k, on dispose d'un itéré $x_k \in \mathbb{R}^n$.

1. *Test d'arrêt* : Si $\nabla f(x_k) \simeq 0$, arrêt de l'algorithme.
2. Choix d'une direction de descente $d_k \in \mathbb{R}^n$.
3. *Recherche linéaire* : déterminer un pas $\alpha_k > 0$ le long de d_k de manière à « faire décroître f suffisamment ».
4. $x_{k+1} := x_k + \alpha_k d_k$.

Le test de l'étape 1 est discuté dans les paragraphes qui suivent. Le sens à donner à l'expression « faire décroître f suffisamment » à l'étape 3 sera précisé dans la section 6.3.

Dans les problèmes sans contrainte, il est normal que le test d'arrêt (étape 1) porte sur la petitesse du gradient : $\nabla f(x_k) \simeq 0$. C'est en effet ce que suggère la condition nécessaire d'optimalité du premier ordre $\nabla f(x_*) = 0$ (voir (4.15)). Comme x_k n'est jamais exactement égal à x_*, ce test ne pourra fonctionner que si $\nabla f(x)$ est faible en norme pour x voisin de x_*, ce qui revient pratiquement à supposer que f est de classe $\mathcal{C}^1$. Par ailleurs, un tel test d'arrêt suggère qu'un algorithme à directions de descente ne peut pas trouver mieux qu'un point stationnaire de f. C'est en effet souvent le cas, mais ce point faible est rarement rédhibitoire en pratique. On peut noter qu'il existe une version élaborée des méthodes à régions de confiance qui permet de trouver un minimum local, évitant ainsi les points stationnaires qui n'ont pas cette propriété de minimalité locale. Nous étudierons cette approche au chapitre **??**.

On est parfois tenté d'arrêter l'algorithme si le critère f ne décroît presque plus. Ceci n'est pas sans risque et il vaut mieux ne pas utiliser un tel test d'arrêt, car une faible variation du critère peut se produire loin d'une solution. En effet, au premier ordre, $f(x_{k+1}) \simeq f(x_k)$ revient à $\alpha_k \langle \nabla f(x_k), d_k \rangle \simeq 0$, ce qui peut arriver si le pas α_k est petit (c'est en général très suspect) ou si la direction de descente fait avec l'opposé du gradient un angle proche de 90 degrés, une situation qui se rencontre fréquemment (si l'algorithme est bien conçu, cela traduit un mauvais conditionnement du problème).

Même si le test d'arrêt de l'étape 1 est suggéré par la théorie, on peut s'interroger sur sa pertinence, du point de vue suivant : peut-on préciser dans quelle mesure le fait d'avoir un petit gradient implique que l'itéré est proche d'un point stationnaire de f ? Le cas où f est quadratique strictement convexe est instructif :

$$f(x) = \frac{1}{2} x^{\mathsf{T}} A x - b^{\mathsf{T}} x, \qquad \text{avec } A \succ 0.$$

Minimiser f revient alors à déterminer l'unique solution x_* du système linéaire $Ax = b$. Par ailleurs, le gradient de f (pour le produit scalaire euclidien) est le résidu du système linéaire : $\nabla f(x) = Ax - b$. Or on sait bien que, si le conditionnement de A est élevé, on peut très bien avoir $\|Ax - b\|_2$ petit et une erreur $\|x - x_*\|_2$ importante. Le test d'arrêt portant sur la petitesse du gradient doit donc être interprété avec précaution. Le lemme suivant apportera un nouvel éclairage sur cette question, toujours dans le cas où la fonction est quadratique.

Lemme 6.2 (Wilkinson) *Soient $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ non nul, $b \in \mathbb{R}^n$ et $x \in \mathbb{R}^n$ non nul. Alors*

$$\frac{\|Ax - b\|_2}{\|A\|_2 \, \|x\|_2} = \min \left\{ \frac{\|\Delta A\|_2}{\|A\|_2} : (A + \Delta A)x = b \right\}.$$

Démonstration. Notons $r := Ax - b$. Si ΔA vérifie $(A + \Delta A)x = b$, on a $r = -(\Delta A)x$, dont on déduit $\|r\|_2 \leqslant \|\Delta A\|_2 \, \|x\|_2$ ou encore

$$\frac{\|r\|_2}{\|A\|_2 \, \|x\|_2} \leqslant \frac{\|\Delta A\|_2}{\|A\|_2}.$$

On obtient l'égalité ci-dessus en prenant $\Delta A = -r x^{\mathsf{T}} / \|x\|_2^2$, qui vérifie bien $(A + \Delta A)x = b$. □

Ce lemme nous apprend que si le gradient $\nabla f(x) = Ax - b$ est petit devant $\|A\|_2 \, \|x\|_2$, alors x est solution d'un système linéaire $(A + \Delta A)x = b$ (ou minimiseur de la fonction quadratique précédente avec A remplacé par $A + \Delta A$), avec ΔA petit devant A. On dit que l'on a interprété la précision de x en termes d'*erreur amont* (*backward error* [291]).

Certains algorithmes convergent lorsque $\alpha_k = 1$ pour tout indice k, donc sans faire de recherche linéaire. Il en est ainsi de l'algorithme proximal de la section 7.2 ou de l'algorithme de Newton étudié au chapitre 9. Mais le plus souvent, ces algorithmes ne sont définis et ne convergent que si le premier itéré x_1 est suffisamment proche d'une solution (c'est le cas pour l'algorithme de Newton) ou si la fonction possède des propriétés particulières (c'est la convexité du critère qui joue un rôle important

dans l'algorithme proximal). Pour ces algorithmes, on peut voir l'introduction du pas α_k calculé par recherche linéaire comme une technique de *globalisation de la convergence*, c'est-à-dire une technique permettant de forcer la convergence de la suite des itérés même lorsque le premier itéré est loin d'une solution. Nous verrons à la section 6.4 comment la recherche linéaire contribue en effet de manière significative à la convergence des itérés.

L'introduction d'un algorithme se fait d'ailleurs souvent comme suit. On le conçoit à partir de considérations locales (dans l'algorithme de Newton, on linéarise les équations qui déterminent le type de solution recherchée), pour qu'il ait une bonne vitesse de convergence proche d'une solution. On utilise ensuite une technique de globalisation de la convergence, comme la recherche linéaire (section 6.3) ou les régions de confiance (chapitre **??**), pour forcer la convergence. Des conditions pour que la recherche linéaire n'empêche pas de retrouver l'algorithme initial local (avec $\alpha_k = 1$ donc) seront mises en évidence à la section 6.5.1.

6.2 Exemples de méthodes à directions de descente

Oublions un instant la recherche linéaire et concentrons nous sur quelques exemples de directions de descente. On note

$$g_k := \nabla f(x_k)$$

le gradient de f en x_k pour un produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle$.

6.2.1 Algorithme du gradient (ou de la plus profonde descente)

Dans cet algorithme, on prend pour direction de recherche

$$\boxed{d_k = -g_k,}$$

appelée *direction du gradient* ou *de la plus profonde descente*. Cette dernière appellation vient du fait que, si g_k est non nul, la direction est parallèle à la solution du problème en $d \in \mathbb{R}^n$ ci-dessous dans lequel on minimise le modèle affine de f (développement au premier ordre) sur une boule de rayon $\Delta > 0$ quelconque :

$$\begin{cases} \min\ f(x_k) + \langle g_k, d \rangle \\ \|d\| \leqslant \Delta. \end{cases}$$

Lorsque $\Delta > 0$ et $g_k \neq 0$, la solution de ce problème est en effet $d = -(\Delta/\|g_k\|)g_k$ (exercice 4.11).

La direction du gradient est évidemment une direction de descente si x_k n'est pas un point stationnaire ($g_k \neq 0$) puisque

$$f'(x_k) \cdot (-g_k) = \langle g_k, -g_k \rangle = -\|g_k\|^2 < 0.$$

L'algorithme qui utilise cette direction de descente porte le nom d'*algorithme du gradient* ou d'*algorithme de la plus profonde descente*.

Par son utilisation de directions de plus profonde descente et par sa simplicité de mise en œuvre, l'algorithme du gradient semble séduisant. Cependant, si le produit scalaire utilisé pour calculer le gradient n'est pas bien choisi, cet algorithme convergera très lentement. Si l'on n'a pas d'idées sur ce que doit être le bon produit scalaire, il vaudra donc mieux éviter cette méthode. On notera que, pour minimiser une fonction quadratique strictement convexe de deux variables (ce qui correspond à résoudre un système linéaire de deux équations linéaires à deux inconnues), l'algorithme demande en général un nombre infini d'itérations, alors que la solution est évidente et aisément calculable à la main ou par d'autres algorithmes en un nombre fini d'opérations. En pratique, on observe souvent que $-g_k$ est une bonne direction de descente loin d'une solution mais qu'elle est à éviter dès que l'on entre dans le voisinage d'une solution x_*, là où les termes du second ordre d'un développement de Taylor de f autour de x_* jouent un grand rôle. En fait, comme nous le verrons, le défaut de cet algorithme est d'ignorer la courbure de f, qui est décrite par sa hessienne.

Malgré ses piètres performances numériques, cet algorithme mérite d'être étudié. Les techniques utilisées pour l'analyser servent en effet souvent de guide dans l'étude d'algorithmes plus complexes. C'est à ce titre que nous en en dirons davantage à la section 7.1.

6.2.2 Algorithme du gradient conjugué

L'*algorithme du gradient conjugué* peut être vu comme une légère modification de l'algorithme du gradient puisque la direction le long de laquelle le pas α_k sera déterminé s'écrit ($k = 1$ est l'indice du premier itéré) :

$$\boxed{d_k = \begin{cases} -g_1 & \text{si} \quad k = 1 \\ -g_k + \beta_k d_{k-1} & \text{si} \quad k \geqslant 2. \end{cases}}$$

Cette direction est appelée *direction du gradient conjugué*. Le scalaire $\beta_k \in \mathbb{R}$ peut prendre différentes valeurs, ce qui donne à l'algorithme des propriétés différentes.

La forme de cette direction sera justifiée au chapitre 8 dans lequel l'algorithme est étudié en détail. Remarquons déjà que si l'on choisit α_{k-1} de manière à minimiser le critère le long de la direction précédente (c'est-à-dire si α_{k-1} minimise la fonction $\alpha \mapsto f(x_{k-1} + \alpha d_{k-1})$, ce qui implique que $\langle g_k, d_{k-1} \rangle = 0$), la direction d_k est bien de descente en un point non stationnaire ($g_k \neq 0$), puisque

$$f'(x_k) \cdot d_k = \langle g_k, d_k \rangle = -\|g_k\|^2 < 0.$$

Cette manière de déterminer le pas n'est pas acceptable en pratique lorsque le critère est non linéaire, sans propriétés particulières (voir la section 6.3.2). Nous renvoyons le lecteur à la section 8.2.6 pour une discussion sur ce sujet.

6.2.3 Algorithme de Newton

Dans l'*algorithme de Newton* pour l'optimisation sans contrainte, on détermine une direction d_k par la formule suivante :

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

Cette direction est appelée *direction de Newton*. Il faut évidemment que la hessienne de f en l'itéré courant soit inversible pour que cette définition ait un sens. Cet algorithme sera étudié en détail au chapitre 9.

Remarquons que si x_* est un minimum vérifiant les conditions d'optimalité du second ordre (CS2), $\nabla^2 f(x_*)$ est définie positive ($\langle \nabla^2 f(x_*)v, v\rangle > 0$, pour tout $v \neq 0$), et donc $\nabla^2 f(x)$ est également définie positive lorsque x est proche de x_*. Dans le voisinage d'une telle solution, d_k est bien définie et est une direction de descente puisque (on suppose aussi que $g_k \neq 0$)

$$f'(x_k) \cdot d_k = -\langle g_k, \nabla^2 f(x_k)^{-1} g_k\rangle = -f''(x_k) \cdot (\nabla^2 f(x_k)^{-1} g_k)^2 < 0.$$

6.2.4 Algorithmes de quasi-Newton

Les *algorithmes de quasi-Newton* s'inspirent de la méthode de Newton pour définir la direction de recherche. Celle-ci s'écrit :

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

où M_k est une matrice d'ordre n auto-adjointe (pour le produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle$). Cette matrice M_k est générée par des formules de mise à jour qui seront étudiées au chapitre 10. La direction d_k ci-dessus est appelée *direction de quasi-Newton*.

En optimisation, on s'arrangera souvent pour que M_k soit également définie positive ($\langle M_k v, v\rangle > 0$, pour tout $v \neq 0$). Dans ce cas, d_k est une direction de descente de f puisqu'avec $v_k = M_k^{-1} g_k \neq 0$, on a

$$f'(x_k) \cdot d_k = -\langle g_k, M_k^{-1} g_k\rangle = -\langle M_k v_k, v_k\rangle < 0.$$

On observera qu'alors l'*angle de descente* θ_k défini en (6.2) est contrôlé par le *conditionnement* de la matrice M_k, noté $\kappa(M_k)$. D'après l'exercice 4.12, on a en effet

$$\cos\theta_k = \frac{\langle -g_k, d_k\rangle}{\|g_k\|\,\|d_k\|} = \frac{\langle g_k, M_k^{-1} g_k\rangle}{\|g_k\|\,\|M_k^{-1} g_k\|} \geqslant \frac{\lambda_{\min}(M_k^{-1})}{\lambda_{\max}(M_k^{-1})} = \frac{1}{\kappa(M_k)}. \tag{6.4}$$

6.2.5 Algorithme de Gauss-Newton

On s'intéresse ici à un problème d'optimisation sans contrainte particulier, celui de minimiser la norme ℓ_2 d'une fonction $r : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ (en général $m \gg n$), dont les composantes r_i sont appelées les *résidus* :

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \frac{1}{2}\|r(x)\|_2^2. \tag{6.5}$$

C'est ce qu'on appelle un *problème de moindres-carrés non linéaire*.

On note $J(x) = r'(x)$ la jacobienne $m \times n$ de r en x. Alors le gradient et la hessienne du critère f de (6.5) pour le produit scalaire euclidien s'écrivent

$$\nabla f(x) = J(x)^{\mathsf{T}} r(x) \qquad \text{et} \qquad \nabla^2 f(x) = J(x)^{\mathsf{T}} J(x) + \sum_{i=1}^{m} r_i(x) \nabla^2 r_i(x).$$

Dans l'*algorithme de Gauss-Newton*, on détermine d_k comme solution particulière (il peut y en avoir plusieurs) du système linéaire

$$\left(J(x_k)^\mathsf{T} J(x_k)\right) d_k = -J(x_k)^\mathsf{T} r(x_k). \tag{6.6}$$

Si $J(x_k)$ est injective, on obtient

$$\boxed{d_k = -\left(J(x_k)^\mathsf{T} J(x_k)\right)^{-1} J(x_k)^\mathsf{T} r(x_k).}$$

Cette direction est appelée *direction de Gauss-Newton*. Comparée à la direction de Newton sur (6.5), elle n'utilise qu'une partie de la hessienne de f, de manière à éviter le calcul des dérivées secondes des résidus, qui sont souvent coûteuses à évaluer. Cet algorithme sera étudié en détail au chapitre 17.

La direction de Gauss-Newton d_k est de descente lorsque x_k n'est pas stationnaire ($J(x_k)^\mathsf{T} r(x_k) \neq 0$), puisque

$$\begin{aligned} f'(x_k) \cdot d_k = \nabla f(x_k)^\mathsf{T} d_k &= -r(x_k)^\mathsf{T} J(x_k) d_k \\ &= -d_k^\mathsf{T} \left(J(x_k)^\mathsf{T} J(x_k)\right) d_k = -\|J(x_k) d_k\|_2^2 < 0. \end{aligned}$$

La stricte négativité vient du fait que $J(x_k)d_k = 0$ impliquerait par (6.6) que $J(x_k)^\mathsf{T} r(x_k) = 0$, ce que l'on a supposé ne pas avoir lieu.

6.3 La recherche linéaire

6.3.1 Vue d'ensemble

Dans cette section, nous décrivons les techniques les plus fréquemment rencontrées pour déterminer un pas $\alpha_k > 0$ le long d'une direction de descente d_k. C'est ce que l'on appelle *faire de la recherche linéaire*. Il s'agit de réaliser deux objectifs.

Le premier objectif est de *faire décroître f suffisamment*. Cela se traduit le plus souvent par la réalisation d'une inégalité de la forme

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leqslant f(x_k) + \text{« un terme négatif »}. \tag{6.7}$$

Le terme négatif, disons ν_k, joue un rôle-clé dans la convergence de l'algorithme utilisant cette recherche linéaire. L'argument est le suivant. Si $f(x_k)$ est minorée (il existe une constante C telle que $f(x_k) \geqslant C$ pour tout k), alors ce terme négatif tend nécessairement vers zéro : $\nu_k \to 0$. C'est souvent à partir de la convergence vers zéro de cette suite que l'on parvient à montrer que le gradient lui-même doit tendre vers zéro. Le terme négatif devra prendre une forme bien particulière si l'on veut pouvoir en tirer de l'information. En particulier, il ne suffit pas d'imposer $f(x_k + \alpha_k d_k) < f(x_k)$.

Le second objectif de la recherche linéaire est d'*empêcher le pas $\alpha_k > 0$ d'être trop petit*, trop proche de zéro. Le premier objectif n'est en effet pas suffisant car l'inégalité (6.7) est en général satisfaite par des pas $\alpha_k > 0$ arbitrairement petit. Or ceci peut entraîner une « fausse convergence », c'est-à-dire la convergence des itérés vers un point non stationnaire, comme le montre l'observation suivante. Si l'on prend

$$0 < \alpha_k \leqslant \frac{\epsilon}{2^k \|d_k\|},$$

la suite $\{x_k\}$ générée par (6.3) est de Cauchy, puisque pour $1 \leqslant l < k$ on a

$$\|x_k - x_l\| = \left\| \sum_{i=l}^{k-1} \alpha_i d_i \right\| \leqslant \sum_{i=l}^{k-1} \frac{\epsilon}{2^i} \to 0, \quad \text{lorsque } l \to \infty.$$

Donc $\{x_k\}$ converge, disons vers un point $\bar{x}$. En prenant $l = 1$ et $k \to \infty$ dans l'estimation ci-dessus, on voit que $\bar{x} \in \bar{B}(x_1, \epsilon)$ et donc $\bar{x}$ ne saurait être solution s'il n'y a pas de solution dans $B(x_1, \epsilon)$. On a donc arbitrairement forcé la convergence de $\{x_k\}$ en prenant des pas très petits.

Pour simplifier les notations, on définit la restriction de f à la droite $\{x_k + \alpha d_k : \alpha \in \mathbb{R}\}$ comme la fonction

$$h_k : \alpha \mapsto h_k(\alpha) = f(x_k + \alpha d_k). \tag{6.8}$$

6.3.2 Recherches linéaires « exactes »

Comme on cherche à minimiser f, il semble naturel de chercher à minimiser le critère le long de d_k et donc de déterminer le pas α_k comme solution du problème

$$\min_{\alpha \geqslant 0} h_k(\alpha).$$

C'est ce que l'on appelle la *règle de Cauchy* et le pas déterminé par cette règle est appelé *pas de Cauchy* ou pas *optimal* (voir figure 6.2). Dans certains cas, on préférera le plus petit point stationnaire de h_k qui fait décroître cette fonction :

$$\alpha_k = \inf\{\alpha \geqslant 0 : h_k'(\alpha) = 0,\ h_k(\alpha) < h_k(0)\}.$$

On parle alors de *règle de Curry* et le pas déterminé par cette règle est appelé *pas de Curry* (voir figure 6.2). De manière un peu imprécise, ces deux règles sont parfois qualifiées de *recherche linéaire exacte* alors que les règles présentées plus loin sont qualifiées de *recherche linéaire inexacte*. Comme souvent en optimization, ces appellations sont trompeuses, car, comme on le verra, la recherche linéaire exacte n'est pas avantageuse et il faut lui préférer des recherches linéaires inexactes.

Ces deux règles ne sont utilisées que dans des cas particuliers, par exemple lorsque h_k est quadratique. En effet, pour une fonction non linéaire arbitraire,

- il peut ne pas exister de pas de Cauchy ou de Curry,
- la détermination de ces pas demande en général beaucoup de temps de calcul et ne peut de toute façon pas être faite avec une précision infinie,
- l'efficacité supplémentaire éventuellement apportée à un algorithme par une recherche linéaire exacte ne permet pas, en général, de compenser le temps perdu à déterminer un tel pas,
- les résultats de convergence autorisent d'autres types de règles, moins gourmandes en temps de calcul.

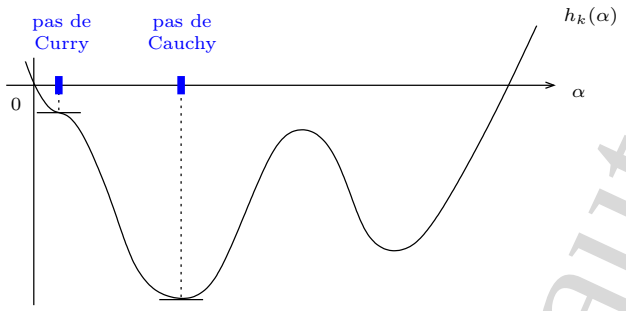


Fig. 6.2. Règles de Cauchy et de Curry.

Au lieu de demander que α_k minimise h_k, on préfère imposer des conditions moins restrictives, plus facilement vérifiées, qui permettent toutefois de contribuer à la convergence des algorithmes. En particulier, il n'y aura plus un unique pas (ou quelques pas) vérifiant ces conditions mais tout un intervalle de pas (ou plusieurs intervalles), ce qui rendra d'ailleurs leur recherche plus aisée. C'est ce que l'on fait avec les règles d'Armijo, de Goldstein et de Wolfe décrites ci-dessous.

6.3.3 Règles d'Armijo et de Goldstein

Une condition naturelle est de demander que f décroisse autant qu'une portion $\omega_1 \in]0,1[$ de ce que ferait le modèle linéaire de f en x_k. Cela conduit à l'inégalité suivante, parfois appelée *condition d'Armijo* ou *condition de décroissance linéaire*:

$$f(x_k+\alpha_k d_k) \leqslant f(x_k) + \omega_1 \alpha_k \langle g_k, d_k\rangle. \tag{6.9}$$

Elle est de la forme (6.7), car ω_1 devra être choisi dans $]0,1[$. On voit bien à la figure 6.3 ce que signifie cette condition. Il faut qu'en α_k, la fonction h_k prenne une

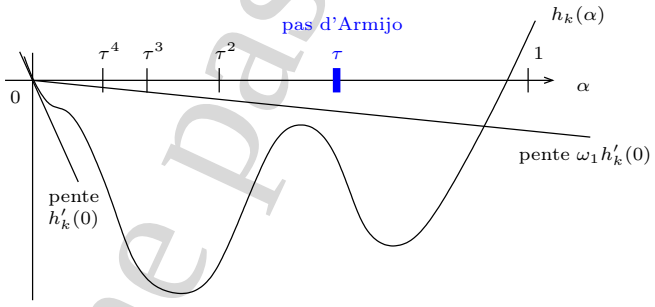


Fig. 6.3. Règle d'Armijo (version simplifiée).

valeur plus petite que celle prise par la fonction affine $\alpha \mapsto f(x_k) + \omega_1 \alpha \langle g_k, d_k\rangle$. En pratique, la constante ω_1 est prise très petite, de manière à satisfaire (6.9) le plus

facilement possible. Typiquement, $\omega_1 = 10^{-4}$. Notons que cette constante ne doit pas être adaptée aux données du problème et donc que l'on ne se trouve pas devant un choix de valeur délicat. On montrera toutefois que, dans certains algorithmes, il est important de prendre $\omega_1 < \frac{1}{2}$ pour que le pas unité ($\alpha_k = 1$) soit accepté lorsque x_k est proche d'une solution (voir par exemple la proposition 6.15).

Il est clair d'après la figure 6.3 que l'inégalité (6.9) est toujours vérifiée si $\alpha_k > 0$ est suffisamment petit. Cela se démontre aussi facilement. En effet dans le cas contraire, on aurait une suite de pas strictement positifs $\{\alpha_{k,i}\}_{i\geqslant 1}$ convergeant vers 0 lorsque $i \to \infty$ et tels que (6.9) n'ait pas lieu pour $\alpha_k = \alpha_{k,i}$. En retranchant $f(x_k)$ dans les deux membres, en divisant par $\alpha_{k,i}$ et en passant à la limite quand $i \to \infty$, on trouverait $\langle g_k, d_k\rangle \geqslant \omega_1 \langle g_k, d_k\rangle$, ce qui contredirait le fait que d_k est une direction de descente ($\omega_1 < 1$).

D'autre part, on a vu qu'il était dangereux d'accepter des pas trop petits, cela pouvait conduire à une fausse convergence. Il faut donc un mécanisme supplémentaire qui empêche le pas d'être trop petit. On utilise souvent la technique de rebroussement due à Armijo [18 ; 1966] ou celle de Goldstein [244 ; 1965].

Dans sa version la plus simple, la *technique de rebroussement* consiste à prendre $\alpha_k = \tau^{i_k}$, où $\tau \in]0,1[$ est une constante et i_k est le plus petit entier tel que l'on ait (6.9) (voir figure 6.3). C'est le fait de prendre pour α_k le plus grand réel dans $\{1, \tau, \tau^2, \ldots\}$ permettant de vérifier (6.9) qui garantit que ce pas ne sera pas trop petit. On voit bien pourquoi cette technique porte le nom de rebroussement : on essaye d'abord $\alpha_k = 1$ et si ce pas n'est pas acceptable, on rebrousse chemin en essayant des pas plus petits τ, τ^2, *etc.*

Cette version simplifiée de la technique de rebroussement est souvent améliorée dans les codes soignés. D'abord, s'il est opportun d'essayer le pas unité en premier lieu dans les algorithmes fondés sur la méthode de Newton, ce n'est pas toujours le cas pour d'autres algorithmes. Ensuite les pas intermédiaires τ^i sont imposés a priori, sans que l'on puisse tenir compte des valeurs de f calculées aux points $x_k + \tau^i d_k$. Ces valeurs peuvent en effet servir à estimer un pas α_k vérifiant (6.9). On a plus de liberté en utilisant l'algorithme ci-dessous.

Algorithme 6.3 (règle d'Armijo)

1. Choisir $\alpha_k^1 > 0$ et $\tau \in]0, \frac{1}{2}[$; $i = 1$;
2. Tant que (6.9) n'est pas vérifiée avec $\alpha_k = \alpha_k^i$:
   2.1. Choisir $\alpha_k^{i+1} \in [\tau\alpha_k^i, (1-\tau)\alpha_k^i]$;
   2.2. Accroître i de 1;
3. $\alpha_k = \alpha_k^i$.

Typiquement, on prend $\tau \in [10^{-2}, 10^{-1}]$ et le pas α_k^{i+1} est déterminé à l'étape 2.1 par interpolation (voir la section 6.3.5). Le pas déterminé par cette règle de recherche linéaire est appelé *pas d'Armijo*. Cette règle est très souvent utilisée dans l'algorithme de Newton.

La technique de rebroussement a la faiblesse de choisir le pas α_k plus petit que le pas-candidat α_k^1, qui peut être arbitraire et peut s'avérer trop petit dans certains

cas. La *règle de Goldstein* remédie à cet inconvénient. Dans celle-ci, le pas $\alpha_k > 0$ est déterminé de manière à vérifier

$$f(x_k+\alpha_k d_k) \leqslant f(x_k) + \omega_1 \alpha_k \langle g_k, d_k\rangle. \tag{6.10a}$$
$$f(x_k+\alpha_k d_k) \geqslant f(x_k) + \omega_2 \alpha_k \langle g_k, d_k\rangle, \tag{6.10b}$$

où les constantes ω_1 et ω_2 sont choisies telles que

$$0 < \omega_1 < \omega_2 < 1.$$

Typiquement, on prend $\omega_1 = 10^{-4}$ et $\omega_2 = 0.99$. On reconnait (6.9) dans (6.10a),qui assure une décroissance suffisante de f. C'est l'inégalité (6.10b) qui empêche le pas d'être trop petit. Le pas déterminé par cette règle est appelé *pas de Goldstein*. La règle de Goldstein est illustrée à la figure 6.4.

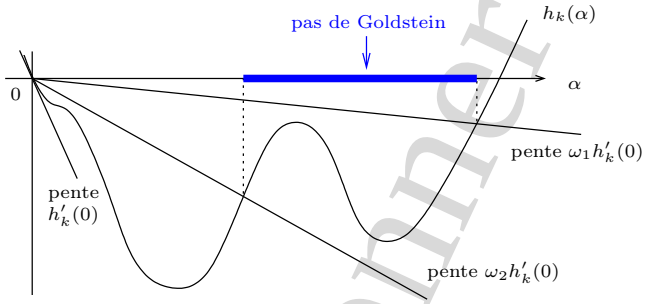


Fig. 6.4. Règle de Goldstein.

On déduit facilement du lemme ci-dessous, que l'on peut trouver un pas vérifiant (6.10) dès que h_k est continue et bornée inférieurement (le pas $\bar\alpha_k$ dont on montre l'existence convient).

Lemme 6.4 *Si $h_k : \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}$ définie par (6.8) est continue et bornée inférieurement, si d_k est une direction de descente de f en x_k et si $\omega_1 \in]0,1[$, alors il existe un pas $\bar\alpha_k > 0$ tel que $h_k(\bar\alpha_k) = f(x_k) + \omega_1 \bar\alpha_k \langle g_k, d_k\rangle$.*

Démonstration. Soit $A = \{\alpha > 0 : (6.9)$ est vérifiée pour tout $\alpha_k \in [0,\alpha]\}$. Comme $\omega_1 < 1$ et $h_k'(0) < 0$, A est non vide. D'autre part, $\bar\alpha_k = \sup A$ est fini, car h_k est bornée inférieurement et $\omega_1 > 0$. Par continuité de h_k, le résultat est vérifié avec ce pas $\bar\alpha_k$. □

La détermination d'un pas d'Armijo par rebroussement ne présente pas de difficulté particulière : l'algorithme 6.3 est explicite. À l'inverse, il n'est pas aisé de voir comment on peut trouver un pas de Goldstein en un nombre fini d'étapes. L'exercice 6.3 aborde cette question.

6.3.4 Règle de Wolfe

Dans la *règle de Wolfe*, le pas α_k est déterminé de manière à satisfaire les deux inégalités suivantes, appelées *conditions de Wolfe* (voir figure 6.5) :

$$f(x_k+\alpha_k d_k) \leqslant f(x_k) + \omega_1 \alpha_k \langle g_k, d_k\rangle, \tag{6.11a}$$
$$\langle \nabla f(x_k+\alpha_k d_k), d_k\rangle \geqslant \omega_2 \langle g_k, d_k\rangle, \tag{6.11b}$$

où les constantes ω_1 et ω_2 sont choisies telles que

$$0 < \omega_1 < \omega_2 < 1.$$

Typiquement, on prend $\omega_1 = 10^{-4}$ et $\omega_2 = 0.99$. La première inégalité n'est autre que la condition de décroissance linéaire (6.9), tandis que le rôle de (6.11b) est d'empêcher le pas d'être trop petit. Cette dernière inégalité s'écrit en effet aussi $h'_k(\alpha_k) \geqslant \omega_2 h'_k(0)$, qui n'est pas vérifiée pour $\alpha_k = 0$ (car $\omega_2 < 1$ et $h'_k(0) < 0$) et, par la continuité supposée de h'_k, n'est pas non plus vérifiée pour de petits pas $\alpha_k > 0$. Comme nous le verrons au chapitre 10, cette règle de recherche linéaire est bien adaptée aux algorithmes de quasi-Newton. Le pas déterminé par cette règle est appelé *pas de Wolfe*.

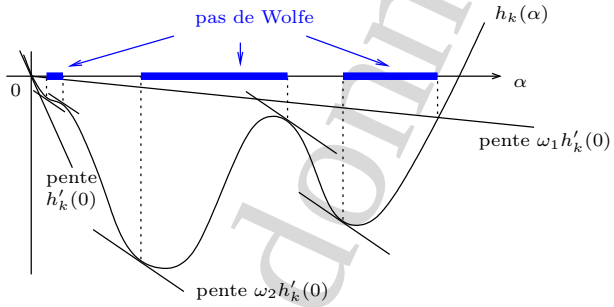


Fig. 6.5. Règle de Wolfe.

Proposition 6.5 *Si d_k est une direction de descente de f en x_k, si $h_k : \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}$ définie par (6.8) est dérivable et bornée inférieurement et si $0 < \omega_1 < \omega_2 < 1$, alors il existe un pas $\alpha_k > 0$ vérifiant les conditions de Wolfe (6.11a)–(6.11b).*

Démonstration. Le pas $\alpha_k = \bar{\alpha}_k$ construit dans la démonstration du lemme 6.4 convient. Il vérifie en effet (6.11a). D'autre part, par définition de $\bar{\alpha}_k$ (voir la démonstration du lemme 6.4)

$$h_k(\alpha_{k,i}) > f(x_k) + \omega_1 \alpha_{k,i} \langle g_k, d_k\rangle,$$

pour une suite de pas $\alpha_{k,i} \downarrow \bar{\alpha}_k$ quand $i \to \infty$. En retranchant $h_k(\bar{\alpha}_k) = f(x_k) + \omega_1 \bar{\alpha}_k \langle g_k, d_k\rangle$ dans les deux membres de cette inégalité, en divisant par $(\alpha_{k,i} - \bar{\alpha}_k)$ et

en passant à la limite quand $i \to \infty$, on obtient $h'_k(\bar{\alpha}_k) \geqslant \omega_1 \langle g_k, d_k \rangle \geqslant \omega_2 \langle g_k, d_k \rangle$ (car $\omega_1 \leqslant \omega_2$ et $\langle g_k, d_k \rangle < 0$). Donc (6.11b) est vérifiée avec $\alpha_k = \bar{\alpha}_k$. □

La démonstration précédente n'est pas constructive. En pratique, on utilise des algorithmes spécifiques pour trouver un pas de Wolfe. En voici un, particulièrement simple, dont on peut montrer qu'il trouve un pas de Wolfe en un nombre fini d'étapes (proposition 6.7). Il génère une suite d'intervalles $[\underline{\alpha}, \overline{\alpha}]$ emboîtés, dans lesquels il trouve finalement un pas α_k vérifiant les deux conditions de Wolfe (6.11a) et (6.11b). Les constantes τ_i et τ_e sont utilisées respectivement dans les phases d'interpolation (on cherche un nouveau pas dans l'intervalle, étapes 3 et 4.3.4) et d'extrapolation (on cherche un nouveau pas dans un intervalle non borné à droite, étape 4.3.3).

Algorithme 6.6 (Fletcher-Lemaréchal)

1. Soient $\underline{\alpha} := 0$, $\overline{\alpha} := +\infty$, $\tau_i \in]0, \frac{1}{2}[$ et $\tau_e > 1$;
   On se donne un premier pas $\alpha > 0$;
2. Répéter :
   2.1. Si (6.11a) n'est pas vérifiée avec $\alpha_k = \alpha$;
   2.2. Alors $\overline{\alpha} = \alpha$ et on choisit un nouveau pas α dans l'intervalle

$$[(1-\tau_i)\underline{\alpha} + \tau_i \overline{\alpha}, \tau_i \underline{\alpha} + (1-\tau_i)\overline{\alpha}]; \tag{6.12}$$

   2.3. Sinon
      2.3.1. Si (6.11b) est vérifiée avec $\alpha_k = \alpha$,
      2.3.2. Alors on sort avec $\alpha_k = \alpha$;
      2.3.3. Sinon
         2.3.3.1. $\underline{\alpha} = \alpha$;
         2.3.3.2. Si $\overline{\alpha} = +\infty$;
         2.3.3.3. Alors choisir un nouveau pas $\alpha \in [\tau_e \underline{\alpha}, \infty[$;
         2.3.3.4. Sinon choisir un nouveau pas α dans l'intervalle (6.12).

Lorsque l'on sort à l'étape 2.3.2, le pas α_k vérifie clairement (6.11a) et (6.11b).

Proposition 6.7 *Si d_k est une direction de descente de f en x_k, si $h_k : \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}$ définie par (6.8) est dérivable et bornée inférieurement et si $0 < \omega_1 < \omega_2 < 1$, alors l'algorithme de Fletcher-Lemaréchal trouve un pas $\alpha_k > 0$ vérifiant les conditions de Wolfe (6.11a)–(6.11b) en un nombre fini d'étapes.*

Démonstration. La finitude de l'algorithme se démontre par l'absurde, c.-à-d., en supposant que la boucle *Répéter* (instruction 2) est parcourue indéfiniment ou encore que l'on n'exécute jamais l'instruction 2.3.2.

Observons d'abord que l'instruction 2.3.3.3 n'est exécutée qu'un nombre fini de fois. En effet, dans le cas contraire, on aurait $\underline{\alpha} \to +\infty$ et

$$h_k(\underline{\alpha}) \leqslant h_k(0) + \omega_1 \underline{\alpha} h'_k(0). \tag{6.13}$$

Mais alors h_k ne serait pas bornée inférieurement sur $\mathbb{R}_+$ (car $\omega_1 h'_k(0) < 0$ par hypothèse), ce qui est contraire aux hypothèses. Par conséquent, après un nombre fini d'étapes, $\overline{\alpha} < +\infty$. Les nouveaux pas-candidats α sont alors toujours choisis dans l'intervalle (6.12). Comme à chaque tour de boucle, on a soit $\underline{\alpha} = \alpha$ soit $\overline{\alpha} = \alpha$, la longueur de l'intervalle $[\underline{\alpha}, \overline{\alpha}]$ tend vers zéro ($0 < \tau_i < 1/2$) et il existe un $\hat{\alpha} \geqslant 0$ tel que $\underline{\alpha} \to \hat{\alpha}$ et $\overline{\alpha} \to \hat{\alpha}$. Nous allons montrer que les propriétés de h_k en $\hat{\alpha}$ sont contradictoires.

Par continuité de h_k, en passant à la limite dans (6.13), on trouve $h_k(\hat{\alpha}) \leqslant h_k(0) + \omega_1 \hat{\alpha} h'_k(0)$. D'autre part, par les instructions 2.1 et 2.2, (6.11a) n'est pas vérifiée en $\alpha = \overline{\alpha}$:

$$h_k(\overline{\alpha}) > h_k(0) + \omega_1 \overline{\alpha} h'_k(0). \tag{6.14}$$

A la limite, on trouve $h_k(\hat{\alpha}) \geqslant h_k(0) + \omega_1 \hat{\alpha} h'_k(0)$. Avec l'inégalité précédente vérifiée par $\hat{\alpha}$, on obtient

$$h_k(\hat{\alpha}) = h_k(0) + \omega_1 \hat{\alpha} h'_k(0), \tag{6.15}$$

En $\alpha = \underline{\alpha}$, (6.11b) n'est pas vérifiée : $h'_k(\underline{\alpha}) < \omega_2 h'_k(0)$. A la limite, on trouve

$$h'_k(\hat{\alpha}) \leqslant \omega_2 h'_k(0), \tag{6.16}$$

En retranchant (6.15) de (6.14), en divisant le résultat par $\overline{\alpha} - \hat{\alpha} > 0$ et en passant à la limite, on trouve

$$h'_k(\hat{\alpha}) \geqslant \omega_1 h'_k(0). \tag{6.17}$$

Les inégalités (6.16), (6.17), $h'_k(0) < 0$ et $\omega_1 < \omega_2$ sont contradictoires. □

Pour certains algorithmes (par exemple le gradient conjugué non linéaire, voir la section 8.2.6), il est parfois nécessaire d'avoir une condition plus restrictive que (6.11b). Dans la *règle de Wolfe forte*, on cherche un pas $\alpha_k > 0$ tel que l'on ait :

$$f(x_k + \alpha d_k) \leqslant f(x_k) + \omega_1 \alpha_k \langle g_k, d_k \rangle$$
$$|\langle \nabla f(x_k + \alpha d_k), d_k \rangle| \leqslant \omega_2 \, |\langle g_k, d_k \rangle|.$$

6.3.5 Mise en œuvre

Choix du premier pas

Certaines directions de descente ont un « pas naturel », un pas qui a de grandes chances d'être accepté par les différentes conditions définissant les règles de recherche linéaire vues aux sections 6.3.3 et 6.3.4. Il en est ainsi des directions newtoniennes (sections 6.2.3 et 6.2.4) pour lesquelles le pas naturel est 1. C'est ce que nous verrons à la section 6.5.1. Ce pas sera alors essayé en premier lieu et, puisqu'il est souvent accepté, permettra de faire de la recherche linéaire sans trop d'évaluations de fonction.

D'autres directions n'ont pas de pas naturel évident. Il en est ainsi des directions du gradient conjugué non linéaire et de Gauss-Newton (sections 6.2.2 et 6.2.5). Pour de telles directions de descente d_k, on détermine parfois le premier pas à partir d'un modèle quadratique

$$\alpha \mapsto \varphi_k(\alpha) = a_{0,k} + a_{1,k}\,\alpha + \frac{a_{2,k}}{2}\,\alpha^2,$$

interpolant $\alpha \mapsto f(x_k + \alpha d_k)$ à partir de la donnée de $f_k := f(x_k)$, de $p_k := f'(x_k) \cdot d_k$ et de la *décroissance attendue* du critère à l'itération k, notée Δ_k. On préfère cette dernière quantité à la dérivée directionnelle seconde $f''(x_k) \cdot d_k^2$, de manière à éviter le calcul généralement coûteux de cette dernière et à assurer la stricte convexité du modèle quadratique ($f''(x_k) \cdot d_k^2$ peut en effet ne pas être strictement positif). Les conditions naturelles d'interpolation $\varphi_k(0) = f_k$ et $\varphi_k'(0) = p_k$ permettent de donner une valeur aux deux premiers coefficients :

$$a_{0,k} = f_k \qquad \text{et} \qquad a_{1,k} = p_k < 0.$$

La courbure $a_{2,k}$ est déterminée en imposant que la décroissance maximale de φ_k, qui vaut $\varphi_k(0) - \inf \varphi_k = p_k^2/(2a_{2,k})$, soit égale à Δ_k :

$$a_{2,k} = \frac{p_k^2}{2\Delta_k} > 0.$$

On prend alors comme premier pas à essayer dans la recherche linéaire, celui qui donne la décroissance maximale du modèle quadratique φ_k de f ainsi obtenu, à savoir

$$\alpha_k := \frac{-2\Delta_k}{f'(x_k) \cdot d_k}. \tag{6.18}$$

Ce pas est appelé le *pas de Fletcher*. Il est aussi parfois utilisé à la première itération des algorithmes quasi-newtoniens (chapitre 10), car le pas unité le long de la première direction $-\nabla f(x_1)$ n'est pas approprié.

Le pas de Fletcher reporte la détermination du premier pas sur celle de la décroissance attendue Δ_k du critère et on peut légitimement se demander si l'on a progressé. C'est le cas si l'on a une estimation $f_{\min}$ de la valeur minimale de f (par exemple, on peut prendre $f_{\min} \simeq 0$ dans les problèmes de moindres-carrés non linéaires à résidu optimal presque nul). Dans ce cas, il est raisonnable de déterminer α_k par (6.18) avec

$$\Delta_k = \gamma\Big(f(x_k) - f_{\min}\Big),$$

où γ est de l'ordre de 10^{-2} ou 10^{-1}. À défaut d'information venant du problème à résoudre, certains développeurs choisissent parfois $\Delta_k = f(x_{k-1}) - f(x_k)$, qui est la décroissance de f réalisée à l'itération précédente (on suppose que $k \geqslant 2$). Cette valeur n'est pas recommandée pour les algorithmes à la convergence superlinéaire, car alors $f(x_k) - f(x_{k+1})$ est asymptotiquement beaucoup plus petit que $f(x_{k-1}) - f(x_k)$.

Interpolation et extrapolation ▲

Contrôle du nombre d'essais de pas ▲

Il n'est pas judicieux de se donner a priori un nombre maximal d'essais de pas, car la recherche d'un pas satisfaisant le long d'une direction de descente arbitraire peut requérir de nombreux essais à certaine itération particulièrement difficile. Heureusement, c'est rarement le cas pour les directions de descente classiques. Toutefois, la situation peut se présenter; par exemple à la première itération des algorithmes

quasi-newtoniens (chapitre 10) parce que l'algorithme n'a pas eu le temps de mettre à l'échelle la direction de recherche ou encore proche de la convergence lorsque les erreurs d'arrondi prévalent.

Lorsque la recherche linéaire détermine le pas par encadrement comme dans l'algorithme de Fletcher-Lemaréchal, il semble préférable de s'arrêter lorsque l'intervalle où l'on recherche le pas devient trop petit. Cependant, ce n'est pas la longueur minimale de l'intervalle de recherche en α qui importe, mais le déplacement en x correspondant; cela permet en effet de ne pas faire dépendre la longueur minimale de l'intervalle de la grandeur de la direction de descente. Ce point de vue revient en fait à se donner une *résolution en* x, c'est-à-dire une grosseur aux « pixels » discrétisant l'espace des paramètres x : on considérera alors que l'on ne peut pas distinguer deux points appartenant à un même pixel. En pratique, cette résolution sera donnée par l'utilisateur du code, qui devrait bien connaître l'ordre de grandeur des *variations* des paramètres à optimiser x, au moyen d'un vecteur

$$\delta \in \mathbb{R}^n_{++},$$

dont les composantes sont petites et strictement positives. Un *pixel* est alors un parallélipipède rectangle dont les côtés ont pour longueur les $\delta_i > 0$. On décide que la recherche linéaire ne peut pas distinguer deux points x et $y \in \mathbb{R}^n$ tels que, pour tout i, $|x_i - y_i| \leqslant \delta_i$. La longueur minimale de l'intervalle de recherche du pas dans la direction d sera alors déterminé par

$$\min_{1 \leqslant i \leqslant n} \frac{\delta_i}{|d_i|}.$$

La donnée des δ_i permet aussi de faire une mise à l'échelle du problème, de telle sorte que les nouvelles variables $\tilde{x}_i := t\, x_i/\delta_i$ aient des *variations* nominales identiques. Dans la transformation précédente, la constante $t > 0$ peut être choisie de manière à avoir la plupart des $\tilde{x}_i$ de l'ordre de l'unité.

6.4 Convergence des méthodes à directions de descente

6.4.1 Condition de Zoutendijk

Dans cette section, on étudie la *contribution* de la recherche linéaire à la convergence des algorithmes à directions de descente et à leur complexité itérative. Ce n'est qu'une contribution, parce que la recherche linéaire ne peut à elle seule assurer la convergence des itérés. On comprend bien que le choix de la direction de descente joue aussi un rôle. Cela se traduit par une condition, dite de Zoutendijk, dont on peut tirer quelques informations qualitatives intéressantes.

On dit qu'une règle de recherche linéaire satisfait la *condition de Zoutendijk* s'il existe une constante $C_z > 0$ telle que pour tout indice $k \geqslant 1$ on ait

$$f(x_{k+1}) \leqslant f(x_k) - C_z \|g_k\|^2 \cos^2 \theta_k, \tag{6.19}$$

où θ_k est l'*angle de descente*, celui que fait d_k avec $-g_k$, que nous avons défini en (6.2) par

$$\cos\theta_k = \frac{\langle -g_k, d_k\rangle}{\|g_k\|\,\|d_k\|}. \tag{6.20}$$

La proposition suivante et les commentaires qui suivent montrent comment on se sert de la condition de Zoutendijk.

Proposition 6.8 (utilité de la condition de Zoutendijk) *Si la suite $\{x_k\}$ générée par un algorithme d'optimisation vérifie la condition de Zoutendijk* (6.19) *et si $f_* := \inf_k f(x_k)$ est fini, alors*

$$\sum_{k\geqslant 1} \|g_k\|^2 \cos^2\theta_k \leqslant \frac{f(x_1) - f_*}{C_z} < \infty. \tag{6.21}$$

En particulier, s'il existe une constante strictement positive γ minorant $\{\cos\theta_k\}$, alors $g_k \to 0$ et, pour tout $\varepsilon > 0$, on obtient $\|g_k\| \leqslant \varepsilon$ pour un indice k inférieur à

$$K_\varepsilon := \left\lceil \frac{f(x_1) - f_*}{\gamma^2 C_z}\,\varepsilon^{-2} \right\rceil. \tag{6.22}$$

Démonstration. En sommant les inégalités (6.19), on a

$$\sum_{k=1}^{K} \|g_k\|^2 \cos^2\theta_k \leqslant \frac{f(x_1) - f(x_{K+1})}{C_z} \leqslant \frac{f(x_1) - f_*}{C_z}, \tag{6.23}$$

car $f(x_{K+1}) \geqslant f_*$. On a obtenu (6.21).

Supposons à présent qu'il existe une constant strictement positive γ telle que $\cos\theta_k \geqslant \gamma$ pour tout $k \geqslant 1$. Alors (6.21) montre que la série $\sum_{k\geqslant 1} \|g_k\|^2$ est convergente, ce qui implique que son terme générique $\|g_k\|^2$ (et donc g_k) tend vers zéro. De plus, par (6.23), on a

$$\sum_{k=1}^{K} \|g_k\|^2 \leqslant \frac{f(x_1) - f_*}{\gamma^2 C_z}$$

ou encore

$$\min_{k\in[1\,:\,K]} \|g_k\|^2 \leqslant \frac{f(x_1) - f_*}{\gamma^2 C_z K}.$$

Si le membre de droite de cette inégalité est inférieur à ε^2, ce qui revient à dire que K est supérieur au K_ε donné dans l'énoncé, le membre de gauche l'est aussi ; autrement dit un des $\|g_k\|$ pour $k \in [1\,:\,K_\varepsilon]$ est inférieur à ε. □

Considérons la méthode du gradient. Dans celle-ci, $\cos\theta_k = 1$ et donc sous les hypothèses de la proposition précédente, $g_k \to 0$. On obtient donc directement la « convergence » de la méthode du gradient (on ne peut montrer la convergence des itérés eux-mêmes que dans de rares cas). Plus généralement, si d_k fait avec $-g_k$ un angle θ_k qui ne se rapproche pas de $\frac{\pi}{2}$ (on veut dire par là que le $\cos\theta_k$ reste uniformément positif), l'algorithme est convergent ($g_k \to 0$). On est dans ce dernier

cas, lorsque $d_k = -M_k^{-1} g_k$ avec une matrice M_k définie positive de conditionnement borné (utiliser la minoration (6.4)).

L'inégalité (6.22) exprime la *complexité itérative* des algorithmes à directions de descente : le nombre d'itérations requis pour obtenir un gradient de norme inférieure à un $\varepsilon > 0$ donné est en $O(\varepsilon^{-2})$. Ce n'est pas une estimation époustouflante, puisque pour atteindre une précision de 10^{-10} sur la norme du gradient, elle nous dit qu'il faudra de l'ordre de 10^{20} itérations, de quoi dissuader tout utilisateur potentiel de ces méthodes. En réalité, c'est une estimation très pessimiste, car pour la plupart des problèmes rencontrés, la convergence est obtenue beaucoup plus rapidement que cela. L'estimation (6.22) est remarquable toutefois, car elle ne fait pas intervenir la dimension $n := \dim \mathbb{E}$ de l'espace sur lequel f est définie.

La démarche que l'on suit pour montrer la convergence d'un algorithme avec recherche linéaire peut à présent être schématisée. Si $\{f(x_k)\}$ est minorée (ce qui est une hypothèse très raisonnable lorsqu'on cherche à minimiser une fonction), le « terme négatif » dans (6.7) doit tendre vers zéro (c'est l'argument utilisé dans la démonstration de la proposition 6.8). Grâce à la recherche linéaire, on parvient à majorer ce terme par une constante positive fois $(-\|g_k\|^2 \cos^2 \theta_k)$ (c'est ce que montrerons les propositions 6.10, 6.11 et 6.13, ci-dessous). Dès lors $\|g_k\| \cos \theta_k \to 0$. Si le cosinus de θ_k reste uniformément positif, $g_k \to 0$ et l'algorithme « converge ». A posteriori, ceci explique aussi pourquoi on a besoin de trouver un pas tel que l'on ait un peu plus que l'inégalité $f(x_{k+1}) < f(x_k)$: c'est la convergence vers zéro du terme négatif faisant décroître $f(x_k)$ qui contribue à la convergence. S'il n'y a pas de terme négatif, on ne peut en général rien dire sur la convergence de l'algorithme.

Il faut se garder de déduire de cette observation, que l'on dispose à présent d'un moyen efficace pour forcer la convergence d'un algorithme à directions de descente, à savoir celui qui empêcherait les directions d_k de faire avec l'opposé du gradient un angle trop proche de $\frac{\pi}{2}$. Ce serait une bien mauvaise idée. En effet, les directions générées par un algorithme d'optimisation sont en général obtenues à partir de considérations cherchant à ce que l'on ait une convergence rapide vers la solution. Pour obtenir cette propriété, l'algorithme doit parfois construire des directions avec un $\cos \theta_k$ proche de zéro. On sent donc bien qu'il est délicat de donner un seuil à partir duquel la direction d_k devrait être « redressée ». Suivre cette approche pourrait brider un algorithme efficace. Il faut aussi nuancer ce dernier propos, car les méthodes à régions de confiance (qui seront étudiées au chapitre **??**) ont un mécanisme qui redresse la direction de déplacement vers l'opposé du gradient dans les situations critiques, mais cette opération est la conséquence d'un autre principe algorithmique qui a tout son sens.

Les propositions 6.10, 6.11, 6.12 et 6.13 ci-dessous précisent les circonstances dans lesquelles la condition de Zoutendijk (6.19) est vérifiée avec les règles de Cauchy, de Curry, d'Armijo, de Goldstein et de Wolfe. On y utilisera souvent l'estimation suivante de l'erreur commise par le modèle linéaire d'une fonction $\mathcal{C}_L^{1,1}$.

Lemme 6.9 (erreur quadratique du modèle linéaire) *Soient Ω un ouvert de $\mathbb{E}$ et $f : \Omega \to \mathbb{R}$ une fonction $\mathcal{C}_L^{1,1}$. Alors pour tout x et $y \in \Omega$, on a*

$$|f(y) - f(x) - f'(x) \cdot (y-x)| \leqslant \frac{L}{2}\|y-x\|^2. \tag{6.24}$$

DÉMONSTRATION. Comme $f \in \mathcal{C}_L^{1,1}(\Omega)$, on a

$$f(y) - f(x) - f'(x)(y-x) = \int_0^1 [f'(x+t(y-x)) - f'(x)](y-x)\,\mathrm{d}t.$$

Dès lors

$$\begin{aligned}
|f(y) - f(x) - f'(x)(y-x)| &= \left|\int_0^1 [f'(x+t(y-x)) - f'(x)](y-x)\,\mathrm{d}t\right| \\
&\leqslant \int_0^1 \|[f'(x+t(y-x)) - f'(x)](y-x)\|\,\mathrm{d}t \\
&\leqslant \int_0^1 \|f'(x+t(y-x)) - f'(x)\|\,\|y-x\|\,\mathrm{d}t \\
&\leqslant \int_0^1 Lt\|y-x\|^2\,\mathrm{d}t \\
&= \frac{L}{2}\|y-x\|^2. \qquad \square
\end{aligned}$$

Proposition 6.10 (condition de Zoutendijk pour la règle de Curry) *Soit $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ une fonction différentiable sur un voisinage de $\mathcal{N}_1 := \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leqslant f(x_1)\}$ et $\mathcal{C}_L^{1,1}$ sur $\mathcal{N}_1$. On considère un algorithme à directions de descente d_k dans lequel le pas α_k est déterminé de manière à avoir*

$$f(x_k+\alpha_k d_k) \leqslant f(x_k+\hat{\alpha}_k d_k),$$

où $\hat{\alpha}_k$ est le pas de Curry (que l'on suppose donc exister). Alors, pour tout $k \geqslant 1$, la condition de Zoutendijk (6.19) est vérifiée avec la constante

$$C_z = \frac{1}{2L}.$$

DÉMONSTRATION. Par la règle de Curry, $f(x_k+\hat{\alpha}_k d_k) \leqslant f(x_k+\alpha d_k)$, pour tout $\alpha \in [0, \hat{\alpha}_k]$. On utilisant l'hypothèse $f(x_k+\alpha_k d_k) \leqslant f(x_k+\hat{\alpha}_k d_k)$ et (6.24), on obtient alors pour tout $\alpha \in [0, \hat{\alpha}_k]$:

$$f(x_{k+1}) \leqslant f(x_k) + \alpha\langle g_k, d_k\rangle + \frac{\alpha^2 L}{2}\|d_k\|^2. \tag{6.25}$$

Le membre de droite atteint un minimum lorsque α prend la valeur

$$\tilde{\alpha}_k = \frac{-\langle g_k, d_k\rangle}{L\|d_k\|^2}.$$

D'autre part, $\tilde{\alpha}_k \leqslant \hat{\alpha}_k$, car par la condition de Lipschitz, on a

$$0 = f'(x_k+\hat{\alpha}_k d_k)\cdot d_k \leqslant \langle g_k, d_k\rangle + \hat{\alpha}_k L\|d_k\|^2.$$

On peut donc prendre $\alpha = \tilde{\alpha}_k$ dans l'inégalité (6.25). Ceci donne

$$f(x_{k+1}) \leqslant f(x_k) - \frac{\langle g_k, d_k\rangle^2}{2L\|d_k\|^2} = f(x_k) - \frac{1}{2L}\|g_k\|^2\cos^2\theta_k,$$

qui est l'inégalité recherchée. □

Comme la valeur prise par f au pas de Cauchy est inférieure à celle prise au pas de Curry, la conclusion de cette proposition reste vraie pour la règle de Cauchy. On pourrait également étendre les résultats ci-dessous en supposant qu'en $x_k+\alpha_k d_k$, f prend une valeur inférieure à celle prise avec le pas d'Armijo ou de Wolfe. Un tel raisonnement nous sera utile dans la démonstration du lemme 6.14.

Proposition 6.11 (condition de Zoutendijk pour la règle d'Armijo) *Soit $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ une fonction différentiable sur un voisinage de $\mathcal{N}_1 := \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leqslant f(x_1)\}$ et $\mathcal{C}_L^{1,1}$ sur $\mathcal{N}_1$. On considère un algorithme à directions de descente d_k, qui génère une suite $\{x_k\}$ en utilisant la recherche linéaire d'Armijo avec α_k^1 uniformément positif. Alors, il existe une constante $C > 0$ telle que, pour tout $k \geqslant 1$, l'une des conditions suivantes est vérifiées*

$$f(x_{k+1}) \leqslant f(x_k) - C|\langle g_k, d_k\rangle| \tag{6.26a}$$
$$f(x_{k+1}) \leqslant f(x_k) - C_z\|g_k\|^2\cos^2\theta_k, \tag{6.26b}$$

avec $C_z = 2\tau\omega_1(1-\omega_1)/L$.

Démonstration. Si le pas $\alpha_k = \alpha_k^1$ est accepté, on a (6.26a), car α_k^1 est uniformément positif. Dans le cas contraire, (6.9) n'est pas vérifiée avec un pas $\bar{\alpha}_k \leqslant \alpha_k/\tau$, c'est-à-dire

$$f(x_k+\bar{\alpha}_k d_k) > f(x_k) + \omega_1\bar{\alpha}_k\langle g_k, d_k\rangle.$$

En utilisant (6.24), on obtient

$$f(x_k+\bar{\alpha}_k d_k) \leqslant f(x_k) + \bar{\alpha}_k\langle g_k, d_k\rangle + \frac{L}{2}\bar{\alpha}_k^2\|d_k\|^2.$$

En combinant les deux inégalités, en retranchant $f(x_k)+\bar{\alpha}_k\langle g_k, d_k\rangle$ des deux membres, en utilisant la définition (6.20) de θ_k et en simplifiant par $\bar{\alpha}_k\|d_k\| > 0$, on obtient

$$(1-\omega_1)\|g_k\|\cos\theta_k \leqslant \frac{L}{2}\bar{\alpha}_k\|d_k\| \leqslant \frac{L}{2\tau}\alpha_k\|d_k\|,$$

puisque $\bar{\alpha}_k \leqslant \alpha_k/\tau$. Nous avons obtenu une minoration (compliquée) du pas α_k. On exprime ensuite que f décroît suffisamment par (6.9), ce qui conduit à

$$\begin{aligned} f(x_{k+1}) &\leqslant f(x_k) - \omega_1 \alpha_k \|g_k\| \, \|d_k\| \cos\theta_k \\ &\leqslant f(x_k) - \frac{2\tau\omega_1(1-\omega_1)}{L} \|g_k\|^2 \cos^2\theta_k. \end{aligned}$$

On en déduit (6.19) avec la constante C_z donnée dans l'énoncé. □

Proposition 6.12 (condition de Zoutendijk pour la règle de Goldstein) *Soit $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ une fonction différentiable sur un voisinage de $\mathcal{N}_1 := \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leqslant f(x_1)\}$ et $\mathcal{C}_L^{1,1}$ sur $\mathcal{N}_1$. On considère un algorithme à directions de descente d_k, qui génère une suite $\{x_k\}$ en utilisant la recherche linéaire de Goldstein (6.10). Alors, pour tout $k \geqslant 1$, la condition de Zoutendijk (6.19) est vérifiée avec la constante*

$$C_z = \frac{2\omega_1(1-\omega_2)}{L}.$$

DÉMONSTRATION. Exprimons d'abord que le pas α_k n'est pas trop petit en utilisant (6.10b) et (6.24) :

$$f(x_k) + \omega_2 \alpha_k \langle g_k, d_k\rangle \leqslant f(x_{k+1}) \leqslant f(x_k) + \alpha_k \langle g_k, d_k\rangle + \frac{L}{2}\alpha_k^2 \|d_k\|^2.$$

En retranchant $f(x_k) + \alpha_k \langle g_k, d_k\rangle$ des deux membres extrêmes, en utilisant la définition (6.20) de θ_k et en simplifiant par $\alpha_k\|d_k\| > 0$, on obtient que

$$(1-\omega_2)\|g_k\| \cos\theta_k \leqslant \frac{L}{2}\alpha_k \|d_k\|.$$

qui est bien une minoration (compliquée) du pas α_k. On exprime ensuite que f décroît suffisamment par (6.10a), ce qui conduit à

$$\begin{aligned} f(x_{k+1}) &\leqslant f(x_k) - \omega_1 \alpha_k \|g_k\| \, \|d_k\| \cos\theta_k \\ &\leqslant f(x_k) - \frac{2\omega_1(1-\omega_2)}{L} \|g_k\|^2 \cos^2\theta_k. \end{aligned}$$

On en déduit (6.19) avec la constante C_z donnée dans l'énoncé. □

Proposition 6.13 (condition de Zoutendijk pour la règle de Wolfe) *Soit $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ une fonction différentiable sur un voisinage de $\mathcal{N}_1 := \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leqslant f(x_1)\}$ et $\mathcal{C}_L^{1,1}$ sur $\mathcal{N}_1$. On considère un algorithme à directions de descente d_k, qui génère une suite $\{x_k\}$ en utilisant la recherche linéaire de Wolfe (6.11). Alors, pour tout $k \geqslant 1$, la condition de Zoutendijk (6.19) est vérifiée avec la constante*

$$C_z = \frac{\omega_1(1-\omega_2)}{L}.$$

DÉMONSTRATION. Exprimons d'abord que le pas α_k n'est pas trop petit en utilisant (6.11b), qui permet d'écrire

$$(1-\omega_2)\,|\langle g_k, d_k\rangle| \leqslant \langle g_{k+1} - g_k, d_k\rangle.$$

Comme f est $\mathcal{C}^{1,1}_L$, on en déduit

$$(1-\omega_2)\|g_k\|\cos\theta_k \leqslant L\alpha_k\|d_k\|,$$

qui est bien une minoration (compliquée) du pas α_k. On exprime ensuite que f décroît suffisamment par (6.11a), ce qui conduit à

$$\begin{aligned} f(x_{k+1}) &\leqslant f(x_k) - \omega_1\alpha_k\|g_k\|\,\|d_k\|\cos\theta_k \\ &\leqslant f(x_k) - \frac{\omega_1(1-\omega_2)}{L}\|g_k\|^2\cos^2\theta_k. \end{aligned}$$

On en déduit (6.19) avec la constante C_z donnée dans l'énoncé. □

6.4.2 Suites minimisantes spéciales

Grâce à la condition de Zoutendijk, en appliquant une des règles de recherche linéaire décrites à la section 6.3 à l'algorithme du gradient, on peut obtenir des suites minimisantes ayant la propriété supplémentaire d'avoir un gradient qui tend vers zéro.

Lemme 6.14 (suite minimisante spéciale) *Soit $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ une fonction bornée inférieurement, dérivable dans le voisinage d'un de ses ensembles de sous-niveau $\mathcal{N}$ et de dérivée lipschitzienne sur $\mathcal{N}$. Alors, on peut trouver une suite minimisante $\{x_k\} \subseteq \mathcal{N}$ de f telle que $f'(x_k) \to 0$.*

DÉMONSTRATION. Soit $\{x'_k\}$ une suite minimisante de f incluse dans $\mathcal{N}$. On construit $\{x_k\} \subseteq \mathcal{N}$ comme suit. On prend $x_1 = x'_1$. Soit alors x_k donné ($k \geqslant 1$). Si $\nabla f(x_k) = 0$, on prend $x_{k+1} = x'_{k+1}$. Sinon on calcule d'abord $x''_{k+1} = x_k - \alpha_k\nabla f(x_k)$, où le pas $\alpha_k > 0$ est déterminé par recherche linéaire de Wolfe (par exemple); et on prend pour x_{k+1} le point x'_{k+1} ou x''_{k+1} donnant la plus petite valeur de f. Montrons qu'une sous-suite de la suite $\{x_k\}$ ainsi construite convient.

Observons que, comme $f(x_k) \leqslant f(x'_k)$ pour tout k, la suite $\{x_k\}$ est aussi minimisante. Par ailleurs, si, pour une sous-suite d'indices k, on a $\nabla f(x_k) = 0$, le résultat est démontré en sélectionnant cette sous-suite. Sinon, pour des indices assez grands, on a $f(x_{k+1}) \leqslant f(x''_{k+1}) \leqslant f(x_k) - \omega_1\alpha_k\|\nabla f(x_k)\|^2$ et $\langle\nabla f(x''_{k+1}), -\nabla f(x_k)\rangle \geqslant \omega_2\langle\nabla f(x_k), -\nabla f(x_k)\rangle$. En raisonnant comme dans la démonstration de la proposition 6.13, on montre que $\alpha_k \geqslant (1-\omega_2)/L > 0$, où L est la constante de Lipschitz de f'. Dès lors $\nabla f(x_k) \to 0$. □

6.5 Propriétés asymptotiques

6.5.1 Admissibilité asymptotique du pas unité

On s'intéresse dans cette section à la mise en évidence de conditions assurant que le pas unité $\alpha_k = 1$ est accepté asymptotiquement par les différentes règles de recherche linéaire présentées dans la section 6.3. Par exemple, lorsqu'on considère la règle de décroissance suffisante (6.9), on cherche à savoir quand est-ce que l'on peut garantir que l'on a

$$f(x_k + d_k) \leqslant f(x_k) + \omega_1 \langle \nabla f(x_k), d_k \rangle,$$

pour k suffisamment grand et lorsque x_k converge vers un minimum x_* de f. On cherche des conditions sur le type de minimum x_*, sur d_k et sur les constantes intervenant dans l'inégalité à vérifier (ici ω_1). Cette propriété est très souhaitable, car elle permet de dire que le pas unité a quelques chances d'être accepté et que c'est donc le premier pas à essayer dans la recherche linéaire. En pratique, essayer en premier lieu le pas unité permet d'éviter de faire trop d'évaluations de fonction pendant la recherche linéaire. Nous allons montrer qu'il en est ainsi dans le voisinage d'un minimum fort (c.-à-d., vérifiant les conditions d'optimalité du second ordre de la proposition 4.11).

Sans grande perte de généralité, on peut supposer que la direction de descente est obtenue comme solution du système linéaire

$$M_k d_k = -\nabla f(x_k), \tag{6.27}$$

où M_k est une matrice d'ordre n auto-adjointe inversible. La propriété d'acceptation asymptotique du pas unité est d'ailleurs typique des algorithmes de Newton (chapitre 9), pour lesquels $M_k = \nabla f(x_k)$, et de quasi-Newton (chapitre 10). Une partie des conditions d'acceptation asymptotique du pas unité porte sur la matrice M_k qui doit satisfaire l'estimation (6.28) ci-dessous. Celle-ci est du type $t_k \geqslant o(\|u_k\|)$, ce qui veut dire qu'il doit exister une suite de réels $\{s_k\}$ tels que $t_k \geqslant s_k$ et $s_k/\|u_k\| \to 0$ lorsque $k \to \infty$. Dès lors, (6.28) est équivalente à $\langle M_k d_k, d_k \rangle \geqslant \langle \nabla^2 f(x_*) d_k, d_k \rangle + o(\|d_k\|^2)$, qui est vérifiée si les matrices M_k sont assez « grosses ». Cela n'a rien d'étonnant puisqu'alors les directions d_k sont petites (d'après (6.27)) et le pas unité le long de ces directions a en effet plus de chance d'être accepté. D'autre part, (6.28) est clairement vérifiée pour $M_k = \nabla^2 f(x_k)$, donc dans l'algorithme de Newton.

Proposition 6.15 (admissibilité asymptotique du pas unité par l'inégalité de décroissance suffisante) *Soit f une fonction de classe $\mathcal{C}^2$ dans le voisinage d'un point x_*, minimum local fort du problème (6.1). On note $\nabla f(x)$ et $\nabla^2 f(x)$ le gradient et la hessienne de f pour un même produit scalaire. Soit $\{x_k\}$ une suite générée par la récurrence $x_{k+1} = x_k + d_k$, où d_k est solution de (6.27). On suppose que $\{x_k\}$ converge vers x_* et que les matrices M_k sont auto-adjointes inversibles et vérifient la condition*

$$\langle (M_k - \nabla^2 f(x_*)) d_k, d_k \rangle \geqslant o(\|d_k\|^2), \quad \textit{lorsque } k \to \infty. \tag{6.28}$$

Alors, pour k suffisamment grand, on a

$$f(x_k + d_k) \leqslant f(x_k) + \omega_1 \langle \nabla f(x_k), d_k \rangle,$$

pourvu que $\omega_1 \in]0, \frac{1}{2}[$.

DÉMONSTRATION. On commence par développer $f(x_k + d_k)$ autour de x_k au second ordre :

$$f(x_k + d_k) = f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), d_k \rangle + \frac{1}{2} \langle \nabla^2 f(x_k) d_k, d_k \rangle + o(\|d_k\|^2).$$

Alors, en utilisant (6.27) et (6.28), on trouve

$$\begin{aligned} & f(x_k + d_k) - f(x_k) - \omega_1 \langle \nabla f(x_k), d_k \rangle \\ &= (1 - \omega_1) \langle \nabla f(x_k), d_k \rangle + \frac{1}{2} \langle \nabla^2 f(x_k) d_k, d_k \rangle + o(\|d_k\|^2) \\ &= \left(\frac{1}{2} - \omega_1 \right) \langle \nabla f(x_k), d_k \rangle - \frac{1}{2} \langle (M_k - \nabla^2 f(x_k)) d_k, d_k \rangle + o(\|d_k\|^2) \\ &\leqslant \left(\frac{1}{2} - \omega_1 \right) \langle \nabla f(x_k), d_k \rangle + o(\|d_k\|^2). \end{aligned}$$

Le résultat sera obtenu si l'on montre qu'il existe une constante $C > 0$ telle que $\langle \nabla f(x_k), d_k \rangle = -\langle M_k d_k, d_k \rangle \leqslant -C\|d_k\|^2$ pour k grand (alors le dernier membre ci-dessus est bien négatif pour k grand). Or ceci découle de (6.28) qui entraîne

$$\langle M_k d_k, d_k \rangle \geqslant \langle \nabla^2 f(x_*) d_k, d_k \rangle + o(\|d_k\|^2) \geqslant C\|d_k\|^2,$$

puisque les conditions du deuxième ordre sont supposées être vérifiées en x_*. □

6.5.2 Conditions de convergence superlinéaire ▲

Proposition 6.16 (Dennis et Moré [152]) *Soit $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ une fonction différentiable en un point $x_* \in \mathbb{R}^n$ tel que $F(x_*) = 0$ et $F'(x_*)$ est inversible. Soit $\{x_k\}$ une suite convergeant vers x_* et vérifiant pour tout indice k :*

$$F(x_k) + M_k(x_{k+1} - x_k) = 0, \tag{6.29}$$

où $\{M_k\}$ est une suite de matrices. Alors $\{x_k\}$ converge q-superlinéairement si, et seulement si,

$$(M_k - F'(x_*))(x_{k+1} - x_k) = o(\|x_{k+1} - x_k\|). \tag{6.30}$$

DÉMONSTRATION. Par la différentiabilité de F en x_* et $F(x_*) = 0$, on a $F(x_k) = F'(x_*)(x_k - x_*) + o(\|x_k - x_*\|)$, si bien que

$$\begin{aligned}(M_k - F'(x_*))(x_{k+1} - x_k) &= -F(x_k) - F'(x_*)(x_{k+1} - x_k) \qquad [(6.29)] \\ &= -F'(x_*)(x_{k+1} - x_*) + o(\|x_k - x_*\|).\end{aligned}$$

Si $\{x_k\}$ converge superlinéairement, on en déduit directement (6.30). Réciproquement, si (6.30) a lieu, on en déduit que $F'(x_*)(x_{k+1} - x_*) = o(\|x_k - x_*\|)$ et donc la convergence superlinéaire de $\{x_k\}$ grâce à l'inversibilité de $F'(x_*)$. □

Notes

Pour les règles de recherche linéaire présentées dans ce chapitre, on pourra consulter les travaux originaux de Curry [135 ; 1944], d'Armijo [18 ; 1966], de Wolfe [546, 547 ; 1969-1971], de Zoutendijk [564 ; 1970], de Fletcher [195 ; 1980] et de Lemaréchal [360 ; 1981]. On trouvera une présentation générale des techniques de détermination de pas par encadrement au chapitre 3 de [66].

Si l'on parvient à faire tendre le gradient vers zéro sans trop de difficulté, en général, on n'a pas pour autant nécessairement la convergence *des itérés* vers un minimum de la fonction, même avec l'algorithme du gradient et une recherche linéaire raisonnable. Un contre-exemple est donné par Gonzaga [250 ; 2000]. La dernière partie de l'énoncé de la proposition 6.8 et son estimation du nombre d'itérations en $O(\varepsilon^{-2})$ pour obtenir un gradient plus petit que $\varepsilon > 0$ en norme est reprise de [413 ; 2004, p. 29].

La suite minimisante spéciale du lemme 6.14 peut aussi être obtenue en utilisant le principe variationnel d'Ekeland [176 ; 1974], au lieu de la recherche linéaire comme dans la démonstration proposée ici (voir Borwein et Zhu [70 ; 2010, lemme 2.4.2]).

De manière à accepter plus rapidement le pas le long de la direction de recherche d_k, il est parfois intéressant de faire ce que l'on appelle de la *recherche linéaire non monotone* : on remplace la condition de descente suffisante (6.9) par

$$f(x_{k+1}) \leqslant \left(\max_{0 \leqslant j \leqslant m(k)} f(x_{k-j}) \right) + \omega_1 \alpha_k \langle g_k, d_k \rangle,$$

qui est donc plus facilement vérifiée que (6.9). On doit imposer des conditions sur le décalage d'indice maximal $m(k)$ pour préserver la convergence : $m(1) = 0$, $0 \leqslant m(k) \leqslant \min[m(k-1) + 1, M]$. En pratique, $M \in \mathbb{N}$ est une petite constante entière, souvent prise égale à 3. Donc $\{f(x_k)\}$ n'est plus nécessairement décroissante (c'est dans ce sens que la recherche linéaire est dite « non monotone »). Grippo, Lampariello et Lucidi [272 ; 1986] utilisent cette RL avec l'algorithme de Newton, Lucidi et Roma [371 ; 1994] avec le gradient conjugué non linéaire.

Certains algorithmes, à l'utilité pratique discutable, déterminent un pas le long d'une direction de descente, sans chercher à faire décroître le critère f, mais en utilisant des formules déterminées par des considérations diverses. Ainsi, la règle de Barzilai-Borwein [33] utilise une estimation de la courbure de f suivant la direction de descente; les règles de [338, 3, 448, 449] utilisent des propriétés de minimalité le long de d_k (minimalité de la norme du gradient ou d'une combinaison convexe de celle-ci et du critère) et permettent d'étendre les résultats de convergence de la méthode du gradient

de la section 7.1. On ne peut démontrer des résultats de convergence que sous des hypothèses restrictives.

L'idée d'utiliser la régularisation de Moreau-Yosida, comme dans l'algorithme proximal, pour la résolution de problèmes d'optimisation mal conditionnés remonte au moins à Bellman, Kalaba et Lockett [35 ; 1966, chapitre V]. Ce principe fut généralisé par Martinet [379 ; 1970] à la minimisation de fonctions convexes et par Rockafellar [468, 469 ; 1976] à la recherche de zéros d'opérateurs monotones maximaux ainsi qu'à l'optimisation convexe. L'influence des *préconditionneurs* R_k est analysée, par exemple, par Qi et Chen [451 ; 1997], Chen et Fukushima [105 ; 1999]. On pourra aussi consulter [118]. La section 7.2.2 s'inspire largement de [295 ; section XV.4.2].

Exercices

6.1. *Directions de descente en optimisation différentiable.*

1) Les dessins de la figure 6.6 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 ?

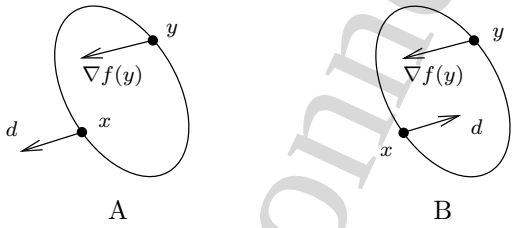


Fig. 6.6. Directions de descente ?

2) Soient $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ une fonction différentiable, $x \in \mathbb{R}^n$ et $\nabla f(x)$ le gradient de f en x pour un produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle$ (on note $\| \cdot \|$ la norme associée). Soit enfin $d \in \mathbb{R}^n$ une direction *non nulle* telle que

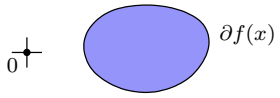
$$\|\nabla f(x) + \alpha d\| \leqslant \|\nabla f(x)\|,$$

où $\alpha > 0$. Montrez que d est une direction de descente de f en x.

6.2. *Directions de descente en optimisation non différentiable.*

1) Soient $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ une fonction convexe différentiable et x et y deux points de $\mathbb{R}^n$ tels que $f(y) < f(x)$. Montrez que $y - x$ est une direction de descente de f en x.

2) Soient $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ une fonction convexe et $D := \{d \in \mathbb{R}^2 : f'(x; d) \leqslant 0\}$ l'ensemble des directions de descente au sens large (il n'y a pas d'inégalité stricte) de f en un point $x \in \mathbb{R}^2$. On a représenté ci-dessous le sous-différentiel $\partial f(x)$ de f en x pour le produit scalaire euclidien et l'origine 0.



a) Déterminez graphiquement l'ensemble D.
b) Montrez par un contre-exemple que $-\partial f(x)$ n'est pas nécessairement contenu dans D (autrement dit, l'opposé d'un sous-gradient n'est pas nécessairement une direction de descente).
c) Montrez que, si p est la projection de 0 sur $\partial f(x)$, alors $f'(x;-p) \leqslant -\|p\|^2$ (donc, si $0 \notin \partial f(x)$, $-p$ est une direction de descente de f en x).

3) Soient $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ une fonction différentiable et $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ la fonction définie par $f(x) = \|F(x)\|$, où $\|\cdot\|$ est une norme sur $\mathbb{R}^m$. Soit $d \in \mathbb{R}^n$ une direction telle que

$$\|F(x) + F'(x) \cdot d\| < \|F(x)\|.$$

Montrez que f a des dérivées directionnelles et que d est une direction de descente de f en x, dans le sens où $f'(x;d) < 0$.

6.3. *Détermination d'un pas de Goldstein.* Donnez un algorithme déterminant un pas de Goldstein (vérifiant donc (6.10)) en un nombre fini d'étapes sous des conditions semblables à celles de la proposition 6.7 (dans ce cas, on n'a besoin de la dérivabilité de f qu'en zéro et de sa continuité).

6.4. *Toute direction de descente est un gradient.* Toute direction de descente d'une fonction $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R}$ en x, définie sur un espace vectoriel $\mathbb{E}$, est l'opposé du gradient de f en x pour un certain produit scalaire sur $\mathbb{E}$.

7 Algorithmes du premier ordre

Il n'y pas d'algorithme meilleur que tout autre quel que soit le critère de performance que l'on adopte, même dans le champ restreint de l'optimisation sans contrainte. Les critères d'appréciation sont en effet multiples : vitesse de convergence des suites générées ou de la valeur optimale, coût interne (nombre d'opérations) ou externe (nombre d'évaluations de fonctions) de l'itération, complexité itérative de l'algorithme (nombre total d'itérations pour atteindre un seuil donné), espace mémoire requis, *etc.* On trouve plutôt tout un éventail de méthodes plus ou moins bien adaptées à des problèmes particuliers. Il faut donc bien connaître les caractéristiques de ces algorithmes pour qu'en présence d'un problème donné, l'on puisse faire un choix à bon escient. Ce chapitre présente un premier ensemble de techniques qui sont toutes utiles à des degrés divers et selon le contexte ; cela sera précisé aux cours des sections qui leur sont consacrées. Elles ont la caractéristique d'être du *premier ordre*, c'est-à-dire de n'utiliser de la fonction à minimiser, que sa valeur et sa dérivée première.

L'algorithme du gradient est une bien mauvaise méthode (elle converge trop lentement), mais son analyse sert de référence à l'étude d'autres algorithmes plus complexes; nous l'aborderons à la section 7.1. Le chapitre étudie l'algorithme proximal pour la minimisation de fonctions convexes (section 7.2). Celui-ci, bien que non implémentable en pratique, sera utilisé pour interpréter certains algorithmes de dualité au chapitre 13.

Connaissances supposées. La section 7.2 sur l'algorithme proximal suppose connues les notions de sous-différentiabilité de fonctions convexes, de point proximal et de régularisée de Moreau-Yosida (sections 3.6 et 3.7).

7.1 Algorithme du gradient

On ne le répétera sans doute jamais assez : *l'algorithme du gradient est une très mauvaise méthode d'optimisation* ! La preuve en est qu'elle requiert génériquement un nombre infini d'itérations pour minimiser une fonction quadratique strictement convexe de deux variables. Sachant que ce problème est équivalent à la résolution d'un système linéaire de deux équations à deux inconnues, dont la solution peut s'obtenir manuellement par élimination d'une des deux variables, on comprend l'ampleur de l'inefficacité. Pire, si le rapport des valeurs propres du hessien de la fonction est grand (mauvais conditionnement du problème), une précision raisonnable sur la solution ne peut jamais être atteinte en un temps de calcul supportable. L'opinion la plus couramment rencontrée est qu'il est toujours préférable d'utiliser l'algorithme de BFGS à mémoire limitée (section 10.2.5), qui a un champ d'application à peu près identique

– oracle (ou simulateur) et espace mémoire semblables – et n'est guère plus difficile à implémenter. Cette opinion reste vraie selon nous, mais ne condamne pas pour autant l'algorithme du gradient. D'abord, on ne peut se passer de son étude, car elle sert de base à celle d'algorithmes plus complexes. Ensuite, il permet d'interpréter d'autres algorithmes qui ne se présentent pas dans leur conception comme un algorithme de gradient, mais qui y sont apparentés (nous pensons à la relaxation lagrangienne et à la méthode des multiplicateurs). Enfin, l'utilisation de l'optimisation dans de nouvelles applications (traitement du signal, analyse des données massives, apprentissage, *etc* [424, 505]) a remis cet algorithme et ses variantes au goût du jour.

Dans cette section, $\mathbb{E}$ est un espace euclidien, dont le produit scalaire est noté $\langle \cdot, \cdot \rangle$ et la norme associée est notée $\| \cdot \|$. L'espace vectoriel $\mathbb{E}$ étant supposé de dimension finie, le nombre de variables des problèmes d'optimisation posés sur $\mathbb{E}$ en est la dimension

$$n := \dim \mathbb{E}.$$

7.1.1 Définition

On s'intéresse dans cette section au problème de minimisation sans contrainte

$$f_* := \inf_{x \in \mathbb{E}} f(x),$$

où $f : \Omega \to \mathbb{R}$ est une fonction définie et différentiable sur un ouvert $\Omega \subseteq \mathbb{E}$.

L'*algorithme du gradient* (ou *de la plus profonde descente*) a déjà été introduit à la section 6.2.1. Il génère une suite $\{x_k\} \subseteq \mathbb{E}$ par la récurrence

$$\boxed{x_{k+1} = x_k - \alpha_k g_k,} \tag{7.1}$$

où $g_k = \nabla f(x_k)$ est le gradient de f pour le produit scalaire de $\mathbb{E}$ et $\alpha_k > 0$ est un pas déterminé par recherche linéaire (section 6.3).

Il s'agit donc d'un algorithme à directions de descente (chapitre 6), dont les directions sont les *antigradients* $-g_k$, des directions opposées au gradient. Ces directions ont la particularité d'avoir un *angle de descente* θ_k défini en (6.2) qui est nul, si bien que son cosinus vaut un :

$$\forall\, k \geqslant 1 : \qquad \cos \theta_k = 1. \tag{7.2}$$

Cette particularité implique des résultats de convergence et de complexité itérative aisé à déterminer.

Le lemme suivant est utilisé pour étudier la vitesse de convergence de la méthode du gradient.

Lemme 7.1 (inégalité de Kantorovitch [322]) *Soient M une matrice d'ordre n symétrique définie positive et $v \in \mathbb{R}^n$ de norme 1. Alors*

$$(v^\mathsf{T} M v)(v^\mathsf{T} M^{-1} v) \leqslant \frac{(\lambda_{\max} + \lambda_{\min})^2}{4 \lambda_{\max} \lambda_{\min}},$$

où $\lambda_{\max}$ et $\lambda_{\min}$ sont les valeurs propres maximale et minimale de M.

Démonstration. □

Proposition 7.2 *Soit f une fonction quadratique strictement convexe de hessien H (défini positif). Utilisée pour minimiser cette fonction, la méthode du gradient à pas optimal génère une suite $\{x_k\}$ convergeant q-linéairement vers l'unique minimum x_* de f. Plus précisément,*

$$\frac{\|x_{k+1} - x_*\|_H}{\|x_k - x_*\|_H} \leqslant \frac{\kappa - 1}{\kappa + 1}, \quad \text{pour } k \geqslant 1,$$

où $\|\cdot\|_H = (\cdot^\mathsf{T} H \cdot)^{1/2}$ est la norme associée à H et κ est le conditionnement de H.

Démonstration. □

7.2 Algorithme proximal ⊖

7.2.1 Définition

Soit $\mathbb{E}$ un espace euclidien (produit scalaire $\langle\cdot,\cdot\rangle$ et norme associée $\|\cdot\|$). À un opérateur auto-adjoint défini positif M, on associe le produit scalaire

$$\langle\cdot,\cdot\rangle_M : (u,v) \in \mathbb{E}\times\mathbb{E} \mapsto \langle u, v\rangle_M := \langle Mu, v\rangle$$

et la norme

$$\|\cdot\|_M : u \in \mathbb{E} \mapsto \|u\|_M := \langle u, u\rangle_M^{1/2}.$$

On s'intéresse dans cette section à la minimisation d'une fonction $f \in \overline{\mathrm{Conv}}(\mathbb{E})$ (c.-à-d., propre, convexe et fermée), qui n'est pas nécessairement différentiable. Soit $\{M_k\}$ une suite d'opérateurs auto-adjoints définis positifs, qui seront utilisés comme *préconditionneurs* de l'algorithme proximal présenté ci-après, et peuvent être générés au fur et à mesure que l'algorithme progresse. Rappelons que le point proximal d'un point $x \in \mathbb{E}$, associé à la fonction f et à l'opérateur M_k, est le point noté et défini par

$$P_k(x) := \operatorname*{arg\,min}_{y\in\mathbb{E}} \left(f(y) + \frac{1}{2}\|y - x\|^2_{R_k^{-1}} \right). \tag{7.3}$$

Cette notion a été introduite à la section 3.7.1. Nous ferons évidemment souvent référence aux résultats de cette section. Par la condition nécessaire et suffisante d'optimalité du problème dans (7.3), on a

$$x_p = P_k(x) \qquad \Longleftrightarrow \qquad \exists\, g_p \in \partial f(x_p) : \quad x_p = x - R_k g_p.$$

où le sous-différentiel $\partial f(x)$ est calculé pour le produit scalaire originel $\langle\cdot,\cdot\rangle$.

L'*algorithme proximal* génère une suite $\{x_k\}$ par la formule

$$x_{k+1} := P_k(x_k) = x_k - R_k g_{k+1}, \qquad \text{où} \qquad g_{k+1} \in \partial f(x_{k+1}). \tag{7.4}$$

On peut interpréter cet algorithme de diverses manières.

1) *C'est une méthode de sous-gradient implicite pour minimiser f.*
Le sous-gradient g_{k+1} est en effet évalué en x_{k+1} (qui est inconnu), plutôt qu'en x_k (dans l'algorithme du gradient de la section 7.1). Donc l'équation (7.4) est non linéaire en x_{k+1}, si bien que le nouvel itéré x_{k+1} s'obtiendra en général par un procédé itératif, par exemple celui qui consiste à résoudre itérativement le problème d'optimisation dans (7.3).

2) *C'est un algorithme à directions de descente sur f avec pas unité.*
La direction $-R_k g_{k+1}$ est en effet une direction de descente de f en x_k parce que $R_k g_{k+1}$ est une direction de montée en x_{k+1} et que f est convexe. On a en effet

$$f'(x_{k+1}; R_k g_{k+1}) \geqslant \langle g_{k+1}, R_k g_{k+1}\rangle \geqslant 0, \tag{7.5}$$

où la première inégalité vient du fait que $g_{k+1} \in \partial f(x_{k+1})$ (point (i) de la proposition 3.49). Puis, par le point (iv) de la proposition 3.18 et (7.4) :

$$f'(x_k; x_{k+1}-x_k) \leqslant -f'(x_{k+1}; x_k - x_{k+1}) = -f'(x_{k+1}; R_k g_{k+1}) \leqslant 0.$$

On observe aussi que l'algorithme s'impose systématiquement un pas unité le long de la direction $-R_k g_{k+1}$. On constate aussi que ce pas fait décroître f à chaque itération, puisqu'en prenant $y = x_k$ dans (7.3), on obtient

$$f(x_{k+1}) \leqslant f(x_{k+1}) + \frac{1}{2}\|x_{k+1} - x_k\|^2_{R_k^{-1}} \leqslant f(x_k). \tag{7.6}$$

3) *C'est l'algorithme du gradient, pour le produit scalaire $\langle\cdot,\cdot\rangle_{R_k^{-1}}$, avec pas unité, pour minimiser la régularisée de Moreau-Yosida de f*, à savoir la fonction

$$\tilde f : x \in \mathbb{E} \mapsto \tilde f(x) := \inf_{y\in\mathbb{E}} \left(f(y) + \frac{1}{2}\|y - x\|^2_{R_k^{-1}} \right).$$

En effet, d'après la proposition **??**, le gradient de $\tilde f$ pour le produit scalaire $\langle\cdot,\cdot\rangle$ s'écrit

$$\nabla \tilde f(x_k) = R_k^{-1}(x_k - x_{k+1}) = g_{k+1}.$$

Dès lors $R_k g_{k+1}$ est le gradient de $\tilde f$ en x_{k+1} pour le produit scalaire $\langle\cdot,\cdot\rangle_{R_k^{-1}}$. Notons que les itérés générés font aussi décroître $\tilde f$ de façon monotone. En effet, (7.6) se récrit $f(x_{k+1}) \leqslant \tilde f(x_k) \leqslant f(x_k)$, si bien que l'on a

$$\tilde f(x_{k+1}) \leqslant f(x_{k+1}) \leqslant \tilde f(x_k).$$

Voilà un algorithme bien étrange, puisque pour minimiser f, il faut qu'à chaque itération, l'algorithme proximal minimise la fonction

$$f^k : y \in \mathbb{E} \mapsto f^k(y) := f(y) + \frac{1}{2}\|y - x_k\|^2_{R_k^{-1}},$$

qui semble bien être aussi compliquée que f. Ce point de vue doit être relativisé au vu des remarques suivantes.

1) La fonction f^k à minimiser (à chaque itération, ne l'oublions pas) peut être plus attrayante que f, du fait de sa *forte convexité*. Pour certains algorithmes, cette propriété est une aubaine, permettant d'accélérer leur convergence et de mieux la contrôler. Cette fonction a aussi un minimum unique, ce qui n'est pas nécessairement le cas de f.

2) Comme nous le verrons au chapitre 13, certains algorithmes de dualité peuvent être *interprétés* comme des algorithmes proximaux. Ces algorithmes de dualité s'appliquent en fait à des fonctions f dont l'évaluation résulte de la minimisation d'une fonction (le lagrangien) et il n'est pas plus coûteux d'évaluer f que de minimiser f^k (pourvu que $R_k \succ 0$), qui revient à minimiser une autre fonction (le lagrangien augmenté). Ces algorithmes de dualité ont donc tout leur sens. Leur interprétation en termes d'algorithme proximal permet alors d'en obtenir des propriétés difficiles à mettre en évidence autrement.

3) Observons que si f est *séparable*, c'est-à-dire si elle s'écrit comme suit

$$f(x) = \sum_{j=1}^{N} f_j(x_{D_j}),$$

où les D_j sont de *petites* parties disjointes de l'ensemble des indices $[1:n]$, il en est de même de f^k (pourvu que R_k soit diagonale par blocs). C'est une propriété intéressante lorsqu'on cherche à résoudre de grands problèmes par des techniques de décomposition.

4) L'algorithme proximal a un *effet stabilisant*. Lorsque f a plusieurs minimiseurs, l'algorithme génère une suite convergeant vers l'un d'entre eux. L'algorithme proximal est parfois utilisé pour stabiliser des algorithmes qui ne convergeraient pas sans modification lorsque le problème considéré devient singulier.

7.2.2 Convergence

Les propositions 7.3 et 7.4 ci-desous explorent quelques propriétés de convergence de l'algorithme proximal, dans des situations de plus en plus restrictives.

Un des rôles de l'opérateur R_k dans l'itération de l'algorithme proximal peut se comprendre en examinant l'influence de son ordre de grandeur dans le problème (7.3) dont x_{k+1} est la solution. Si R_k est *très petit*, la pénalité introduite par le terme quadratique est *très grande*, si bien que le déplacement $x_{k+1} - x_k$ peut devenir *très petit* au point d'empêcher le progrès vers une solution (de ce point de vue, l'opérateur $R_k = +\infty I$ conviendrait parfaitement, puisqu'il permettrait de résoudre le problème de minimisation en une seule itération). Comme nous le verrons dans la démonstration de la proposition 7.3 ci-dessous, la condition suivante

$$\sum_{k\geqslant 0} \lambda_{\min}(R_k) = +\infty \tag{7.7}$$

est suffisante.

L'algorithme proximal à métrique variable R_k est difficile à analyser du fait de la modification de R_k à chaque itération, qui empêche d'utiliser les relations de monotonie issues de la formule (**??**), permettant de comparer deux itérations successives ou les itérés de l'itération courante à une solution du problème (un argument classique du cas où $R_k = r_k I$). Le résultat de convergence de la proposition 7.3 repose alors sur la monotonie suivante, observée au point 2 de la page 292 : l'algorithme proximal fait décroître la fonction f à chaque itération.

On note $\tilde{f}(x_k)$ la valeur optimale dans (7.3), qui est la valeur de la régularisée de Moreau-Yosida en x_k. Comme x_k minimise f si, et seulement si, $\tilde{f}(x_k) = f(x_k)$, il est naturel de s'intéresser à l'écart entre ces deux valeurs, que l'on note

$$\begin{aligned}
\delta_k &:= f(x_k) - \tilde{f}(x_k) \\
&= f(x_k) - f(x_{k+1}) - \frac{1}{2}\|x_{k+1} - x_k\|^2_{R_k^{-1}} \quad [\text{définition de } \tilde{f}(x_k)] \\
&= f(x_k) - f(x_{k+1}) - \frac{1}{2}\langle R_k g_{k+1}, g_{k+1}\rangle \quad [(7.4)]. \qquad (7.8)\\
&\geqslant 0 \qquad [(7.6)].
\end{aligned}$$

On peut obtenir mieux que cette inégalité en utilisant l'inégalité de convexité $f(x_{k+1}) + f'(x_{k+1}; x_k - x_{k+1}) \leqslant f(x_k)$ et (7.5), à savoir

$$f(x_{k+1}) + \langle R_k g_{k+1}, g_{k+1}\rangle \leqslant f(x_k). \tag{7.9}$$

Proposition 7.3 (algorithme proximal, R_k général) *Soient $\{x_k\}$ la suite générée par l'algorithme proximal et $\{g_k\}$ la suite des sous-gradients qui interviennent dans (7.4).*

1) *La suite $\{f(x_k)\}$ décroît vers une valeur $f_* \in \mathbb{R} \cup \{-\infty\}$.*
2) *Si $f_* > -\infty$, alors $\sum_k \delta_k < +\infty$.*

On suppose désormais que (7.7) a lieu.

3) *Si $f_* > -\infty$, alors zéro est point d'adhérence de la suite $\{g_k\}$.*
4) *Si $\{x_k\}$ est bornée, alors les points d'adhérence de $\{x_k\}$ sont des minima de f (en particulier, f a un minimum).*

Démonstration. 1) Le fait que $\{f(x_k)\}$ décroisse a été observé en (7.6) ou (7.9). Comme les $f(x_k) \in \mathbb{R}$, $f(x_k)$ décroît vers une limite f_* dans $\mathbb{R} \cup \{-\infty\}$.

2) En sommant les égalités (7.8), on obtient

$$\sum_{k\geqslant 0} \delta_k + \frac{1}{2}\sum_{k\geqslant 0} \langle R_k g_{k+1}, g_{k+1}\rangle = f(x_0) - f_* < \infty.$$

Comme la seconde série est positive, on en déduit le résultat.

3) Grâce à l'identité précédente, on a aussi

$$\frac{1}{2}\sum_{k\geqslant 0}\lambda_{\min}(R_k)\|g_{k+1}\|^2 < +\infty.$$

On en déduit qu'il existe une sous-suite de $\{g_k\}$ qui tend vers zéro, sinon il existerait une constante $\gamma > 0$ tel que $\|g_k\| \geqslant \gamma$ et l'inégalité ci-dessus contredirait (7.7).

4) Si $\{x_k\}$ est bornée, alors $f_* > -\infty$, car $f(x_k) \to f_*$ et f a une minorante affine (proposition 3.6). Il suffit de montrer que f_* est la valeur minimale de f, puisque $f(x_k) \to f_*$ (point 1) et qu'alors un point d'adhérence x_* de $\{x_k\}$ sera tel que $f(x_*) = f_*$ (f est fermée), ce qui implique que x_* minimise f. Par le point 3, il existe une sous-suite d'indices $\mathcal{K}$ telle que $\{g_k\}_{k\in\mathcal{K}} \to 0$. Comme $\{x_k\}$ est bornée, il existe une sous-suite d'indices $\mathcal{K}' \subseteq \mathcal{K}$ telle que $\{x_k\}_{k\in\mathcal{K}'} \to x_*$. On peut alors passer à la limite dans $g_k \in \partial f(x_k)$ (résultat de (7.4)) pour obtenir $0 \in \partial f(x_*)$ (point (iii) de la proposition 3.61), c'est-à-dire que x_* minimise f et donc que $f_* = \inf f$. □

L'algorithme proximal a davantage de proprétés lorsque $R_k = r_k R$, où r_k est un scalaire strictement positif et R est un opérateur auto-adjoint défini positif fixé. Le cas où $R_k = r_k I$ est souvent rencontré. Dans ce cas, la condition de convergence (7.7) devient la condition sur les r_k suivante :

$$\sum_{k\geqslant 0} r_k = +\infty. \tag{7.10}$$

Comme exemple de propriété supplémentaire : la suite $\{x_k\}$ est nécessairement minimisante, même si elle n'est pas bornée (voir le point 1 ci-dessous).

Proposition 7.4 (algorithme proximal, $R_k = r_k R$) *Soient $\{x_k\}$ la suite générée par l'algorithme proximal avec $R_k = r_k R$, où r_k est un scalaire strictement positif et R est un opérateur auto-adjoint défini positif, et $\{g_k\}$ la suite des sous-gradients qui interviennent dans (7.4). On suppose que (7.10) a lieu.*

1) *La suite $\{f(x_k)\}$ décroît vers la valeur minimale de f (qui peut être $-\infty$).*
2) *Si, de plus, $\{r_k\}$ est bornée et f a un minimiseur, alors $\{x_k\}$ converge vers un minimiseur de f.*

Démonstration. 1) L'argument consiste à examiner comment $\{x_k\}$ dévie d'une suite de Fejér, la déviation étant mesurée au moyen de la fonction f. On regarde donc comment évolue l'écart $x_k - x$ en norme R^{-1}, pour un $x \in \mathbb{E}$ pour l'instant arbitraire. La récurrence $x_{k+1} = x_k - r_r R g_{k+1}$ conduit à $x_{k+1} - x = x_k - x - r_r R g_{k+1}$, puis à l'identité suivante en prenant le carré des normes R^{-1} :

$$\|x_{k+1} - x\|^2_{R^{-1}} = \|x_{k+1} - x_k\|^2_{R^{-1}} + 2\langle x_{k+1} - x_k, x_k - x\rangle_{R^{-1}} + \|x_k - x\|^2_{R^{-1}}. \tag{7.11}$$

L'idée-clé est d'estimer les deux premiers termes du membre de droite (qui font éventuellement dévier $\{x_k\}$ d'une suite de Fejér) par une variation de f. On a

$$\begin{aligned} f(x) &\geqslant f(x_{k+1}) + \langle g_{k+1}, x - x_{k+1}\rangle \qquad \text{[inégalité de convexité]} \\ &= f(x_{k+1}) + \langle R_k^{-1}(x_k - x_{k+1}), x - x_{k+1}\rangle \qquad [(7.4)] \\ &= f(x_{k+1}) + \langle R_k^{-1}(x_k - x_{k+1}), x - x_k\rangle + \langle R_k^{-1}(x_k - x_{k+1}), x_k - x_{k+1}\rangle. \end{aligned}$$

On fait ensuite apparaître δ_k donné par (7.8) :

$$f(x) \geqslant f(x_k) + \frac{1}{r_k}\,\langle x_k - x_{k+1}, x - x_k\rangle_{R^{-1}} + \frac{1}{2r_k}\,\|x_k - x_{k+1}\|_{R^{-1}}^2 - \delta_k.$$

En multipliant par $2r_k$, on obtient une majoration des deux premiers termes du membre de droite de (7.11), qui devient

$$\|x_{k+1} - x\|_{R^{-1}}^2 \leqslant \|x_k - x\|_{R^{-1}}^2 + 2r_k\Big[f(x) - f(x_k) + \delta_k\Big]. \tag{7.12}$$

Choisissons maintenant $x \in \mathbb{E}$. On sait d'après le point 1 de la propoisiton 7.3, que $f(x_k)$ décroît vers une limite f_*. Si $f_* = -\infty$, le résultat est démontré. Supposons désormais que $f_* > -\infty$. Si $f_* \neq \inf f$, on peut trouver un $x \in \mathbb{E}$ et un $\eta > 0$ tel que $f(x) + \eta \leqslant f(x_k)$ pour tout indice $k \geqslant 0$. Alors l'inégalité précédente devient

$$\forall\, k \geqslant 0 : \quad \|x_{k+1} - x\|_{R^{-1}}^2 \leqslant \|x_k - x\|_{R^{-1}}^2 + 2r_k(\delta_k - \eta).$$

Mais $\delta_k \to 0$ par le point 2 de la proposition 7.3, si bien que pour k_1 assez grand :

$$\forall\, k \geqslant k_1 : \quad \|x_{k+1} - x\|_{R^{-1}}^2 \leqslant \|x_k - x\|_{R^{-1}}^2 - \eta r_k.$$

En sommant ces inégalités de k_1 à $k_2 \geqslant k_1$, on obtient

$$0 \leqslant \|x_{k_2+1} - x\|_{R^{-1}}^2 \leqslant \|x_{k_1} - x\|_{R^{-1}}^2 - \eta \sum_{k=k_1}^{k_2} r_k,$$

si bien que la série $\sum_k r_k$ serait convergente, en contradiction avec l'hypothèse (7.10).

2) Soit $\bar{x}$ un minimiseur de f. En prenant $x = \bar{x}$ dans (7.12), on obtient

$$\forall\, k \geqslant 0 : \quad \|x_{k+1} - \bar{x}\|_{R^{-1}}^2 \leqslant \|x_k - \bar{x}\|_{R^{-1}}^2 + 2r_k\delta_k. \tag{7.13}$$

Si $\{r_k\}$ est bornée, la série $\sum_k r_k\delta_k$ converge et, en sommant les inégalités précédentes, on voit que $\{x_k\}$ est bornée.

Soit $\bar{x}$ un point d'adhérence de $\{x_k\}$, qui est nécessairement un minimiseur de f (car $f(x_k) \to \inf f$, par le point 1, et f est s.c.i.). Montrons que toute la suite $\{x_k\}$ convergence vers $\bar{x}$. Soit $\varepsilon > 0$. Il suffit de montrer que $\|x_k - \bar{x}\|_{R^{-1}}^2 \leqslant \varepsilon$ pour k assez grand. Par définition de $\bar{x}$, on peut trouver un indice k_1 tel que

$$\|x_{k_1} - \bar{x}\|_{R^{-1}}^2 \leqslant \frac{\varepsilon}{2} \qquad \text{et} \qquad 2\sum_{k \geqslant k_1} r_k\delta_k \leqslant \frac{\varepsilon}{2}.$$

En sommant les inégalités (7.13), on trouve que $\|x_k - \bar{x}\|_{R^{-1}}^2 \leqslant \varepsilon$ pour tout $k \geqslant k_1$. □

7.2.3 Versions approchées ▲

Voir Rockafellar [469 ; 1976], Qi et Chen [451 ; 1997].

7.3 Méthode de Gauss-Seidel

La méthode de Gauss-Seidel est initialement une méthode itérative de résolution d'un système d'équations linéaires (de dimension finie) de la forme $Ax = b$ (section 7.3.1), ce qui signifie qu'elle génère une suite qui converge vers une solution de cette équation, lorsque celle-ci en a une et lorsque des conditions de convergence sont satisfaites (par exemple lorsque A est symétrique définie positive). L'algorithme suppose que la diagonale de A est formée d'éléments non nuls. Elle se décline aussi en une version « par blocs ».

Le principe de la méthode peut s'étendre à la résolution de systèmes d'équations non linéaires (section 7.3.2) et à l'optimisation (section 7.3.3), mais avec des conditions d'efficacité moins claires. En optimisation, l'utilité de cette approche dépendra beaucoup de la structure du problème. Le principe gauss-seidelien permet aussi d'interpréter d'autres algorithmes.

7.3.1 En algèbre linéaire

Version élément par élément

Rappelons d'abord ce qu'est la méthode de Gauss-Seidel pour résoudre en $x \in \mathbb{R}^n$ le système linéaire

$$Ax = b,$$

dans lequel $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ et $b \in \mathbb{R}^n$. Il s'agit d'un algorithme itératif, générant donc une suite $\{x_k\} \subseteq \mathbb{R}^n$. On interrompt le calcul de la suite lorsque l'itéré courant, disons x_k, est jugé suffisamment proche d'une solution, par exemple parce que la norme du *résidu* $\|Ax_k - b\|$ est petite.

Soit $x_k = ((x_k)_1, \ldots, (x_k)_n) \in \mathbb{R}^n$ l'itéré courant. L'itéré suivant $x_{k+1} = ((x_{k+1})_1, \ldots, (x_{k+1})_n) \in \mathbb{R}^n$ se calcule en n étapes, comme suit.

- *Étape* 1. Si l'on suppose que $a_{11} \neq 0$ et connaissant $((x_k)_2, \ldots, (x_k)_n)$, on peut calculer $(x_{k+1})_1$ au moyen de la première équation du système linéaire $Ax = b$. De manière plus précise, $(x_{k+1})_1 \in \mathbb{R}$ est pris comme l'unique solution de

$$a_{11}\boxed{(x_{k+1})_1} + a_{12}(x_k)_2 + \cdots + a_{1n}(x_k)_n = b_1.$$

- *Étape* 2. Si l'on suppose que $a_{22} \neq 0$ et connaissant $((x_{k+1})_1, (x_k)_3, \ldots, (x_k)_n)$, on peut calculer $(x_{k+1})_2$ au moyen de la deuxième équation du système linéaire $Ax = b$. De manière plus précise, $(x_{k+1})_2 \in \mathbb{R}$ est pris comme l'unique solution de

$$a_{21}(x_{k+1})_1 + a_{22}\boxed{(x_{k+1})_2} + a_{23}(x_k)_3 + \cdots + a_{2n}(x_k)_n = b_2.$$

- *Étape* $i \in [1\,{:}\,n]$ (cas général). Si l'on suppose que $a_{ii} \neq 0$ et connaissant $((x_{k+1})_1, \ldots, (x_{k+1})_{i-1}, (x_k)_{i+1}, \ldots, (x_k)_n)$, on peut calculer $(x_{k+1})_i$ au moyen de la i-ième équation du système linéaire $Ax = b$. De manière plus précise, $(x_{k+1})_i \in \mathbb{R}$ est pris comme l'unique solution de

$$a_{i1}(x_{k+1})_1 + \cdots + a_{i,i-1}(x_{k+1})_{i-1} + a_{ii}\boxed{(x_{k+1})_i} + a_{i,i+1}(x_k)_{i+1} + \cdots + a_{in}(x_k)_n = b_i.$$

En résumé, on calcule les composantes $(x_{k+1})_i$ de x_{k+1} de manière séquentielle pour $i = 1, \ldots, n$ par

$$\boxed{(x_{k+1})_i = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}(x_{k+1})_j - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}(x_k)_j \right).}$$

La formule fait intervenir les éléments $(x_{k+1})_j$ $(j = 1, \ldots, i-1)$ calculés dans les étapes précédentes.

L'expression matricielle de l'algorithme suppose que la matrice A se décompose comme suit

$$A = L + D + U,$$

où D est la partie diagonale de A, L sa partie triangulaire inférieure stricte et U sa partie triangulaire supérieure stricte. Une itération de la méthode de Gauss-Seidel, celle passant de x_k à x_{k+1}, consiste alors à résoudre le système triangulaire inférieur

$$\boxed{(L + D)x_{k+1} = b - Ux_k,}$$

de « haut en bas », c'est-à-dire en déterminant successivement $(x_{k+1})_1$, $(x_{k+1})_2$, …, $(x_{k+1})_n$.

Version par blocs

La méthode de Gauss-Seidel peut se décliner en une « *version par blocs* ». Celle-ci procède de manière similaire à la méthode élément par élément décrite ci-dessus, mais en remplaçant l'utilisation des éléments de A par des sous-matrices de A, appelées ici des *blocs*. On suppose que l'ensemble des indices $[1:n]$ est partitionné en p sous-intervalles (non vides et deux-à-deux disjoints) :

$$[1:n] = I_1 \cup I_2 \cup \cdots \cup I_p.$$

La matrice A et le vecteur b sont alors décomposés comme suit

$$A = \begin{pmatrix} A_{I_1 I_1} & A_{I_1 I_2} & \cdots & A_{I_1 I_p} \\ A_{I_2 I_1} & A_{I_2 I_2} & \cdots & A_{I_2 I_p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{I_p I_1} & A_{I_p I_2} & \cdots & A_{I_p I_p} \end{pmatrix} \qquad \text{et} \qquad b = \begin{pmatrix} b_{I_1} \\ b_{I_2} \\ \vdots \\ b_{I_p} \end{pmatrix},$$

où A_{IJ} est la sous-matrice de A obtenue en sélectionnant les éléments avec indices de ligne dans I et indices de colonnes dans J, tandis que b_I est le sous-vecteur de b obtenu en sélectionnant les éléments avec indices dans I.

La méthode de Gauss-Seidel par blocs suppose que les sous-matrices principales $A_{I_i I_i}$, avec $i \in [1:p]$, sont inversibles.

Une itération de la méthode de Gauss-Seidel par blocs, celle passant de x_k à x_{k+1}, s'écrit de la même manière que la méthode élément par élément, à savoir

$$\boxed{(L + D)x_{k+1} = b - Ux_k,}$$

mais avec des définitions différentes de L, D et U :

$$L = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ A_{I_2 I_1} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ A_{I_p I_1} & \cdots & A_{I_p I_{p-1}} & 0 \end{pmatrix}, \qquad D = \begin{pmatrix} A_{I_1 I_1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & A_{I_2 I_2} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & A_{I_p I_p} \end{pmatrix}$$

et $U = A - L - D$. La résolution du système triangulaire par blocs ci-dessus, se fait également de « haut en bas », c'est-à-dire en déterminant successivement $(x_{k+1})_{I_1}$, $(x_{k+1})_{I_2}$, …, $(x_{k+1})_{I_p}$.

7.3.2 Pour les systèmes non linéaires

Le principe de la méthode de Gauss-Seidel peut également s'appliquer à la résolution d'un système d'équations non linéaires $F(x) = 0$, où $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$. Ce système s'écrit donc sous la forme de n équations non linéaires à n inconnues :

$$\begin{cases} F_1(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0 \\ F_2(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0 \\ \cdots \\ F_n(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0. \end{cases}$$

La *méthode de Gauss-Seidel* résout ce système de manière itérative, en générant donc une suite $\{x_k\} \subseteq \mathbb{R}^n$. On interrompt le calcul de la suite lorsque l'itéré courant, disons x_k, est jugé suffisamment proche d'une solution, par exemple parce que la norme du *résidu* $\|F(x_k)\|$ est petite.

Soit $x_k = ((x_k)_1, \ldots, (x_k)_n) \in \mathbb{R}^n$ l'itéré courant. L'itéré suivant $x_{k+1} = ((x_{k+1})_1, \ldots, (x_{k+1})_n) \in \mathbb{R}^n$ se calcule en n étapes, comme suit.

- *Étape* 1. Connaissant $((x_k)_2, \ldots, (x_k)_n)$, on calcule $(x_{k+1})_1$ comme solution de l'équation non linéaire (cette solution est supposée exister) :

$$F_1(\boxed{(x_{k+1})_1}, (x_k)_2, \ldots, (x_k)_n) = 0.$$

- *Étape* 2. Connaissant $((x_{k+1})_1, (x_k)_3, \ldots, (x_k)_n)$, on calcule $(x_{k+1})_2$ comme solution de l'équation non linéaire (cette solution est supposée exister) :

$$F_1((x_{k+1})_1, \boxed{(x_{k+1})_2}, (x_k)_2, \ldots, (x_k)_n) = 0.$$

- *Étape* $i \in [1 : n]$ (cas général). Connaissant $((x_{k+1})_1, \ldots, (x_{k+1})_{i-1}, (x_k)_{i+1}, \ldots, (x_k)_n)$, on calcule $(x_{k+1})_i$ comme solution de l'équation non linéaire (cette solution est supposée exister) :

$$F_i((x_{k+1})_1, \ldots, (x_{k+1})_{i-1}, \boxed{(x_{k+1})_i}, (x_k)_{i+1}, \ldots, (x_k)_n) = 0.$$

La version « par blocs » se définit facilement en considérant des groupes d'équations et d'inconnues, au lieu de considérer, comme ci-dessus, équation et inconnue une par une.

7.3.3 En optimisation

Le principe de la méthode de Gauss-Seidel décrit dans la section précédente s'applique naturellement au problème d'optimisation non linéaire

$$\inf_{x\in X} f(x), \tag{7.14}$$

dans lequel on minimise une fonction $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ sur un sous-ensemble X de $\mathbb{R}^n$. Nous présentons directement ci-dessous la version « par blocs », qui est la plus utile lorsque le nombre p de blocs est faible (souvent $p = 2$). La méthode de Gauss-Seidel perd en effet de sa pertinence lorsque p est grand, par manque d'efficacité dans ce cas. la version « élément par élément » peut être vue comme un cas particulier de la version par blocs, obtenue en prenant n blocs de cardinal 1.

On suppose donc que l'ensemble des indices $[1:n]$ est *partitionné* en p blocs,

$$[1:n] = I_1 \cup I_2 \cup \cdots \cup I_p, \tag{7.15}$$

et que l'ensemble admissible est un produit cartésien de p ensembles,

$$X = X_1 \times X_2 \times \cdots \times X_p, \tag{7.16}$$

où chaque X_i est un convexe de $\mathbb{R}^{|I_i|}$. La variable $x \in \mathbb{R}^n$ se décomposera comme suit

$$x = (x_{I_1}, x_{I_2}, \ldots, x_{I_p}).$$

Lorsque f est différentiable et que $X = \mathbb{R}^n$, on pourrait obtenir une méthode de Gauss-Seidel en appliquant la méthode de la section 7.3.2 à la condition d'optimalité du premier ordre de ce problème d'optimisation sans contrainte, à savoir

$$\nabla f(x) = 0,$$

qui est un système de n équations non linéaires à n inconnues $x = (x_1, \ldots, x_n)$. Mais on peut préférer, comme ci-dessous, rester dans le domaine de l'optimisation en minimisant f séquentiellement, bloc par bloc. Cette option a l'avantage de pouvoir prendre en compte des contraintes, c'est-à-dire de restreindre les variables à l'ensemble admissible X.

La *méthode de Gauss-Seidel*[1] résout le problème d'optimisation (7.14) de manière itérative, en générant donc une suite $\{x_k\} \subseteq \mathbb{R}^n$. L'algorithme passe d'un itéré au suivant en minimisant f un bloc de variables à la fois, en séquence. On interrompt le calcul de la suite lorsque l'itéré courant, disons x_k, est jugé suffisamment proche d'une solution, par exemple parce que la norme du *gradient projeté* $\|g^{\mathrm{P}}(x_k)\|$ est jugée suffisamment petite (on rappelle que le gradient projeté $g^{\mathrm{P}}(x_k)$ est la projection orthogonale de $\nabla f(x_k)$ sur l'opposé du cône tangent $\mathrm{T}_{x_k} X$ et que celui-ci est nul en une solution de (7.14)).

[1] Cette méthode est appelée *méthode de relaxation* par Glowinski, Lions, Trémolières [234 ; 1976, page 60-68], mais cette appellation est utilisée pour beaucoup trop d'algorithmes pour qu'elle soit suffisamment discriminante.

Algorithme 7.5 (de Gauss-Seidel par bloc en optimisation) Une itération passe de l'itéré courant $x_k \in X$ à l'itéré suivant $x_{k+1} \in X$ en p étapes successives, indicées par $i = 1, \dots, p$:

$$(x_{k+1})_{I_i} \in \operatorname*{arg\,min}_{x_{I_i} \in X_i} f((x_{k+1})_{I_1}, \dots, (x_{k+1})_{I_{i-1}}, x_{I_i}, (x_k)_{I_{i+1}}, \dots, (x_k)_{I_p}). \tag{7.17}$$

La version « élément par élément » se définit facilement en considérant des blocs I_i de cardinal 1 et en minimisant f composante par composante. Ce dernier algorithme porte aussi le nom de *méthode de descente par coordonnée*.

Le résultat suivant montre la convergence de la méthode de Gauss-Seidel lorsque f est de classe C^1, coercive et strictement convexe [234 ; théorème 1.2, page 66]. Il repose sur la caractérisation de la stricte convexité, donnée à la proposition 3.22.

Proposition 7.6 (convergence de Gauss-Seidel en optimisation) *Si, pour chaque $i \in [1:p]$, X_i est un convexe fermé non vide de $\mathbb{R}^{|I_i|}$ et si f est coercive sur X, strictement convexe sur X et de classe C^1 dans un voisinage de X, alors*

1) *le problème (7.14)-(7.16) a une unique solution $\bar{x}$,*
2) *l'algorithme 12.20 est bien défini et, quel que soit l'itéré initial $x_1 \in X$, il génère une suite $\{x_k\} \subseteq X$ qui converge vers $\bar{x}$.*

Démonstration. 1) L'existence de solution se déduit de la continuité, de la coercivité de f et du fait que l'ensemble admissible est non vide et fermé (proposition 1.4). L'unicité se déduit de la stricte convexité de f et de la convexité de X (proposition 3.4).

2) *Préliminaires.* Pour les mêmes raisons qu'au point 1, tous les *problèmes intermédiaires* (7.17) ont une solution unique, si bien que l'algorithme 12.20 est bien défini. Ces solutions uniques ou *itérés intermédiaires* sont notés comme suit : $x_{k+1,0} := x_k$ et

$$x_{k+1,i} := ((x_{k+1})_{I_1}, \dots, (x_{k+1})_{I_i}, (x_k)_{I_{i+1}}, \dots, (x_k)_{I_p}), \quad \text{pour } i \in [1:p].$$

Donc $x_{k+1,i}$ est la solution du problème intermédiaire (7.17) et $x_{k+1} = x_{k+1,p}$. Par construction

$$f(x_{k+1}) \leqslant f(x_{k+1,p-1}) \leqslant \cdots \leqslant f(x_{k+1,1}) \leqslant f(x_k).$$

Comme f est bornée inférieurement par $f(\bar{x})$, ces inégalités impliquent que

$$\{f(x_k)\} \text{ et les } \{f(x_{k,i})\} \text{ convergent vers la même valeur.} \tag{7.18}$$

Par ailleurs, l'optimalité du problème intermédiaire (7.17) implique que

$$\forall\, x_{I_i} \in X_i : \quad \nabla_{x_i} f(x_{k+1,i})^{\mathsf{T}} (x_{I_i} - (x_{k+1})_{I_i}) \geqslant 0. \tag{7.19}$$

Montrons que $x_{k+1} - x_k \to 0$. La coercivité de f implique la bornitude de ces ensembles de sous-niveau (point (ii) de l'exercice 1.3). Il existe donc un réel $\beta > 0$ tel que

$$\{x : \mathbb{R}^n : f(x) \leqslant f(x_1)\} \subseteq \beta \bar{B},$$

où $\bar{B}$ est la boule unité fermée de $\mathbb{R}^n$, si bien que tous les itérés (intermédiaires ou pas) sont dans $\beta\bar{B}$. Alors, la stricte convexité donne (point (ii) de la proposition 3.22) :

$$\begin{aligned} & f(x_{k+1,i-1}) - f(x_{k+1,i}) \\ & \quad \geqslant \quad f'(x_{k+1,i}) \cdot (x_{k+1,i-1} - x_{k+1,i}) + \tfrac{1}{2} g_\beta(\tfrac{1}{2}\|x_{k+1,i-1} - x_{k+1,i}\|) \\ & \quad = \quad \underbrace{\nabla_{x_{I_i}} f(x_{k+1,i})^{\mathsf{T}}((x_k)_{I_i} - (x_{k+1})_{I_i})}_{\geqslant 0 \text{ par } (7.19)} + \tfrac{1}{2} g_\beta(\tfrac{1}{2}\|x_{k+1,i-1} - x_{k+1,i}\|) \\ & \quad \geqslant \quad \tfrac{1}{2} g_\beta(\tfrac{1}{2}\|x_{k+1,i-1} - x_{k+1,i}\|), \end{aligned}$$

où $\|\cdot\|$ désigne la norme euclidienne. En sommant :

$$f(x_k) - f(x_{k+1}) \geqslant \textstyle\sum_{i=1}^{p} \tfrac{1}{2} g_\beta(\tfrac{1}{2}\|x_{k+1,i-1} - x_{k+1,i}\|).$$

Alors (7.18) et la positivité de g_β impliquent que

$$\forall\, i \in [1:p] : \qquad g_\beta(\tfrac{1}{2}\|x_{k+1,i-1} - x_{k+1,i}\|) \to 0.$$

On utilise alors le fait que $g_\beta(0) = 0$, que $g_\beta(t) > 0$ pour $t > 0$ et la continuité de g_β pour en déduire que $\frac{1}{2}\|x_{k+1,i-1} - x_{k+1,i}\| \to 0$ lorsque $k \to \infty$, pour tout $i \in [1:p]$. Comme p est fini :

$$x_{k+1} - x_k \to 0. \tag{7.20}$$

Montrons que $x_k \to \bar{x}$, ce qui conclura la démonstration. On utilise cette fois le point (iii) de la proposition 3.22 entre x_{k+1} et la solution $\bar{x}$:

$$(f'(x_{k+1}) - f'(\bar{x})) \cdot (x_{k+1} - \bar{x}) \geqslant g_\beta(\|x_{k+1} - \bar{x}\|).$$

Mais $f'(\bar{x}) \cdot (x_{k+1} - \bar{x}) \geqslant 0$ par optimalité de $\bar{x}$ et $x_{k+1} \in X$, si bien qu'en inversant l'inégalité, on a

$$\begin{aligned} g_\beta(\|x_{k+1} - \bar{x}\|) \quad & \leqslant \quad f'(x_{k+1}) \cdot (x_{k+1} - \bar{x}) \\ & = \quad \sum_{i=1}^{p} \nabla_{x_{I_i}} f(x_{k+1})^{\mathsf{T}} (x_{k+1} - \bar{x})_{I_i} \\ & \leqslant \quad \sum_{i=1}^{p} \left(\nabla_{x_{I_i}} f(x_{k+1}) - \nabla_{x_{I_i}} f(x_{k+1,i})\right)^{\mathsf{T}} (x_{k+1} - \bar{x})_{I_i} \\ & \qquad\qquad [\text{par } (7.19) \text{ avec } x_{I_i} = \bar{x}_{I_i}] \\ & \leqslant \quad \sum_{i=1}^{p} \|\nabla_{x_{I_i}} f(x_{k+1}) - \nabla_{x_{I_i}} f(x_{k+1,i})\| \, \|x_{k+1} - \bar{x}\|, \end{aligned}$$

par l'inégalité de Cauchy-Schwarz et $\|(x_{k+1} - \bar{x})_{I_i}\| \leqslant \|x_{k+1} - \bar{x}\|$. Cela permet de conclure. En effet, $\|x_{k+1} - \bar{x}\|$ est borné par 2β. Par ailleurs, $\|x_{k+1} - x_{k+1,i}\| \leqslant \|x_{k+1} - x_k\| \to 0$ par (7.20). Alors la continuité de f', donc de $\nabla_{x_{I_i}} f$, sur le compact $\beta\bar{B}$ se traduit en une continuité uniforme, si bien que, pour tout $i \in [1:p]$, $\nabla_{x_{I_i}} f(x_{k+1}) - \nabla_{x_{I_i}} f(x_{k+1,i}) \to 0$. On en déduit que $g_\beta(\|x_{k+1} - \bar{x}\|) \to 0$ et donc que $x_k \to \bar{x}$ par le même raisonnement que pour obtenir (7.20). □

Remarques 7.7 1. Si l'on applique la proposition 7.6 au cas où $X = \mathbb{R}^n$ et f est la fonction quadratique $x \mapsto \frac{1}{2}x^\mathsf{T}Ax - b^\mathsf{T}x$, on retrouve le résultat affirmant que la méthode de Gauss-Seidel par blocs pour résoudre le système linéaire $Ax = b$ convergence, quels que soient le vecteur b et le point initial, pourvu que A soit définie positive.

2. La méthode de Gauss-Seidel est un algorithme lent (il requiert beaucoup d'itérations), dont la mise en œuvre est coûteuse (chaque itération peut demander beaucoup de temps de calcul, selon les cas). Tel qu'il est présenté, il requiert en effet la minimisation *exacte* de f dans chaque problème intermédiaire et ces p minimisations doivent être réalisées à chaque itération. Son application est donc restreinte au cas où le nombre de blocs est petit.

3. L'algoithme 12.20 ne s'étend pas aisément à des ensembles admissibles plus complexes qu'un produit cartésien d'ensembles convexes. Par exemple si l'on cherche à minimiser composante par composante la fonction linéaire $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R} : (x_1, x_2) \mapsto x_1 + x_2$ sur l'ensemble $X := \{x \in \mathbb{R}^2_+ : x_1 x_2 \geqslant 1\}$, qui n'est pas le produit cartésien de deux intervalles, tout point de la frontière de X est bloquant (c'est-à-dire que l'algorithme ne peut y progresser), alors que seul le point $\bar{x} = (1, 1)$ est solution [234] ; voir la figure 7.1.

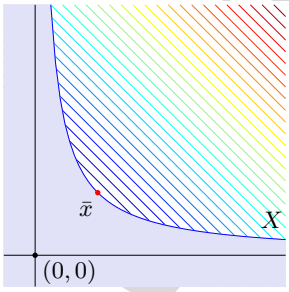


Fig. 7.1. Exemple de problème pour lequel l'algoithme 12.20, de Gauss-Seidel, reste bloqué en tout point de la frontière du domaine admissible (les droites sont les « courbes » de niveau de la fonction-objectif dans l'ensemble admissible X).

4. En l'absence de convexité, la méthode de Gauss-Seidel ne converge pas nécessairement, même pour des fonctions de classe C^∞. Powell [440 ; 1973] a en effet construit plusieurs fonctions conduisant à la non-convergence de la méthode de Gauss-Seidel composante par composante, notamment une fonction C^∞ de trois variables pour laquelle les itérés générés ont un cycle limite formé de 6 points en lesquels le gradient n'est pas nul. On peut toutefois avoir convergence si les coordonnées ne sont pas choisies cycliquement [434 ; 1971].

5. D'autres résultats de convergence sont donnés par Luo et Tseng [372 ; 1992].

Exercices

7.1. *Terminaison finie de l'algorithme proximal.* Soient $f \in \mathrm{C}\overline{\mathrm{onv}}(\mathbb{E})$ et $\tilde{f}$ sa régularisée de Moreau-Yosida (section 3.7.2). On suppose que $\bar{x} \in (\operatorname{dom} f)^{\circ}$ minimise f et que $0 \in \operatorname{int} \partial f(\bar{x})$ (de manière plus précise : il existe $\varepsilon > 0$ tel que $\bar{B}(0,\varepsilon) \subseteq \partial f(\bar{x})$). On note x_p le point proximal de $x \in \mathbb{E}$. Montrez que

(*i*) $g \in \partial f(x)$ et $\|g\| < \varepsilon \implies x = \bar{x}$,
(*ii*) $\|x - \bar{x}\| \leqslant \varepsilon \implies x_p = \bar{x}$,
(*iii*) $\tilde{f}$ est quadratique sur $\bar{B}(\bar{x},\varepsilon)$.

8 Optimisation quadratique ⊖

On s'intéresse dans ce chapitre à la résolution numérique des systèmes d'équations linéaires par des méthodes *itératives finies* ; nous verrons plus loin ce que l'on entend par ces deux qualificatifs. Pour certaines méthodes, on considérera leur extension à la résolution de systèmes d'équations non linéaires. Pour d'autres, cette extension se fera dans d'autres chapitres.

On cherche donc un point $x_* \in \mathbb{R}^n$ solution du système linéaire en x suivant

$$Ax = b, \tag{8.1}$$

où A est une matrice d'ordre n donnée et b est un vecteur donné dans $\mathbb{R}^n$. Nous supposerons toujours que A est inversible. Dans ce cas, la solution unique de (8.1) s'écrit

$$x_* = A^{-1}b,$$

où A^{-1} est la matrice inverse de A. Pour obtenir x_*, on ne calcule jamais A^{-1}. Cela n'est ni nécessaire, ni opportun dès que n dépasse quelques unités (le temps de calcul requis est alors trop important), ni stable numériquement [291 ; 2002, section 14.2]. Rappelons que la résolution d'un système linéaire d'ordre n non structuré par factorisation de la matrice A demande de l'ordre de $O(n^3)$ opérations. L'algorithme le plus simple et le plus utilisé pour ce faire est l'*élimination gaussienne*, équivalente à la *factorisation gaussienne* de la matrice A, avec pivotage partiel. Cet algorithme requiert $2n^3/3 + O(n^2)$ opérations flottantes. Les algorithmes présentés dans cette section ont aussi une complexité opérationnelle en $O(n^3)$. Nous distinguerons deux cas : celui où A est symétrique définie positive et celui où A est non symétrique.

Si la matrice A est symétrique, la solution du système (8.1) est aussi le point stationnaire de la fonction quadratique

$$f(x) = \frac{1}{2}x^\mathsf{T}Ax - b^\mathsf{T}x. \tag{8.2}$$

Si, de plus, A est définie positive, x_* réalise le minimum de f. On peut dans ce cas obtenir des algorithmes de résolution du système (8.1) à partir d'algorithmes de minimisation de f. L'*algorithme du gradient conjugué* est de ce type (section 8.2).

Si A n'est pas symétrique, on peut remplacer la résolution du système (8.1) par la résolution de l'*équation normale* équivalente

$$A^\mathsf{T}Ax = A^\mathsf{T}b. \tag{8.3}$$

Comme la matrice de ce système est symétrique définie positive, on peut songer à utiliser les techniques mentionnées ci-dessus. Cependant, le système (8.3) peut être

beaucoup moins bien conditionné que le système original (8.1), si bien qu'il est souvent préférable d'utiliser des méthodes s'attaquant directement au système (8.1), sans faire appel à des algorithmes de minimisation de fonction. L'idée est alors de générer des approximations de x_* qui sont, dans un sens à préciser, les meilleures approximations sur des sous-espaces affines de dimension croissante. On peut en effet espérer que si l'on a une « bonne » approximation de x_* sur le sous-espace affine x_1+K_p, K_p étant un sous-espace vectoriel de dimension p, il ne sera pas trop difficile d'obtenir une « bonne » approximation sur un sous-espace affine $x_1 + K_{p+1}$, de dimension $p+1$, contenant $x_1 + K_p$. Dans l'*algorithme du résidu minimal* (section 8.3), les sous-espaces K_p sont obtenus par un procédé particulier : ce sont des *sous-espaces de Krylov* (section 8.1). D'ailleurs, nous verrons que l'algorithme du gradient conjugué génère des itérés qui sont aussi dans un tel sous-espace de Krylov, si bien que ces deux algorithmes font partie de la même famille, celle dite des *méthodes de Krylov*.

Les méthodes de Krylov ont la propriété de trouver la solution du système (8.1) en un nombre fini d'étapes (en artihmétique exacte). Elles s'apparentent sur ce point aux *méthodes directes* de résolution, fondées sur la factorisation de la matrice A : factorisation gaussienne, factorisation QR... En pratique cependant, la présence d'erreurs d'arrondi dans les calculs empêche les méthodes de Krylov de trouver la solution en un nombre fini d'étapes, dès que la dimension du système linéaire dépasse quelques dizaines, si bien qu'on les range souvent dans la famille des méthodes itératives. Ces dernières sont intéressantes pour plusieurs raisons. D'abord, comme elles procèdent par améliorations successives, on peut s'arrêter lorsque la précision est jugée satisfaisante. Ceci peut se produire bien avant que la solution ne soit trouvée. Une solution « acceptable » peut donc être obtenue à un faible coût. Ensuite, elles permettent de tirer parti d'une bonne approximation initiale, ce qui est souvent le cas lorsque l'on doit résoudre une succession d'équations linéaires provenant de la linéarisation d'une même équation non linéaire. Elles ont aussi des inconvénients, par exemple, de ne pouvoir exploiter la « creusité » (caractère creux) éventuelle de A que par des produits matrice-vecteur plus rapides et d'avoir, en pratique, besoin d'un bon préconditionneur pour converger en un nombre raisonnable d'itérations.

Notons pour terminer qu'il existe aussi des méthodes itératives ne trouvant pas la solution en un nombre fini d'itérations : méthodes de Jacobi, de Gauss-Seidel, de relaxation... Les premières ont été introduites au XIX^e siècle pour calculer plus rapidement (à la main, bien sûr) des solutions approchées, alors que la résolution par élimination directe était trop fastidieuse (voir la lettre de Gauss en épigraphe de ce chapitre). Elles sont cependant généralement considérées comme moins efficaces que les méthodes de Krylov [527]. Pour une introduction à ces méthodes, on pourra consulter les livres de Varga [530 ; 1962], de Ciarlet [113 ; 1982] et de Hackbusch [277 ; 1994].

Connaissances supposées. L'introduction de l'algorithme du gradient conjugué se fait en utilisant le procédé d'orthogonalisation de Gram-Schmidt (section B.1.1).

8.1 Sous-espaces de Krylov

On appelle *sous-espace de Krylov* d'ordre p, associé à une matrice A d'ordre n et à un vecteur $r \in \mathbb{R}^n$, le sous-espace vectoriel de $\mathbb{R}^n$ engnedré par les vecteurs r, Ar,

A^2r, …, $A^{p-1}r$. On le note

$$K_p \equiv K_p(A,r) \equiv \text{vect}\{r, Ar, \ldots, A^{p-1}r\}.$$

La proposition suivante montre que la dimension de K_p vaut p, tant que p reste inférieur ou égal à un certain indice s, à partir duquel sa dimension ne bouge plus (et vaut s). On peut avoir $s < n$. On dit que le sous-espace de Krylov K_s est *saturé* et que $s = s(A,r)$ est l'*indice de saturation* des sous-espaces de Krylov associés à A et à r. La proposition montre aussi que l'indice de saturation est atteint dès que $A^{-1}r$ est « capturé » par les sous-espaces de Krylov.

Proposition 8.1 *Si A est inversible, alors il existe un indice $s \geqslant 1$ tel que*

$$K_1 \subsetneqq \cdots \subsetneqq K_s = K_p, \quad \forall p \geqslant s.$$

L'indice s est caractérisé par le fait que

$$A^{-1}r \in K_s \setminus K_{s-1}.$$

Démonstration. Il suffit de montrer que

$$A^{-1}r \in K_p \iff K_p = K_{p+1}.$$

Le cas où $r = 0$ est trivial. On peut donc supposer que $r \neq 0$.

Si $A^{-1}r \in K_p$, alors il existe des réels α_i, non tous nuls (car $r \neq 0$) tels que

$$A^{-1}r = \sum_{i=0}^{j-1} \alpha_i A^i r, \qquad 1 \leqslant j \leqslant p, \qquad \alpha_{j-1} \neq 0.$$

En appliquant A^{p-j+1}, on en déduit

$$\begin{aligned} A^{p-j}r &= \sum_{i=0}^{j-1} \alpha_i A^{p-j+i+1} r, \\ A^p r &= \frac{1}{\alpha_{j-1}} \left(A^{p-j}r - \sum_{i=0}^{j-2} \alpha_i A^{p-j+i+1} r \right). \end{aligned}$$

Ceci montre que $K_{p+1} = K_p$.

Inversement, si $K_p = K_{p+1}$, on a $A^p r \in K_p$. Il existe donc des réels β_i, non tous nuls, tels que

$$A^p r = \sum_{i=k}^{p-1} \beta_i A^i r, \qquad 0 \leqslant k \leqslant p-1, \qquad \beta_k \neq 0.$$

En appliquant A^{-k-1}, on en déduit

$$A^{-1}r = \frac{1}{\beta_k} \left(- \sum_{i=k+1}^{p-1} \beta_i A^{i-k-1} r + A^{p-k-1} r \right).$$

Ceci montre que $A^{-1}r \in K_{p-k} \subseteq K_p$. □

L'indice s de saturation des sous-espaces de Krylov $K_p(A, r)$ dépend du vecteur r. Par exemple, une conséquence immédiate de la proposition 8.1 est que l'on a $s = 1$ si, et seulement si, r est un vecteur propre de A. La proposition suivante donne une borne supérieure pour $s(A, r)$ ne dépendant que de la matrice A. Nous aurons besoin de la notion suivante (voir [383 ; 1973] par exemple).

On dit que le polynôme

$$p(\xi) = a_0 + a_1\xi + \cdots + a_d\xi^d,$$

de degré d en ξ et à coefficients dans $\mathbb{R}$ *annihile* la matrice A si

$$p(A) \equiv a_0 + a_1A + \cdots + a_dA^d$$

est la matrice nulle. On dit que p est un *polynôme minimal annihilant* A si $p \neq 0$ et s'il n'y a pas de polynôme non nul annihilant A de degré strictement inférieur à celui de p. On dit enfin qu'un polynôme est *unitaire* si le coefficient du terme de degré le plus élevé vaut 1.

On sait qu'il existe un unique polynôme minimal unitaire annihilant A. Il s'écrit

$$\check{p}(\xi) = \prod_{i=1}^{t} (\xi - \lambda_i)^{\beta_i},$$

où $\lambda_1, \ldots, \lambda_t$ sont toutes les valeurs propres distinctes de A et $1 \leqslant \beta_i \leqslant \alpha_i$, α_i étant la multiplicité algébrique de λ_i (sa multiplicité comme racine du polynôme caractéristique de A). La valeur des β_i peut être obtenue en calculant la forme normale de Jordan de A (voir plus loin).

Proposition 8.2 *Si A est inversible, alors pour tout $r \in \mathbb{R}^n$*

$$s(A, r) \leqslant \beta,$$

où β est de degré du polynôme minimal unitaire annihilant A. Cette majoration est optimale : on peut trouver un vecteur r pour lequel on a $s(A, r) = \beta$.

Démonstration. Le polynôme minimal unitaire annihilant A s'écrit

$$\check{p}(\xi) = \prod_{i=1}^{t} (\xi - \lambda_i)^{\beta_i} = a_0 + a_1\xi + \cdots + a_\beta\xi^\beta,$$

où $\beta = \sum_{i=1}^{t} \beta_i$ et $a_\beta = 1$. Le coefficient $a_0 = \prod_{i=1}^{t} (-\lambda_i)^{\beta_i}$ est non nul car, étant inversible, A n'a pas de valeur propre nulle. Comme $\check{p}$ annihile A, on a

$$a_0 + a_1A + \cdots + a_\beta A^\beta = 0.$$

En appliquant A^{-1}, on a quel que soit $r \in \mathbb{R}^n$:

$$A^{-1}r \in \text{vect}\{r, Ar, \ldots, A^{\beta-1}r\} = K_\beta(A, r).$$

D'après la proposition 8.1, cela implique que $s(A, r) \leqslant \beta$.

Enfin, tout polynôme $\tilde{p}$ de degré $\beta - 1$ dont le terme de degré zéro est non nul n'annihile pas A. Il existe donc un vecteur $r \in \mathbb{R}^n$ tel que $\tilde{p}(A)r \neq 0$. Ceci implique que $A^{-1}r \notin K_{\beta-1}$ et par conséquent l'indice de saturation $s(A, r) = \beta$. □

Comme le polynôme caractéristique de A annihile A (théorème de Cayley-Hamilton) et est de degré n, on a nécessairement

$$s \leqslant n,$$

ce que l'on savait déjà. Dans le cas général, le degré

$$\beta = \sum_{i=1}^{t} \beta_i \tag{8.4}$$

du polynôme minimal annihilant A peut être calculé à partir de la forme normale de Jordan de A : il existe une matrice inversible V telle que

$$V^{-1}AV = \text{diag}(J_1^1, \ldots, J_1^{\gamma_1}, J_2^1, \ldots, J_2^{\gamma_2}, \ldots, J_t^1, \ldots, J_t^{\gamma_t}),$$

où chaque J_i^j est un bloc de Jordan de valeur propre λ_i, c'est-à-dire ayant la forme suivante (les éléments en dehors des deux diagonales indiquées sont nuls) :

$$J_i^j = \begin{pmatrix} \lambda_i & 1 & & \\ & \lambda_i & \ddots & \\ & & \ddots & 1 \\ & & & \lambda_i \end{pmatrix}.$$

La forme normale de Jordan est unique à une permutation des blocs près. Alors, β_i est l'ordre le plus élevé des blocs de Jordan de valeur propre λ_i :

$$\beta_i = \max_{i \leqslant j \leqslant \gamma_i} \text{ordre}(J_i^j).$$

On en déduit le corollaire suivant :

Corollaire 8.3 *Si A est inversible et non défective, alors pour tout $r \in \mathbb{R}^n$, $s(A, r) \leqslant t$, où t est le nombre de valeurs propres distinctes de A.*

Démonstration. En effet, A est non défective si (par définition) elle est diagonalisable par similitude : il existe une matrice V d'ordre n, inversible telle que

$$V^{-1}AV = \Lambda,$$

où Λ est diagonale. Dans ce cas, les blocs de Jordan sont des matrices d'ordre 1 et $\beta_i = 1$, $\forall i$. On en déduit le résultat en utilisant (8.4) et le théorème. □

Exemples 8.4 La matrice

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

est diagonale et a deux valeurs propres distinctes. Donc $s(A_1, r) \leqslant 2$, $\forall r \in \mathbb{R}^3$.

La matrice

$$A_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

est défective et sous forme normale de Jordan. A la valeur propre 1 correspond un bloc de Jordan d'ordre 2. Donc $s(A_2, r) \leqslant 3$, $\forall r \in \mathbb{R}^3$. En prenant le vecteur

$$r_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

on peut voir que $s(A_2, r_2) = 3$. □

Les deux algorithmes itératifs de résolution du système linéaire (8.1) que nous décrivons dans ce chapitre, l'algorithme du gradient conjugué (section 8.2) et l'algorithme GMRES (section 8.3), sont des méthodes de Krylov, ce qui veut dire que l'itété x_k appartient à un certain sous-espace de Krylov $K_k(A, r)$. Dans les deux cas, le vecteur r est le résidu $r_1 = b - Ax_1$ évalué en l'itéré initial x_1. La raison pour laquelle ce choix de r convient est expliqué au début de la section 8.3.1. L'algorithme du gradient conjugué est adapté aux systèmes linéaires dans lesquels la matrice A est symétrique définie positive (ou semi-définie positive), alors que l'algorithme GMRES est plus général (et plus difficile à mettre en œuvre) puisqu'il s'affranchit de toute hypothèse sur A.

8.2 Algorithme du gradient conjugué

Dans cette section, on considère le cas où A est symétrique définie positive. On rappelle que résoudre le système linéaire (8.1) revient alors à minimiser la fonction

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

sur $\mathbb{R}^n$.

L'*algorithme du gradient conjugué* est une méthode à direction de descente sur f. Les itérés sont donc générés par

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

où d_k est une direction de descente de f (elle vérifie $\nabla f(x_k)^\mathsf{T} d_k < 0$) et α_k est un pas positif. On notera

$$E_k = \text{vect}\{d_1, d_2, \ldots, d_k\}$$

($k \geqslant 1$) le sous-espace vectoriel engendré par les k premières directions de descente.

8.2.1 Notion de directions conjuguées

Pour une matrice A symétrique définie positive donnée, la notion de conjugaison équivaut à la notion d'orthogonalité pour le produit scalaire associé à A. De façon plus précise, on a les définitions suivantes.

On dit que u et $v \in \mathbb{R}^n$ sont *conjuguées* si $u^\mathsf{T} A v = 0$. Plus généralement, on dit que $u_1, \dots u_p \in \mathbb{R}^n$ sont conjuguées si $u_i^\mathsf{T} A u_j = 0$, $\forall i \neq j$. Enfin, on dit que u est conjuguée par rapport à un sous-espace vectoriel $E \subseteq \mathbb{R}^n$ si $u^\mathsf{T} A v = 0$, $\forall v \in E$.

Si $v_1, \dots, v_p$ sont des vecteurs linéairement indépendants dans $\mathbb{R}^n$, on pourra leur associer p directions conjuguées $u_1, \dots, u_p$ en utilisant le procédé du Gram-Schmidt (section B.1.1) avec le produit scalaire $\langle u, v \rangle = u^\mathsf{T} A v$, dans lequel on se passe des étapes de normalisation superflues (étapes 1 et 2.3). Il suffit de prendre, pour $k = 1, \dots, p$,

$$u_k = v_k - \sum_{i=1}^{k-1} \beta_{ki} u_i \tag{8.5}$$

avec

$$\beta_{ki} = \frac{v_k^\mathsf{T} A u_i}{u_i^\mathsf{T} A u_i}. \tag{8.6}$$

8.2.2 Algorithme des directions conjuguées

Une méthode de directions conjuguées pour la minimisation d'une fonction quadratique f est une méthode qui à chaque itération prend $x_k \in x_1 + E_k$ de façon à minimiser f sur le sous-espace affine $x_1 + E_k$. Le lien avec la conjugaison des directions est donné par la proposition suivante.

On note

$$g_k = \nabla f(x_k) = A x_k - b$$

le gradient de f en x_k pour le produit scalaire euclidien et

$$y_k = g_{k+1} - g_k.$$

Proposition 8.5 *Si x_k réalise le minimum de f sur $x_1 + E_{k-1}$ ($k \geqslant 2$), $d_k \neq 0$ et $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$, alors x_{k+1} réalise le minimum de f sur $x_1 + E_k$ si, et seulement si, l'une des conditions suivantes est réalisée*
(i) $g_k^\mathsf{T} d_k = 0$ et $\alpha_k = 0$,
(ii) $g_k^\mathsf{T} d_k \neq 0$, d_k est conjuguée par rapport à $d_1, \dots, d_{k-1}$ et

$$\alpha_k = -\frac{g_k^\mathsf{T} d_k}{d_k^\mathsf{T} A d_k}. \tag{8.7}$$

Démonstration. Si x_k réalise le minimum de f sur $x_1 + E_{k-1}$, g_k est orthogonal à E_{k-1}, c'est-à-dire :

$$g_k^\mathsf{T} d_i = 0, \quad \text{pour } i = 1, \dots, k-1. \tag{8.8}$$

D'autre part, f étant quadratique, on a

$$g_{k+1} = g_k + A(x_{k+1} - x_k) = g_k + \alpha_k A d_k. \tag{8.9}$$

Alors, comme en (8.8), x_{k+1} réalise le minimum de f sur $x_1 + E_k$ si, et seulement si,

$$g_{k+1}^{\mathsf{T}} d_i = 0, \quad \text{pour } i = 1, \dots, k.$$

D'après (8.9), ceci est équivalent à

$$g_k^{\mathsf{T}} d_i + \alpha_k d_k^{\mathsf{T}} A d_i = 0, \quad \text{pour } i = 1, \dots, k.$$

En prenant $i = k$, on trouve soit que $g_k^{\mathsf{T}} d_k = 0$ et alors $\alpha_k = 0$ ($d_k \neq 0$), soit que $g_k^{\mathsf{T}} d_k \neq 0$ et α_k est donné par (8.7). En prenant $1 \leqslant i \leqslant k-1$ et en tenant compte de (8.8), on trouve dans le cas (ii) que d_k est conjuguée par rapport à $d_1, \dots, d_{k-1}$. Inversement, on voit que les conditions (i) ou (ii) sont suffisantes. □

Le pas α_k donné en (8.7) est optimal dans le sens où il réalise le minimum de l'application

$$\alpha \to f(x_k + \alpha d_k).$$

D'après la proposition 8.5, si l'on veut minimiser f sur les sous-espaces affines successifs $x_1 + E_1$, $x_1 + E_2$..., il suffit de se donner n directions conjuguées $d_1, \dots, d_n$ et de minimiser f le long des droites $\alpha \to x_k + \alpha d_k$. Ces directions conjuguées peuvent s'obtenir à partir de la donnée de n directions linéairement indépendantes $\tilde{d}_1, \dots, \tilde{d}_n$ que l'on utilisera pour construire des directions conjuguées au moyen du procédé de Gram-Schmidt (8.5)–(8.6), où v_i devient $\tilde{d}_i$ et u_i devient d_i. On obtient alors l'algorithme suivant :

Algorithme 8.6 (des directions conjuguées) Une itération passe de l'itéré courant $x_k \in \mathbb{R}^n$ à l'itéré suivant $x_{k+1} \in \mathbb{R}^n$ par les étapes suivantes :

1. *Calcul de la direction* : on choisit une direction arbitraire $\tilde{d}_k \notin \text{vect}\{\tilde{d}_1, \dots, \tilde{d}_{k-1}\}$ et on calcule la direction d_k par la formule

$$d_k = \begin{cases} \tilde{d}_1 & \text{si} \quad k = 1, \\ \tilde{d}_k - \displaystyle\sum_{i=1}^{k-1} \frac{\tilde{d}_k^{\mathsf{T}} A d_i}{d_i^{\mathsf{T}} A d_i} d_i & \text{si} \quad k \geqslant 2. \end{cases} \tag{8.10}$$

2. *Calcul du pas optimal* :

$$\alpha_k = -\frac{g_k^{\mathsf{T}} d_k}{d_k^{\mathsf{T}} A d_k}.$$

3. *Nouveau point* : $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$.

Cet algorithme ne demande pas la connaissance explicite de la matrice A. Il suffit de pouvoir calculer le produit de cette matrice par un vecteur arbitraire. Ce produit matrice-vecteur intervient à deux reprises dans l'algorithme ci-dessus : dans le calcul du gradient et dans la détermination du pas optimal. Si cette opération est coûteuse en temps de calcul, on peut n'en faire qu'une à chaque itération, pour calculer Ad_k, et en mettant à jour le gradient par la formule $g_{k+1} = g_k + \alpha_k A d_k$.

La méthode des directions conjuguées peut être améliorée en ce qui concerne l'encombrement mémoire, mais nous allons voir qu'un choix judicieux des directions $\tilde{d}_1$, $\ldots$, $\tilde{d}_n$ conduit à une amélioration beaucoup plus importante encore.

8.2.3 Algorithme du gradient conjugué

La méthode du gradient conjugué est le cas particulier de la méthode précédente ou l'on prend

$$\tilde{d}_k = -g_k. \tag{8.11}$$

Comme on va le voir, ce choix conduit à une simplification considérable de l'algorithme des directions conjuguées.

Proposition 8.7 *Dans la méthode du gradient conjugué, le sous-espace vectoriel E_k engendré par les directions d_1, $\ldots$, d_k est aussi le sous-espace vectoriel engendré par les gradients successifs :*

$$E_k = \mathrm{vect}\{g_1, \ldots, g_k\} \tag{8.12}$$

et ceux-ci sont orthogonaux entre eux :

$$g_k^{\mathsf{T}} g_i = 0, \quad 1 \leqslant i \leqslant k-1. \tag{8.13}$$

Démonstration. En effet, grâce au choix (8.11), les directions d_1, $\ldots$, d_{k-1} sont à présent obtenues en orthogonalisant $-g_1, \ldots, -g_{k-1}$ (pour le produit scalaire associé à A). La relation (8.12) est alors une conséquence du procédé de Gram-Schmidt.

Ensuite, comme x_k réalise un minimum de f sur $x_1 + E_{k-1}$, g_k est orthogonal à E_{k-1}. Par (8.12), on en déduit (8.13). □

D'après la relation d'orthogonalité des gradients (8.13), on a

$$g_k^{\mathsf{T}} y_i = g_k^{\mathsf{T}}(g_{i+1} - g_i) = 0, \quad \text{pour } 1 \leqslant i \leqslant k-2.$$

Alors, en utilisant (8.9), l'expression du coefficient de d_i dans (8.10) devient

$$\frac{\tilde{d}_k^{\mathsf{T}} y_i}{d_i^{\mathsf{T}} y_i}.$$

Compte tenu de la relation d'orthogonalité des gradients, on voit que seul le dernier terme de la somme dans (8.10) est non nul et que l'opposé de son coefficient s'écrit

$$\beta_k = \frac{\|g_k\|^2}{\|g_{k-1}\|^2}. \tag{8.14}$$

On a utilisé le fait que, d'après (8.13), $-g_k^\mathsf{T} y_{k-1} = \|g_k\|^2$ et $d_{k-1}^\mathsf{T} y_{k-1} = -d_{k-1}^\mathsf{T} g_{k-1} = \|g_{k-1}\|^2$. Ceci conduit à l'algorithme du gradient conjugué pour les fonctions quadratiques.

Algorithme 8.8 (du gradient conjugué) Une itération met à jour l'itéré courant $x_k \in \mathbb{R}^n$, le gradient courant g_k et le carré de la norme de ce dernier $\gamma_k := \|g_k\|_2^2$, par les étapes suivantes.

1. *Test d'arrêt* : si $\gamma_k \simeq 0$, on s'arrête.
2. *Paramètre de conjugaison* : si $k \geqslant 2$, $\beta_k := \gamma_k/\gamma_{k-1}$.
3. *Déplacement en x* :

$$d_k = \begin{cases} -g_1 & \text{si } k = 1 \\ -g_k + \beta_k d_{k-1} & \text{si } k \geqslant 2. \end{cases}$$

4. *Déplacement en g* : $p_k = Ad_k$.
5. *Calcul du pas* : $\alpha_k = \gamma_k/(d_k^\mathsf{T} p_k)$.
6. *Nouveau point* : $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$.
7. *Nouveau gradient* : $g_{k+1} = g_k + \alpha_k p_k$ et $\gamma_{k+1} = \|g_{k+1}\|_2^2$.

8.2.4 Propriétés de l'algorithme du gradient conjugué

Terminaison finie

Notons que tant que $g_k \neq 0$, les directions $g_1, \ldots, g_k$ sont linéairement indépendantes. Cela résulte de la condition d'orthogonalité (8.13). Les directions $d_1, \ldots, d_k$ seront donc conjuguées, et le sous-espace vectoriel E_k sera de dimension k. Par conséquent, *l'algorithme du gradient conjugué trouve la solution en au plus n itérations.* On peut être plus précis.

On peut montrer que le sous-espace vectoriel E_k n'est autre que le sous-espace de Krylov

$$K_k(A, g_1) \equiv \text{vect}\{g_1, Ag_1, \ldots, A^{k-1} g_1\},$$

associé à A et g_1 (exercice 8.1). Ces sous-espaces saturent en $k = s$ lorsque

$$A^{-1} g_1 \in K_s.$$

Comme $A^{-1} g_1 = x_1 - x_*$, la saturation se produit lorsque $x_* \in x_1 + K_s$. Comme la méthode du gradient conjugué minimise f sur $x_1 + E_k = x_1 + K_k$, elle s'arrêtera exactement en $k = s(A, g_1)$. Une matrice symétrique définie positive étant non défective, on a, grâce au corollaire 8.3, $s(A, g_1) \leqslant t$, où t est le nombre de valeurs propres distincts de A. Nous avons donc montré la proposition suivante.

Proposition 8.9 *La méthode du gradient conjugué trouve le minimum d'une fonction quadratique strictement convexe en au plus t itérations, où t est le nombre de valeurs propres distinctes de la hessienne de la fonction.*

Vitesse de convergence

Si n est grand (par exemple $n \geqslant 10^3$), il est trop coûteux d'effectuer n itérations de l'algorithme du gradient conjugué pour obtenir la solution. La qualité de l'approximation x_k obtenue peut être estimée par la vitesse de convergence de l'algorithme. Le résultat suivant [Luenberger (1973), pg. 187] donne une estimation de la décroissance de la norme de l'erreur $x_k - x_*$, en termes du conditionnement ℓ_2 de la matrice A :

$$\kappa_2(A) = \frac{\lambda_{\max}(A)}{\lambda_{\min}(A)}.$$

La norme utilisée est la suivante :

$$\|x\|_A = (x^\mathsf{T} A x)^{1/2}.$$

Proposition 8.10 *Soit κ le conditionnement ℓ_2 de A. La suite $\{x_k\}$ générée par l'algorithme du gradient conjugué vérifie l'estimation*

$$\|x_{k+1} - x_*\|_A \leqslant 2 \left(\frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} \right)^k \|x_1 - x_*\|_A.$$

Il s'agit d'une vitesse de convergence r-linéaire, dont le taux est à comparer avec celui de la méthode du gradient à pas optimal (proposition 7.2), qui forme une suite $\{x_k\}$ vérifiant :

$$\|x_{k+1} - x_*\|_A \leqslant \left(\frac{\kappa - 1}{\kappa + 1} \right) \|x_k - x_*\|_A \leqslant \left(\frac{\kappa - 1}{\kappa + 1} \right)^k \|x_1 - x_*\|_A.$$

La convergence est donc plus rapide avec la méthode du gradient conjugué. La figure 8.1 permet de comparer les taux de convergence des méthodes du Gradient et du gradient conjugué en fonction du conditionnement κ.

Si la matrice symétrique A n'est pas définie positive

Si A a des valeurs propres strictement positives et négatives, le dénominateur apparaissant dans le calcul du pas α_k (étape 3.5) n'est plus nécessairement strictement positif ; il peut être arbitrairement proche de zéro ou même nul, ce qui entraîne l'instabilité ou l'échec de l'algorithme. Ce mauvais comportement de l'algorithme

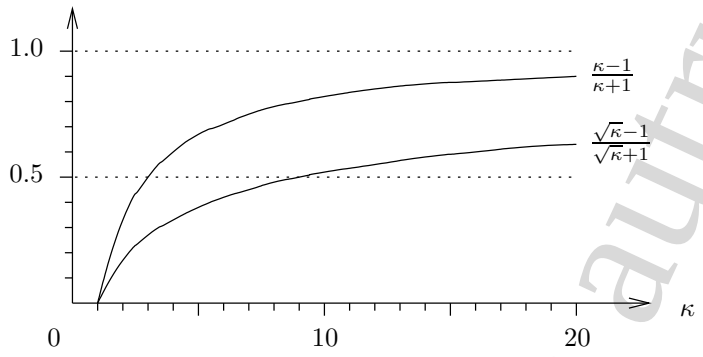


Fig. 8.1. Comparaison des taux de convergence du G et du GC

s'observe en général dès les premières itérations, si bien que l'on ne peut espérer trouver ainsi une solution approchée du système linéaire. Évidemment, si toutes les valeurs propres de A sont strictement négatives, on pourra résoudre par gradient conjugué le système linéaire $(-A)x = -b$, équivalent à (8.1), puisque sa matrice $-A$ est définie positive. En conclusion, *l'algorithme du gradient conjugué ne convient pas pour résoudre des systèmes linéaires dont la matrice est indéfinie, même de manière approchée.*

Le comportement de l'algorithme du GC lorsque $A \succcurlyeq 0$ est plus satisfaisant. Il est décrit dans la proposition suivante. L'algorithme est dit bien défini à l'itération k si $d_k^{\mathsf{T}} A d_k > 0$, si bien que le pas α_k est bien défini à l'étape 3.5 et que l'on peut passer de x_k à x_{k+1}. Enfin, lorsque $b \in \mathcal{R}(A)$, la *solution de norme minimale* de $Ax = b$ est l'unique solution du problème

$$\begin{cases} \min \ \frac{1}{2}\|x\|_2^2 \\ Ax = b, \end{cases}$$

qui est donc la projection de 0 sur le sous-espace affine $\{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b\}$. Comme A est symétrique, les conditions d'optimalité de ce problème, qui sont ici nécessaires et suffisantes car le problème est convexe, montrent que c'est l'unique point x vérifiant $Ax = b$ et $x \in \mathcal{R}(A)$.

Proposition 8.11 (GC lorsque $A \succcurlyeq 0$) *On considère l'algorithme du gradient conjugué pour résoudre le système linéaire (8.1) ou minimiser la fonction quadratique f définie en (8.2), avec A symétrique semi-définie positive de rang r.*

1) *Si $b \notin \mathcal{R}(A)$, l'algorithme est bien défini pendant au plus r itérations, disons jusqu'en x_l, où la direction d_l générée est non nulle, dans le noyau de A et telle que $f(x_l + \alpha d_l) = f(x_l) - \alpha\, b^{\mathsf{T}} d_l \to -\infty$ lorsque $\alpha \to +\infty$.*
2) *Si $b \in \mathcal{R}(A)$, l'algorithme est bien défini et converge en au plus r itérations ; de plus, si l'itéré initial est pris dans $\mathcal{R}(A)$ (par exemple $x_1 = 0$), les itérés convergent vers la solution de norme minimale de (8.1).*

DÉMONSTRATION. 1) Si A est semi-définie positive et $b \notin \mathcal{R}(A)$, le système linéaire (8.1) n'a pas de solution. L'algorithme du GC peut itérer tant que le dénominateur $d_k^\mathsf{T} A d_k$ de la fraction donnant le pas α_k à l'étape 3.5 reste strictement positif (avec une instabilité possible si ce dénominateur s'approche de zéro). Alors l'itéré suivant x_{k+1} minimise toujours f sur l'espace de Krylov $K_k(A, g_1)$. Observons que K_k est de dimension k et que $K_k \cap \mathcal{N}(A) = \{0\}$, si bien que cette situation ne peut se poursuivre au-delà de $\dim K_k \leqslant n - \dim \mathcal{N}(A) = \dim \mathcal{R}(A) = r$ itérations : l'algorithme finit par trouver une direction $d_l \in \mathcal{N}(A)$ et doit s'arrêter. Comme $g_l \perp K_{l-1} \ni d_{l-1}$, $g_l^\mathsf{T} d_l = -\|g_l\|_2^2 < 0$ ($g_l \neq 0$ car $b \notin \mathcal{R}(A)$), d_l est une direction de descente (non nulle) de f en x_l. On en déduit que $f(x_l + \alpha d_l) = f(x_l) - \alpha\, b^\mathsf{T} d_l \downarrow -\infty$ lorsque $\alpha \uparrow +\infty$ ($b^\mathsf{T} d_l > 0$ car $0 > g_l^\mathsf{T} d_l = (Ax_l - b)^\mathsf{T} d_l = -b^\mathsf{T} d_l$).

2) Montrons que $x_k \in x_1 + \mathcal{R}(A)$, pour tout $k \geqslant 1$. On obtient ce résultat par récurrence en montrant que toutes les directions de recherche du GC vérifient $d_k \in \mathcal{R}(A)$. C'est clairement vrai pour la première direction qui s'écrit $d_1 = -g_1 = -Ax_1 + b \in \mathcal{R}(A)$, puisque $b \in \mathcal{R}(A)$. Ensuite, pour $k \geqslant 2$, $d_k = -g_k + \beta_k d_{k-1}$ est dans $\mathcal{R}(A)$ par récurrence.

Pour vérifier que le GC est bien défini, il suffit de vérifier que $d_k^\mathsf{T} A d_k$ est strictement positif tant que x_k n'est pas solution de (8.1). Cette propriété résulte du fait que $d_k \in \mathcal{R}(A)$ et que A est définie positive sur $\mathcal{R}(A)$ ($d^\mathsf{T} A d = 0$ et $d \in \mathcal{R}(A)$ impliquent que $d \in \mathcal{N}(A) \cap \mathcal{R}(A) = \{0\}$).

Enfin, comme $\mathcal{R}(A)$ est de dimension r, qu'avant convergence les directions d_k sont linéairement indépendantes et engendrent K_k et que $K_k \subseteq \mathcal{R}(A)$, l'algorithme converge en au plus r itérations.

D'autre part, si x_* est la solution trouvée par l'algorithme, on a de ce qui précède $x_* - x_1 \in \mathcal{R}(A)$. Si $x_1 \in \mathcal{R}(A)$ on en déduit que $x_* \in \mathcal{R}(A)$ et $Ax_* = b$. Dès lors x_* est la solution de norme minimale de (8.1). □

8.2.5 Mise en œuvre de la méthode du gradient conjugué

Encombrement mémoire et comptage des opérations

L'algorithme 8.8 du gradient conjugué est particulièrement économe en place mémoire. C'est l'un de ses principaux attraits. Il ne requiert que le stockage de 4 vecteurs, ceux mémorisant x_k, g_k, d_k et p_k (les trois premiers sont mis à jour à chaque itération en remplaçant le vecteur de l'itération précédente).

Le nombre d'opérations par itération est en $O(10n)$, plus un unique produit matrice-vecteur ($O(2n^2)$ opérations si la matrice est pleine). En arithmétique exacte, nous avons vu que l'algorithme requiert au plus n itérations pour trouver la solution. Il faut donc $O(2n^3)$ opérations pour trouver la solution d'un système linéaire symétrique défini positif plein par l'algorithme du gradient conjugué. On retrouve un nombre d'opérations du même ordre que la factorisation gaussienne.

Le gradient conjugué préconditionné

Dès que le nombre n de variables dépasse quelques dizaines ou centaines (cela dépend du conditionnement de A), l'algorithme du GC peut avoir des difficultés à minimiser la fonction quadratique et, du fait des erreurs d'arrondi, il peut demander

beaucoup plus de n itérations pour avoir une solution acceptable. Pour remédier à cette situation, il faut essayer d'améliorer le conditionnement du problème, c'est-à-dire *préconditionner* le problème ou l'algorithme. Nous présentons ci-après l'approche qui utilise un changement de variables.

Si l'on fait le changement de variables

$$\tilde{x} = Lx, \tag{8.15}$$

au moyen d'une matrice L d'ordre n inversible, la fonction $\tilde{f} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ définie par

$$\tilde{f} = f \circ L^{-1}$$

est telle que $\tilde{f}(\tilde{x}) = f(x)$, si $\tilde{x}$ et x se correspondent par (8.15). Les fonctions f et $\tilde{f}$ atteignent donc la même valeur minimale et ce aux points x_* et $\tilde{x}_* = Lx_*$, respectivement. L'algorithme du GC préconditionné s'obtient en appliquant l'algorithme du GC standard dans l'espace des $\tilde{x}$ et en traduisant l'algorithme résultant dans l'espace des x. L'algorithme est ainsi modifié, amélioré si le changement de variables est bien choisi ; on dit aussi qu'il est sensible à un changement de variables.

Le gradient et la hessienne de $\tilde{f}$ en $\tilde{x} = Lx$ s'écrivent

$$\tilde{g} \equiv \nabla \tilde{f}(\tilde{x}) = L^{-\mathsf{T}} \nabla f(x) \qquad \text{et} \qquad \tilde{A} \equiv \nabla^2 \tilde{f} = L^{-\mathsf{T}} A L^{-1}.$$

Soient $\{\tilde{x}_k\}$ la suite générée par le GC dans l'espace des $\tilde{x}$ et $x_k := L^{-1}\tilde{x}_k$. On note $\tilde{g}_k := \nabla \tilde{f}(\tilde{x}_k)$ et $g_k = \nabla f(x_k)$, si bien que $\tilde{g}_k = L^{-\mathsf{T}} g_k$. La direction de la méthode du gradient conjugué dans l'espace des $\tilde{x}$ s'écrit

$$\tilde{d}_k = -\tilde{g}_k + \tilde{\beta}_k \tilde{d}_{k-1} = -L^{-\mathsf{T}} g_k + \frac{\|L^{-\mathsf{T}} g_k\|^2}{\|L^{-\mathsf{T}} g_{k-1}\|^2} \tilde{d}_{k-1}.$$

Ramenée à l'espace des x, cela donne pour $d_k = L^{-1}\tilde{d}_k$ la formule

$$d_k = \begin{cases} -P g_1 & \text{si} \quad k = 1, \\ -P g_k + \dfrac{g_k^{\mathsf{T}} P g_k}{g_{k-1}^{\mathsf{T}} P g_{k-1}} d_{k-1} & \text{si} \quad k \geqslant 2, \end{cases} \tag{8.16}$$

où

$$P := L^{-1} L^{-\mathsf{T}}.$$

On montre que g_k est encore orthogonal à d_{k-1} (voir l'exercice 8.3), si bien que le pas optimal le long de d_k est donné par la formule

$$\alpha_k = \frac{g_k^{\mathsf{T}} P g_k}{d_k^{\mathsf{T}} A d_k}. \tag{8.17}$$

Si l'on remplace la direction d_k et le pas α_k de la méthode du gradient conjugué par les valeurs données par les formules (8.16) et (8.17), on obtient la *méthode du gradient conjugué préconditionné.*

Algorithme 8.12 (du gradient conjugué préconditionné) Étant donnée une matrice de préconditionnement P, une itération met à jour l'itéré courant $x_k \in \mathbb{R}^n$, le gradient courant g_k et la norme préconditionnée au carré de ce dernier $\gamma_k := g_k^\mathsf{T} P g_k$, par les étapes suivantes.

1. *Test d'arrêt* : si $\gamma_k \simeq 0$, on s'arrête.
2. *Paramètre de conjugaison* : si $k \geqslant 2$, $\beta_k := \gamma_k / \gamma_{k-1}$.
3. *Déplacement en x* :

$$d_k = \begin{cases} -P g_1 & \text{si } k = 1 \\ -P g_k + \beta_k d_{k-1} & \text{si } k \geqslant 2. \end{cases}$$

4. *Déplacement en g* : $p_k = A d_k$.
5. *Calcul du pas* : $\alpha_k = \gamma_k / (d_k^\mathsf{T} p_k)$.
6. *Nouveau point* : $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$.
7. *Nouveau gradient* : $g_{k+1} = g_k + \alpha_k p_k$ et $\gamma_{k+1} = g_{k+1}^\mathsf{T} P g_{k+1}$.

Le choix de L, donc de P, est gouverné par le souhait d'avoir $\tilde{A}$ proche de la matrice identité, ce qui a pour effet d'accélérer la convergence de l'algorithme dans l'espace des $\tilde{x}$ (proposition 8.10), donc aussi dans l'espace des x. On voit qu'il est souhaitable de prendre L proche de $A^{1/2}$, ou encore

$$P \simeq A^{-1}.$$

Préconditionneur diagonal

Le *préconditionneur diagonal*, qui consiste à prendre pour P une matrice diagonale, est sans doute le plus simple. On peut par exemple prendre $L = \mathrm{Diag}(A_{ii}^{1/2})$ en (8.15) (on se rappelle que les $A_{ii} > 0$) et donc

$$P = \mathrm{Diag}(A_{11}, \dots, A_{nn})^{-1}. \tag{8.18}$$

Ce dernier préconditionneur diagonal a une propriété de minimalité, dans le sens où il minimise, à un facteur n près, le conditionnement de DAD parmi toutes les matrices diagonales D. En effet, selon van der Sluis [525 ; théorème 4.1], on a

$$\kappa_2(P^{1/2} A P^{1/2}) \leqslant n \left(\min_{\substack{D \text{ diagonale} \\ D \succ 0}} \kappa_2(DAD) \right).$$

S'il a le mérite de la simplicité, sauf cas exceptionnels (celui d'une matrice A diagonale est un cas particulier évident), ce préconditionneur élémentaire n'apporte pas toujours une amélioration notable de la vitesse de convergence de l'algorithme du gradient conjugué. Il ne doit toutefois pas être négligé, si aucun autre préconditionneur ne s'impose.

Si les éléments diagonaux A_{ii}, pour $i \in I$, sont nuls, la formule (8.18) n'est plus bien définie. Cependant, la semi-définie positivité de A implique alors que les colonnes (et les lignes) de A avec indice dans I sont nulles, si bien que les vecteurs de base $\{e^i\}_{i\in I}$ sont dans le noyau de A. Si $b_I = 0$, les itérés de l'algorithme du gradient conjugué sont générés dans $x_1 + \mathrm{vect}\{e^i : i \in I\}^\perp$ et on peut prendre le préconditionneur diagonal P avec $P_{ii} = 0$ si $i \in I$ et $P_{ii} = A_{ii}^{-1}$ sinon. S'il existe un indice $i \in I$ tel que $b_i \neq 0$, la direction $d = \mathrm{sgn}(b_i)e^i$ est une *direction de non bornitude* de la forme quadratique associée $x \mapsto f(x) = \frac{1}{2}x^\mathsf{T}Ax - b^\mathsf{T}x$, dans le sens où, quel que soit $x \in \mathbb{R}^n$, $f(x + td) \to -\infty$ lorsque $t \to \infty$; l'équation $Ax = b$ n'a pas de solution.

Préconditionneur projecteur

Supposons à présent que le préconditionneur symétrique $P \succcurlyeq 0$ soit un projecteur ($P^2 = P$) non trivial ($P \neq I$, donc avec des valeurs propres nulles). L'algorithme du GC préconditionné par P, utilisant les directions (8.16) et les pas (8.17), est encore bien défini et génère une suite dans $x_1 + \mathcal{R}(P)$ (voir l'exercice 8.3). Il porte le nom d'*algorithme du gradient conjugué projeté* pour minimiser le critère quadratique sur le sous-espace affine $x_1 + \mathcal{R}(P)$.

Redémarrage du gradient conjugué

La méthode du gradient conjugué est une méthode dans laquelle les erreurs d'arrondi sont amplifiées au cours des itérations. Peu à peu les relations de conjugaison de d_k avec les premières directions sont perdues parce qu'en présence d'erreurs d'arrondi les relations (8.13) d'orthogonalité des gradients ne sont pas vérifiées exactement.

Notons que les erreurs d'arrondi sont mieux contrôlées si l'on remplace la formule (8.14) de β_k, dite de *Fletcher-Reeves* (1964), par la formule équivalente, dite de *Polak-Ribière* (1969) :

$$\beta_k = \frac{g_k^\mathsf{T} y_{k-1}}{\|g_{k-1}\|^2}.$$

On peut détecter la présence d'erreurs d'arrondi en regardant si

$$|g_k^\mathsf{T} g_{k-1}| \geqslant \nu \|g_k\|^2,$$

où $\nu \simeq 0.2$ (normalement le membre de gauche doit être nul). Ce critère est connu sous le nom de *critère de redémarrage de Powell* (1977). S'il est vérifié pour $k = r$, certains numériciens préconisent de redémarrer l'algorithme du gradient conjugué en x_r dans la direction $-g_r$. Cette pratique n'est plus guère utilisée.

8.2.6 Méthode du gradient conjugué non linéaire

On s'intéresse ici à la minimisation d'une fonction $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, non nécessairement quadratique :

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} f(x),$$

et on cherche à étendre la méthode du gradient conjugué à ce problème. Il y a plusieurs manières de le faire et peu de critères permettant de dire laquelle est la meilleure. Une

extension possible consiste simplement à reprendre les formules utilisées dans le cas quadratique. On se propose donc d'étudier les méthodes où la direction d_k est définie par la formule de récurrence suivante ($\beta_k \in \mathbb{R}$)

$$d_k = \begin{cases} -g_1 & \text{si} \quad k = 1, \\ -g_k + \beta_k d_{k-1} & \text{si} \quad k \geqslant 2, \end{cases} \tag{8.19}$$

et où $\{x_k\}$ est générée par la formule

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k, \tag{8.20}$$

le pas $\alpha_k \in \mathbb{R}$ étant déterminé par une recherche linéaire.

Ces méthodes sont des extensions de la méthode du gradient conjugué si β_k prend l'une des valeurs

$$\begin{aligned} \beta_k^{\mathrm{FR}} &= \frac{\|g_k\|^2}{\|g_{k-1}\|^2}, \\ \beta_k^{\mathrm{PR}} &= \frac{g_k^{\mathsf{T}} y_{k-1}}{\|g_{k-1}\|^2}, \end{aligned}$$

où $y_{k-1} = g_k - g_{k-1}$. Dans le cas quadratique avec recherche linéaire exacte, on a vu que $\beta_k^{\mathrm{FR}} = \beta_k^{\mathrm{PR}}$. Si f est quelconque, il n'en est plus de même et on parle respectivement de *méthode de Fletcher-Reeves* (1964) ou de *méthode de Polak-Ribière* (1969) selon que l'on utilise β_k^{FR} ou β_k^{PR} à la place de β_k dans (8.19).

Pour que les méthodes ainsi définies soient utilisables, il faut répondre aux deux questions suivantes. Les directions d_k définies par (8.19) sont-elles des directions de descente de f ? Les méthodes ainsi définies sont-elles convergentes ?

En ce qui concerne la première question remarquons que, quel que soit $\beta_k \in \mathbb{R}$, d_k est une direction de descente si l'on fait de la recherche linéaire exacte, c'est-à-dire si le pas α_{k-1} est un point stationnaire de $\alpha \to f(x_{k-1} + \alpha d_{k-1})$. En effet, dans ce cas $g_k^{\mathsf{T}} d_{k-1} = 0$ et on trouve lorsque $g_k \neq 0$:

$$g_k^{\mathsf{T}} d_k = -\|g_k\|^2 < 0.$$

Cependant, il est fortement déconseillé de faire de la recherche linéaire exacte lorsque f n'est pas quadratique : le coût de détermination de α_k est excessif.

Le résultat suivant, que l'on peut trouver dans [227 ; 1992], généralise un résultat de Al-Baali (1985). Il montre que si β_k n'est pas trop grand et si l'on utilise la règle de *recherche linéaire de Wolfe forte* :

$$f(x_{k+1}) \leqslant f(x_k) + \omega_1 \alpha_k g_k^{\mathsf{T}} d_k, \tag{8.21}$$

$$|g_{k+1}^{\mathsf{T}} d_k| \leqslant \omega_2 |g_k^{\mathsf{T}} d_k|, \tag{8.22}$$

avec des constantes positives ω_1 et ω_2 bien choisies, alors d_k est une direction de descente et la méthode converge.

Proposition 8.13 *Supposons que l'ensemble* $\mathcal{L} := \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leqslant f(x_1)\}$ *soit borné et que* f *soit continûment différentiable dans un voisinage de* $\mathcal{L}$ *avec un gradient lipschitzien. Toute méthode du type* (8.19)–(8.20) *dans laquelle* β_k *vérifie*

$$|\beta_k| \leqslant \beta_k^{FR}, \quad \forall k \geqslant 1,$$

et le pas α_k *est déterminé par la règle de Wolfe forte* (8.21)–(8.22) *avec* $0 < \omega_1 < \omega_2 < 1/2$ *est une méthode de descente* ($g_k^\mathsf{T} d_k < 0$, $\forall k \geqslant 1$) *convergente, dans le sens où*

$$\liminf_{k\to\infty} \|g_k\| = 0.$$

D'un point de vue théorique, ce résultat est satisfaisant et suggère que la méthode de Fletcher-Reeves est une bonne méthode. Cependant, en pratique, il est préférable d'utiliser la méthode de Polak-Ribière dont les performances moyennes dépassent de loin celles de la méthode de Fletcher-Reeves. Le résultat suivant est dû à Polak et Ribière (1964).

Proposition 8.14 *Si* f *est fortement convexe, de classe* C^1 *avec un gradient lipschitzien, alors la méthode de Polak-Ribière avec recherche linéaire exacte génère une suite* $\{x_k\}$ *convergeant vers l'unique point* x_* *réalisant le minimum de* f.

Démonstration. Montrons dans un premier temps que

$$\cos\theta_k = \frac{-g_k^\mathsf{T} d_k}{\|g_k\|\,\|d_k\|}$$

est uniformément positif. Grâce à la recherche linéaire exacte, on a

$$y_{k-1}^\mathsf{T} d_{k-1} = -g_{k-1}^\mathsf{T} d_{k-1} = \|g_{k-1}\|^2.$$

La forte convexité de f implique que

$$y_{k-1}^\mathsf{T} d_{k-1} = \frac{1}{\alpha_{k-1}} y_{k-1}^\mathsf{T}(x_k - x_{k-1}) \geqslant \frac{\gamma}{\alpha_{k-1}}\|x_k - x_{k-1}\|^2,$$

où $\gamma > 0$ est le module de forte convexité de f. On en déduit, en utilisant la constante de lipschitz L de f' :

$$|\beta_k^{\mathrm{PR}}| = \frac{|g_k^\mathsf{T} y_{k-1}|}{\|g_{k-1}\|^2} = \frac{|g_k^\mathsf{T} y_{k-1}|}{y_{k-1}^\mathsf{T} d_{k-1}} \leqslant \frac{\alpha_{k-1} L}{\gamma}\frac{\|g_k\|\|x_k - x_{k-1}\|}{\|x_k - x_{k-1}\|^2} = \frac{L}{\gamma}\frac{\|g_k\|}{\|d_{k-1}\|}.$$

On peut alors borner $\|d_k\|$ par

$$\|d_k\| \leqslant \|g_k\| + |\beta_k^{\mathrm{PR}}|\,\|d_{k-1}\| \leqslant \left(1 + \frac{L}{\gamma}\right)\|g_k\|.$$

Ensuite

$$g_k^{\mathsf{T}} d_k = -\|g_k\|^2 \leqslant -\left(1 + \frac{L}{\gamma}\right)^{-1} \|g_k\|\|d_k\|,$$

ou encore $\cos\theta_k \geqslant (1 + L/\gamma)^{-1}$.

D'après la proposition 6.10 et la recherche linéaire exacte, la condition de Zoutendijk (6.19) est vérifiée. Mais f et donc $\{f(x_k)\}$ est bornée inférieurement (car f est fortement convexe). On en déduit que $g_k \to 0$ (proposition 6.8). D'autre part, $\{x_k\}$ est bornée (f est fortement convexe) et possède donc des sous-suites convergentes. La limite de celles-ci ne peut être que l'unique minimum x_* de f (car $g_k \to 0$). Donc *toute* la suite $\{x_k\}$ converge vers x_*. □

Si f n'est pas convexe, la méthode de Polak-Ribière peut ne pas converger. Powell (1984) a donné un exemple de fonction pour laquelle l'algorithme génère une suite $\{x_k\}$ dont aucun des points d'adhérence n'est stationnaire. On peut trouver des remèdes simples à ce comportement inattendu [227 ; 1992]. Le plus simple et apparemment le plus efficace est de prendre

$$\beta_k = (\beta_k^{\mathrm{PR}})^+ \equiv \max(\beta_k^{\mathrm{PR}}, 0),$$

ce qui revient à redémarrer l'algorithme chaque fois que $\beta_k^{\mathrm{PR}} < 0$. On peut montrer la convergence globale pour cette valeur de β_k et une recherche linéaire adaptée. Les performances numériques de cette méthode sont très semblables à celles de la méthode de Polak-Ribière.

Comme pour la minimisation de fonctions quadratiques convexes, la méthode du gradient conjugué non linéaire est économe en place mémoire et en temps de calcul propre. Elle s'utilise encore parfois dans les deux situations suivantes : lorsque n est très grand relativement à la place mémoire disponible ou lorsque le coût de calcul de f et de son gradient est très faible (ce qui est plutôt rare dans les problèmes réels) et que l'on ne veut pas perdre de temps avec une méthode plus sophistiquée mais plus gourmande en temps de calcul. Dès que l'espace mémoire disponible est supérieur à, disons $10n$, il est souvent préférable d'utiliser une méthode de quasi-Newton à mémoire limitée, par exemple la méthode l-BFGS (voir la section 10.2.5).

8.3 Algorithme du résidu minimal généralisé (GMRES)

Revenons à la résolution numérique du système linéaire

$$Ax = b, \tag{8.23}$$

lorsque A est inversible mais n'est plus nécessairement symétrique. On note toujours

$$x_* = A^{-1}b$$

la solution unique de (8.23). On appelle *résidu* du système linéaire (8.23) en $x \in \mathbb{R}^n$, le vecteur $r \in \mathbb{R}^n$ défini par

$$r = b - Ax.$$

On note $r_k = b - Ax_k$ le résidu en x_k. Lorsque A est symétrique, le résidu est l'opposé du gradient de $f(x) = \frac{1}{2}x^\mathsf{T}Ax - b^\mathsf{T}x$.

On aimerait, pour les systèmes linéaires non symétriques, disposer d'un algorithme itératif ayant les propriétés attrayantes du gradient conjugué que sont le peu d'encombrement-mémoire (due à une formule de récurrence courte) et une propriété de minimalité sur l'espace de Krylov (qui lui confère de la stabilité). Ceci n'est malheureusement pas possible [536, 182]. Dans l'algorithme GMRES, décrit dans cette section, on ne garde que la propriété de minimalité ; quant à l'encombrement-mémoire, il va croître linéairement avec le nombre d'itérations, si bien que la mise en œuvre de l'algorithme se fait avec redémarrages (section 8.3.6).

L'algorithme GMRES est aujourd'hui l'algorithme itératif standard de résolution des systèmes non symétriques. Il a été proposé par Saad et Schultz [476 ; 1986].

8.3.1 Principe général

Partant d'un point $x_1 \in \mathbb{R}^n$, la *méthode du résidu minimal généralisée* ou *méthode GMRES* (Generalized Minimal RESidual) consiste à générer une suite de points $x_k \in \mathbb{R}^n$ par la formule

$$x_k = x_1 + z_k, \quad k \geqslant 1,$$

où z_k dans le sous-espace de Krylov associé au résidu initial :

$$K_k \equiv K_k(A, r_1) = \text{vect}\{r_1, Ar_1, \ldots, A^{k-1}r_1\}.$$

Cette façon de procéder est motivée par les deux remarques suivantes.

- Si x_1 est une bonne approximation de la solution il y a un sens à approcher x_* par des itérés x_k tels que $x_k - x_1$ appartienne pour k petit à un sous-espace vectoriel de faible dimension (ici un sous-espace de Krylov).
- Si l'on prend z_k dans un sous-espace de Krylov $K_k(A, r)$, pour un certain $r \in \mathbb{R}^n$, et si l'on veut obtenir la solution par cette méthode, il faut que

$$x_* \in x_1 + K_s(A, r), \tag{8.24}$$

où s est l'indice de saturation de ces sous-espaces (voir la section 8.1). Cet indice est caractérisé par le fait que

$$A^{-1}r \in K_s(A, r).$$

On voit qu'en prenant $r = r_1$, cette dernière condition est équivalente à (8.24).

La méthode détermine ensuite x_k dans $x_1 + K_k$, de manière à minimiser le résidu sur $x_1 + K_k$. Il s'agit donc de résoudre à chaque itération

$$\min_{x \in x_1 + K_k} \|b - Ax\|_2, \tag{8.25}$$

où $\|\cdot\|_2$ est la norme ℓ_2 de $\mathbb{R}^n$. Ce problème a une solution unique qui, pour $k = s(A, r_1)$, ne peut être que $x = x_*$ (qui annule le résidu sur $\mathbb{R}^n$). En écrivant $x = x_1 + z$, $z \in K_k$, on a $b - Ax = r_1 - Az$ et le problème (8.25) devient

$$\min_{z \in K_k} \|r_1 - Az\|_2. \tag{8.26}$$

Ceci montre que Az_k est la projection orthogonale de r_1 sur AK_k et donc

$$r_k = r_1 - Az_k \perp Az_k.$$

Le résidu est rendu orthogonal à AK_k.

Remarque 8.15 On peut aussi déterminer x_k dans $x_1 + K_k$ en rendant le résidu r_k orthogonal à K_k. On parle alors de *méthode du résidu orthogonal* ou de *méthode d'Arnoldi*. La méthode du gradient conjugué est de ce type (exercice 8.1). Numériquement les deux méthodes se valent [82]. □

Proposition 8.16 *La méthode GMRES converge en au plus β itérations, où β est le degré du polynôme minimal annihilant A (donc $\beta \leqslant n$). Si A est non défective, β est le nombre de valeurs propres distinctes de A.*

Démonstration. Il suffit de constater que la détermination de x_k par (8.25) donne $x_k = x_*$ dès que $x_* \in x_1 + K_{k-1}$. Ceci aura lieu exactement à la saturation du sous-espace de Krylov K_k, c'est-à-dire pour $k = s(A, r_1)$. Le résultat est alors une conséquence de la proposition 8.2 et de son corollaire. □

Venons-en maintenant au calcul effectif de x_k.

8.3.2 Construction d'une base orthonormale de K_{k+1}

Le problème (8.25) — ou (8.26) — est un problème avec contraintes que l'on peut transformer en problème sans contrainte en se donnant une base de K_k. Tant que $k < s(A, r_1)$, les vecteurs $r_1, Ar_1, \ldots, A^k r_1$ forment une base de K_{k+1}. Cependant, l'utilisation d'une base orthonormale s'avérera utile par la suite.

L'algorithme de Gram-Schmidt permet d'obtenir une base orthonormale de K_{k+1} en « orthonormalisant » les vecteurs $r_1, Ar_1, \ldots, A^k r_1$. Si l'on a déjà une base orthonormale de K_k formée des vecteurs $v_1, \ldots, v_k$, on voit que pour obtenir v_{k+1} il suffit d'orthonormaliser $A^k r_1$ par rapport à $v_1, \ldots, v_k$. On peut aussi orthonormaliser Av_k par rapport à $v_1, \ldots, v_k$ car on verra que, compte tenu de la manière dont les v_i sont calculés, on a

$$A^k r_1 \notin K_k \implies Av_k \in K_{k+1} \setminus K_k, \tag{8.27}$$

Ceci permet d'éviter le stockage de $A^k r_1$ dans un vecteur auxiliaire. La relation (8.27) se montre par récurrence. Mais auparavant, spécifions le calcul des vecteurs de base v_i en adaptant à notre cadre l'algorithme d'orthonormalisation de Gram-Schmidt (section B.1.1). On utilise le produit scalaire euclidien. Si $r_1 = b - Ax_1 = 0$, le point initial x_1 est solution et on s'arrête. Sinon, on prend

$$v_1 = \frac{r_1}{\|r_1\|_2}.$$

Ensuite, pour $k \geqslant 1$, v_{k+1} est calculé comme suit

$$\begin{array}{ll}(i) & h_{i,k} = v_i^{\mathsf{T}} A v_k, \quad \text{pour} \quad i = 1, \ldots, k\,; \\ (ii) & \tilde{v}_{k+1} = A v_k - \sum_{i=1}^{k} h_{i,k} v_i\,; \\ (iii) & h_{k+1,k} = \|\tilde{v}_{k+1}\|_2\,; \\ (iv) & v_{k+1} = \tilde{v}_{k+1}/h_{k+1,k}. \end{array}$$

DÉMONSTRATION. (de (8.27)). L'implication est vraie pour $k = 1$, puisque $Av_1 \parallel Ar_1 \in K_2 \setminus K_1$. Ensuite, si $Av_{k-1} \in K_k \setminus K_{k-1}$ (hypothèse de récurrence), on a

$$Av_{k-1} = \alpha A^{k-1} r_1 + w,$$

avec $\alpha \neq 0$ et $w \in K_{k-1}$. L'étape (ii) de l'algorithme précédent donne

$$\tilde{v}_k = \alpha A^{k-1} r_1 + \tilde{w},$$

avec $\tilde{w} \in K_{k-1}$. Mais $\tilde{v}_k \neq 0$, car $A^{k-1} r_1 \notin K_{k-1}$. D'après l'étape (iv) on trouve alors

$$v_k = \alpha' A^{k-1} r_1 + w',$$

où $\alpha' \neq 0$ et $w' \in K_{k-1}$. Donc $Av_k = \alpha' A^k r_1 + Aw' \in K_{k+1} \setminus K_k$ car $A^k r_1 \in K_{k+1} \setminus K_k$ et $Aw' \in K_k$. □

Remarquons que l'on a

$$Av_k = \sum_{i=1}^{k+1} h_{i,k} v_i.$$

Si l'on note $\bar{H}_k$ la matrice $(k+1) \times k$ dont les éléments h_{ij} sont calculés par l'algorithme précédent et $V_k = (v_1 \ldots v_k)$ la matrice $n \times k$ dont les colonnes sont formées des vecteurs de la base orthonormale de K_k, on a la relation

$$AV_k = V_{k+1} \bar{H}_k. \tag{8.28}$$

Comme

$$(\bar{H}_k)_{ij} = 0, \quad \text{pour} \quad i \geqslant j + 2,$$

les k premières lignes de $\bar{H}_k$ forment une matrice H_k de Hessenberg supérieure :

$$\bar{H}_k = \begin{pmatrix} & H_k & \\ 0 \cdots 0 & & h_{k+1,k} \end{pmatrix}.$$

8.3.3 Calcul de l'itéré x_k

Il s'agit de résoudre le problème (8.26). Comme $z \in K_k$ peut s'exprimer dans la base $v_1, \ldots, v_k$ par $z = V_k y$, $y \in \mathbb{R}^k$, (8.26) peut se récrire comme un problème de minimisation de

$$J(y) = \|r_1 - AV_k y\|_2,$$

pour $y \in \mathbb{R}^k$.

En utilisant (8.28) et le fait que $r_1 = \beta V_{k+1} e_1$, $e_1 = (1, 0, \ldots, 0)^{\mathsf{T}} \in \mathbb{R}^{k+1}$ et $\beta = \|r_1\|$, on a

$$J(y) = \|V_{k+1}(\beta e_1 - \bar{H}_k y)\|_2.$$

Compte tenu de l'orthonormalité des colonnes de V_{k+1} on obtient finalement

$$J(y) = \|\beta e_1 - \bar{H}_k y\|_2, \tag{8.29}$$

fonction qu'il s'agit de minimiser. On verra à la section 8.3.5 une méthode de résolution de ce problème de moindres-carrés, basée sur la factorisation QR de $\bar{H}_k$.

8.3.4 L'algorithme GMRES

Après la phase d'initialisation (étapes 1 à 3), l'algorithme GMRES se déroule en deux temps. Dans un premier temps (étape 4), on calcule une base de $K_s(A, r_1)$, l'indice s se détermine en détectant la saturation des espaces de Krylov. Dans un second temps (étape 5), on calcule la solution x_* du système linéaire en résolvant le problème (8.29).

Algorithme 8.17 (GMRES)

1. Initialisation : choix de $x_1 \in \mathbb{R}^n$ et calcul du résidu $r_1 = b - Ax_1$;
2. Si $r_1 = 0$ on s'arrête ;
3. $v_1 = r_1/\|r_1\|$;
4. Pour $k = 1, 2, \ldots$ faire :
   4.1. $h_{i,k} = v_i^{\mathsf{T}} A v_k$, pour $i = 1, \ldots, k$;
   4.2. $\tilde{v}_{k+1} = Av_k - \sum_{i=1}^{k} h_{i,k} v_i$;
   4.3. $h_{k+1,k} = \|\tilde{v}_{k+1}\|_2$;
   4.4. Si $h_{k+1,k} = 0$ aller en 5 ;
   4.5. $v_{k+1} = \tilde{v}_{k+1}/h_{k+1,k}$;
5. Calcul de la solution :
   5.1. $y_k = \arg\min_{y \in \mathbb{R}^k} J(y)$, où $J(y)$ donné par (8.29) ;
   5.2. $x_k = x_1 + V_k y_k$.

À l'étape 4.4, lorsque $h_{k+1,k} = 0$, on a $Av_k \in K_k$. D'après l'implication (8.27), cela entraîne que $K_{k+1} = K_k$: l'espace de Krylov K_k est saturé. Par conséquent, x_k calculé à l'étape 5 sera la solution x_*.

8.3.5 L'algorithme GMRES/QR

L'étape 5 de l'algorithme GMRES ne spécifie pas comment on résout le problème de minimisation de la fonction J donnée en (8.29). Dans cette section, nous montrons comment procéder en utilisant une factorisation QR de $\bar{H}_k$:

$$\bar{H}_k = Q_k \bar{R}_k, \quad \bar{R}_k = \begin{pmatrix} R_k \\ 0 \end{pmatrix},$$

où Q_k est une matrice orthogonale d'ordre $k+1$ et $\bar{R}_k$ est une matrice $(k+1) \times k$ dont les k premières lignes forment une matrice R_k triangulaire supérieure et la $(k+1)$-ième ligne est nulle.

Avec cette factorisation, J s'écrit

$$J(y) = \|Q_k^{\mathsf{T}}(\beta e_1 - \bar{H}_k y)\|_2 = \|\bar{q}_k - \bar{R}_k y\|_2,$$

où

$$\bar{q}_k = \beta Q_k^{\mathsf{T}} e_1. \tag{8.30}$$

On voit que le vecteur $y_k \in \mathbb{R}^k$ minimisant $J(y)$ sur $\mathbb{R}^k$ est solution du système triangulaire supérieur :

$$R_k y = q_k,$$

où $q_k \in \mathbb{R}^k$ est formé des k premiers éléments de $\bar{q}_k$. Remarquons aussi que la norme du résidu en x_k s'obtient comme la composante $k+1$ de $\bar{q}_k$:

$$\|r_k\| = J(y_k) = (\bar{q}_k)_{k+1}. \tag{8.31}$$

On a

$$\bar{q}_k = \begin{pmatrix} q_k \\ \|r_k\| \end{pmatrix}.$$

Voyons à présent comment calculer $\bar{R}_{k+1}$ et $\bar{q}_{k+1}$ à partir de $\bar{R}_k$ et $\bar{q}_k$ en n'utilisant qu'une rotation de Givens. Supposons que l'on dispose de la factorisation QR de $\bar{H}_k$:

$$Q_k^\mathsf{T} \bar{H}_k = \bar{R}_k = \begin{pmatrix} R_k \\ 0 \end{pmatrix},$$

et que la matrice orthogonale Q_k^T d'ordre $k+1$ soit le produit de p rotations de Givens d'ordre $k+1$ (en fait, on aura $p = k$)

$$Q_k^\mathsf{T} = G_p \cdots G_1.$$

La matrice $\bar{H}_{k+1}$ s'obtient à partir de $\bar{H}_k$ en lui adjoignant une ligne et une colonne supplémentaire

$$\bar{H}_{k+1} = \begin{pmatrix} & & \times \\ & \bar{H}_k & \vdots \\ & & \times \\ 0 & \cdots\ 0 & h_{k+2,k+1} \end{pmatrix},$$

où $\times$ désigne des éléments éventuellement non nuls. Les matrices d'ordre $k+2$

$$\tilde{G}_i = \begin{pmatrix} & & 0 \\ & G_i & \vdots \\ & & 0 \\ 0 & \cdots\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad 1 \leqslant i \leqslant p$$

sont encore des rotations de Givens. L'application de $\tilde{Q}_{k+1}^\mathsf{T} = \tilde{G}_p \cdots \tilde{G}_1$ à $\bar{H}_{k+1}$ laissera sa dernière ligne inchangée et l'on aura

$$\tilde{Q}_{k+1}^\mathsf{T} \bar{H}_{k+1} = \begin{pmatrix} & & \times \\ & \bar{R}_k & \vdots \\ & & \times \\ 0 & \cdots\ 0 & h_{k+2,k+1} \end{pmatrix}.$$

On voit que pour annuler la dernière ligne de la matrice dans le membre de droite, il suffira d'utiliser une rotation de Givens supplémentaire $\tilde{G}_{p+1}$.

Quant au vecteur $\bar{q}_{k+1}$ défini en (8.30), il s'obtient à partir de $\bar{q}_k$, comme suit ($e_1 \in \mathbb{R}^{k+1}$)

$$\bar{q}_{k+1} = \tilde{G}_{p+1} \tilde{G}_p \cdots \tilde{G}_1 \begin{pmatrix} \beta e_1 \\ 0 \end{pmatrix} = \tilde{G}_{p+1} \begin{pmatrix} \bar{q}_k \\ 0 \end{pmatrix}.$$

En pratique, on modifie l'algorithme GMRES pour contrôler son arrêt au moyen d'un seuil de tolérance $\varepsilon > 0$: on s'arrête si $\|r_k\| \leqslant \varepsilon$. Ce contrôle peut facilement être pris en compte dans le test d'arrêt de l'étape 2. Quant à l'arrêt au cours de l'étape 4.4, il peut se faire sans le calcul explicite de x_k, en contrôlant le résidu par $(\bar{q}_k)_{k+1}$; voir (8.31).

8.3.6 Algorithme GMRES avec redémarrage

Pour la résolution de grands systèmes linéaires, l'algorithme GMRES a l'inconvénient de devoir mémoriser un nombre de vecteurs croissant avec le nombre d'itérations. Il faut en effet mémoriser V_k et les k rotations de Givens donnant $Q_k^\intercal$ et R_k. Pour remédier à cet inconvénient, on peut redémarrer la méthode toutes les m itérations.

Cependant, une certaine prudence s'impose dans l'utilisation d'un tel algorithme, car il n'est pas nécessairement convergent. On peut facilement construire un exemple dans le cas où $m = 1$. Il suffit en effet que sur $x_1 + K_1$, le résidu soit minimal en x_1. Alors $x_2 = x_1$ et on ne quitte pas ce point si l'on redémarre la méthode à chaque itération. C'est le cas de l'exemple suivant

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad x_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

On trouve

$$r_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Alors $x_2 = x_1 + \bar{\alpha} r_1$, où $\bar{\alpha} = 0$ est la solution de

$$\min_\alpha \|b - \alpha A r_1\|_2 = \min_\alpha \left\| \begin{pmatrix} 1 - \alpha \\ 1 + \alpha \end{pmatrix} \right\|_2.$$

Notes

Rappelons qu'il existe des algorithmes de résolution de systèmes linéaires par factorisation de la matrice, demandant moins de $O(n^3)$ opérations flottantes. Un des premiers à descendre sous cette complexité est dû à Strassen [508], avec une borne en $O(n^{2.807})$, mais il est numériquement instable [291 ; 2002, section 26.3.2]. Le schéma de Coppersmith et Winograd [125] est en $O(n^{2.495})$.

La méthode du GC a été proposée par Hestenes et Stiefel [290 ; 1952] pour la résolution de systèmes linéaires symétriques et reprise par Fletcher et Reeves [201 ; 1964] pour l'optimisation de fonctions quadratiques strictement convexes. L'effet des erreurs d'arrondi sur la vitesse de convergence est analysé par Greenbaum [259 ; 1989] et Notay [419 ; 1993] et sur la précision de la solution par Greenbaum et Strakoš [263 ; 1992], Greenbaum [260 ; 1994] et Greenbaum [262 ; 1997]. Van der Vorst [526 ; 1990] analyse l'effet des erreurs d'arrondi sur le gradient conjugué préconditionné par factorisation de Cholesky incomplète. La dérivée des itérés par rapport au second membre b est exhibée dans [256].

Andrei [12 ; 2020] propose une synthèse sur les algorithmes de gradient conjugué pour la minimisation sans contrainte de fonctions non linéaires.

La méthode GMRES a été principalement développée par Saad et Schultz [476 ; 1986]. La stabilité numérique de l'algorithme est analysée dans [166 ; 1995].

Pour en savoir plus sur les méthodes itératives de résolution de systèmes linéaires, on pourra consulter les livres ou synthèses de Greenbaum [261 ; 1997], Gutknecht [276 ; 1997], van der Vorst [528 ; 2003] et Saad [475 ; 2003]. Saad et van der Vorst [477, 527 ; 2000] donnent un apreçu historique intéressant du développement des méthodes itératives de résolution de systèmes linéaires au cours du XX-ième siècle.

Exercices

8.1. *Le GC comme méthode de Krylov.* Soient A une matrice d'ordre n, symétrique, définie positive et $b \in \mathbb{R}^n$. Soient d_1, d_2, ..., les directions générées par la méthode du GC pour minimiser $f(x) = \frac{1}{2}x^\mathsf{T}Ax - b^\mathsf{T}x$ et $E_p := \text{vect}\{d_1, d_2, \ldots, d_p\}$. On note $K_p := \text{vect}\{g_1, Ag_1, \ldots, A^{p-1}g_1\}$ le sous-espace de Krylov d'ordre p, associé à A et au gradient initial $g_1 = Ax_1 - b$. Montrez que $E_p = K_p$.

8.2. *Propriétés de monotonie dans l'algorithme du gradient conjugué.* Soient $\{x_k\}_{k=1}^p$ les itérés générés par le GC (donc $x_p = x_*$). On suppose que $p \geqslant 2$.

(*i*) Montrez que $\{\|x_k - x_1\|_2\}_{k=1}^p$ est strictement croissante et que $\{\|x_k - x_*\|_2\}_{k=1}^p$ est strictement décroissante.

(*ii*) Montrez que l'angle entre $x_2 - x_1$ et $x_k - x_1$ est strictement croissant.

8.3. *Le GC préconditionné.* On considère l'algorithme du gradient conjugué préconditionné de la section 8.2.5. Soit P la matrice symétrique définie positive utilisée pour préconditionner l'algorithme. Montrez que les propriétés suivantes ont lieu.

(*i*) C'est un algorithme à directions conjuguées dans lequel $\tilde{d}_k = -Pg_k$.

(*ii*) On a $\text{vect}\{d_1, \ldots, d_k\} = P\,\text{vect}\{g_1, \ldots, g_k\} = K_k(PA, Pg_1)$ (l'espace de Krylov associé à la matrice PA et au vecteur Pg_1).

(*iii*) On a $g_k^\mathsf{T}Pg_i = 0$ et $g_k^\mathsf{T}d_i = 0$, pour $1 \leqslant i \leqslant k-1$.

(*iv*) Montrez que si $P^{1/2}AP^{1/2} = \alpha I + E$, où $\alpha > 0$ et E est une matrice de rang m, alors le GC préconditionné converge en au plus m itérations.

8.4. *Algorithmes du GC réduit et du GC projeté.* On cherche à minimiser par GC une fonction quadratique strictement convexe $x \in \mathbb{R}^n \mapsto f(x) := \frac{1}{2}x^\mathsf{T}Ax - b^\mathsf{T}x$ sur un sous-espace affine $\mathcal{A}$ de dimension p de $\mathbb{R}^n$. Dans ce but, on se donne $x_1 \in \mathcal{A}$ et une matrice Z de type $n \times p$ orthogonale (c.-à-d., $Z^\mathsf{T}Z = I$) telle que tout point de $x \in \mathcal{A}$ puisse s'écrire sous la forme $x = x_1 + Zu$, avec $u \in \mathbb{R}^p$. On note $P = ZZ^\mathsf{T}$ le projecteur orthogonal sur $\mathcal{A}$. On considère deux formes de l'algorithme du GC pour résoudre ce problème.

(A1) L'*algorithme du GC réduit* consiste à minimiser par GC la *fonction réduite*

$$u \in \mathbb{R}^p \mapsto f^r(u) := \frac{1}{2}u^\mathsf{T}Z^\mathsf{T}AZu + (Ax_1 - b)^\mathsf{T}Zu,$$

obtenue en remplaçant x par $x_1 + Zu$ dans $f(x)$.

(A2) L'*algorithme du GC projeté* consiste à minimiser f dans $\mathbb{R}^n$ par l'algorithme du gradient conjugué préconditionné de la section 8.2.5 qui utilise le préconditionneur singulier P.

Montrez que les deux algorithmes sont identiques (dans un sens à préciser) si le premier est démarré en $u_1 = 0$ et le second en x_1.

8.5. *Algorithme du GC projeté préconditionné.* On se place dans le cadre défini à l'exercice 8.4, dans lequel on cherche à minimiser une fonction quadratique strictement convexe $x \in \mathbb{R}^n \mapsto f(x) := \frac{1}{2}x^\mathsf{T}Ax - b^\mathsf{T}x$ sur un sous-espace affine $\mathcal{A}$ de dimension p de $\mathbb{R}^n$. On note Z une matrice de type $n \times p$ orthogonale (c.-à-d., $Z^\mathsf{T}Z = I$) telle que tout point de $x \in \mathcal{A}$ puisse s'écrire sous la forme $x = x_1 + Zu$, avec $u \in \mathbb{R}^p$. Soit L une approximation de $A^{1/2}$ que l'on cherche à utiliser pour préconditionner le GC projeté. Cet algorithme s'obtient en faisant un changement de variable $\tilde{x} = Lx$, en appliquant le GC projeté dans l'espace des $\tilde{x}$, puis en revenant dans l'espace des x. Montrez que l'algorithme résultant est l'algorithme du gradient conjugué préconditionné de la section 8.2.5 qui utilise le préconditionneur singulier $P = Z(Z^\mathsf{T}L^\mathsf{T}LZ)^{-1}Z^\mathsf{T}$.

8.6. *Application de GMRES et comparaison avec le GC.* Utilisez l'algorithme GMRES pour trouver la solution x_* de $Ax = b$, en partant de $x_1 = 0$, lorsque

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 2 & 0 \\ -2 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad b = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Comparez le nombre d'itérations de cette méthode avec le nombre d'étapes que peut demander la méthode du GC pour calculer x_* comme solution de l'équation normale $A^\mathsf{T}Ax = A^\mathsf{T}b$.

9 Algorithmes de Newton

Soit l'équation $x^3 - 2x - 5 = 0$ dont on cherche une racine. Prenez un nombre comme 2, qui diffère de moins de 10 % de la vraie valeur d'une racine. Écrivez $x = 2 + d_1$ et remplacez x par $2 + d_1$ dans l'équation. Vous aurez $d_1^3 + 6d_1^2 + 10d_1 - 1 = 0$, dont il faut trouver la racine pour l'ajouter à 2. Négligez $d_1^3 + 6d_1^2$ à cause de sa petitesse ; il restera $10d_1 - 1 = 0$ ou $d_1 = 0.1$, ce qui est très près de la vraie valeur de d_1. C'est pourquoi, j'écris $d_1 = 0.1 + d_2$ et substituant comme auparavant j'ai $d_2^3 + 6.3d_2^2 + 11.23d_2 + 0.061 = 0$. Négligeant les deux premiers termes, il reste $11.23d_2 + 0.061 = 0$ ou $d_2 = -0.0054$ à peu près. [...] *Et je continue ainsi les opérations aussi longtemps qu'il convient.*

I. Newton (1736). Methodus fluxionum et serierum infinitorum. (Voir les notes en fin de chapitre.)

The central idea in this essay is that narcissism is an advantageous trait for succeeding in science. Scientists with a high ego are better able to convince others of the importance of their research. [...] Narcissists emerge as charismatic leaders but the cost of their attitude is invisible, paid by others.

B. Lemaitre [358].

On donne aujourd'hui le nom de *méthode de Newton* à toute approche algorithmique procédant par *linéarisation* des fonctions définissant le *système* dont on cherche une solution. C'est faire un grand honneur, peut-être excessif, à Isaac Newton, cet important contributeur de la science. Le terme *système* est pris ici dans un sens très large puisqu'il peut s'agir d'équations, d'inéquations, d'inclusions, d'équations différentielles ou aux dérivées partielles, d'inéquations variationnelles, *etc.* De même, le terme *linéarisation* doit être pris dans un sens étendu, car on utilise aussi la méthode de Newton pour résoudre des systèmes définis par des fonctions non différentiables dans le sens classique. On peut donc mesurer le chemin parcouru depuis l'algorithme proposé au XVII$^{\text{e}}$ siècle par Newton pour déterminer une racine d'un polynôme réel d'une variable réelle, décrit dans les quelques lignes de l'épigraphe de ce chapitre, alors que la notion de dérivée n'existait pas encore. Il aurait d'ailleurs été préférable d'utiliser le nom de Simpson pour décrire ces méthodes (voir les notes de fin de cha-

pitre), mais l'usage actuel en a décidé autrement. Nous aurions aussi pu utiliser la locution *méthodes de linéarisation*, mais nous n'avons pas franchi le pas et avons suivi la tradition.

Il y a de nombreuses monographies consacrées à l'algorithme de Newton ou à un aspect de cette approche par linéarisation (voir les notes en fin de chapitre), si bien que notre présentation ne pourra être que partielle, se concentrant sur des sujets qui nous paraissent essentiels ou en rapport direct avec l'esprit de cet ouvrage. Notre description commencera par le cas simple et instructif dans lequel on cherche à résoudre un système d'équations non linéaires, à en trouver un zéro (section 9.1.1). Ce cas est important en optimisation pour au moins deux raisons. D'abord il se présente lorsqu'on cherche à minimiser la fonction nulle sous des contraintes d'égalité. Par ailleurs, l'algorithme de Newton en optimisation sans contrainte est un cas particulier du précédent, si bien que certaines de ses propriétés, non attractives pour l'optimisation, trouveront leur origine dans le fait que cette approche est d'abord destinée à la résolution d'équations non linéaires. Nous verrons ensuite comment adapter l'algorithme à la minimisation de fonctions sans contrainte (section 9.1.2) ; le cas des problèmes avec contraintes sera examiné en détail au chapitre 14.

La propriété la plus attrayante de l'algorithme de Newton, qui en fait une référence, est sa convergence quadratique locale (théorèmes 9.2 et 9.3). Il a malheureusement aussi beaucoup de défauts ; nous les détaillerons. Comme remède à ces imperfections nous examinerons en détail les méthodes inexactes (section 9.2) et la globalisation de la convergence (section 9.3).

Connaissances supposées. Conditions d'optimalité pour les problèmes sans contrainte (section 4.2) ; algorithme du gradient conjugué (chapitre 8, utile pour l'algorithme de Newton tronqué à la section 9.3.1).

9.1 Méthodes locales

9.1.1 Systèmes d'équations

On s'intéresse ici à la recherche d'un *zéro* d'un système d'équations non linéaires, c'est-à-dire d'un point $x \in \mathbb{R}^n$ qui vérifie

$$F(x) = 0, \tag{9.1}$$

où $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ est une fonction différentiable. Il faut donc que $F_i(x) = 0$ pour tout $i = 1, \ldots, n$. Le système (9.1) étant formé de n équations aux n inconnues $x = (x_1, \ldots, x_n)$, il a quelques chances d'être bien posé.

L'algorithme de Newton génère une suite $\{x_k\}$ par une idée très simple, qui est illustrée à la figure 9.1 dans le cas où $n = 1$. On commence par linéariser l'équation en l'itéré courant x_k, ce qui donne la fonction $x \mapsto F(x_k) + F'(x_k) \cdot (x - x_k)$ dont le graphe est représenté par la ligne en tirets à la figure 9.1. Puis on cherche un zéro de cette fonction linéaire, s'il existe. C'est un opération simple puisqu'il suffit de résoudre un système linéaire. Ce zéro est l'itéré suivant x_{k+1}, qui est donc défini par

$$F(x_k) + F'(x_k) \cdot (x_{k+1} - x_k) = 0.$$

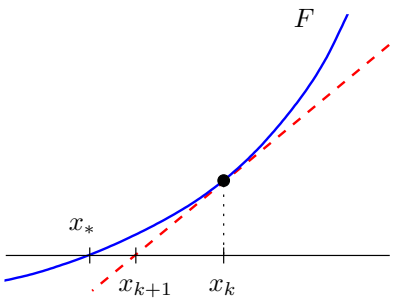


Fig. 9.1. Une itération de Newton

Cette équation peut certainement être résolue si $F'(x_k)$ est inversible. On renforcera l'analogie avec les méthodes à directions de descente du chapitre 6 en écrivant

$$x_{k+1} = x_k + d_k, \tag{9.2}$$

où d_k est la solution de l'*équation de Newton*, qui est le système linéaire suivant

$$F'(x_k)d_k = -F(x_k). \tag{9.3}$$

On peut maintenant décrire l'algorithme de Newton, que l'on qualifie de *local* car, comme on le verra, sa convergence n'est garantie que si le premier itéré est proche d'un zéro régulier de F.

Algorithme 9.1 (Newton local pour système non linéaire) On suppose qu'au début de l'itération k, on dispose d'un itéré $x_k \in \mathbb{R}^n$.

1. *Test d'arrêt.* Si $F(x_k) \simeq 0$, arrêt de l'algorithme.
2. *Direction.* Calculer d_k comme solution de (9.3).
3. *Nouvel itéré.* $x_{k+1} := x_k + d_k$.

Le coût de l'itération repose essentiellement sur l'évaluation de la jacobienne $F'(x_k)$ et sur la résolution du système linéaire (9.3) à l'étape 2. Cet algorithme ramène donc la résolution du système non linéaire (9.1) à une *suite* de systèmes linéaires, plus simples à résoudre.

L'intérêt principal de l'algorithme Newton est de générer des suites q-quadratiquement convergentes, c'est ce que nous allons montrer dans le théorème 9.2 ci-dessous. Les conditions assurant un tel comportement sont à peine plus fortes que celles requises pour que la méthode soit bien définie : il faut que F ait une dérivée lipschitzienne (alors que seule la dérivabilité de F est nécessaire à la définition de l'algorithme) et que F' soit inversible en la solution x_* recherchée (alors $F'(x_k)$ sera inversible pour un itéré x_k proche de x_*).

Le théorème suivant analyse la convergence d'une méthode un peu plus générale que l'algorithme 9.1, dans laquelle, à l'étape 2, la direction d_k est solution du système linéaire

$$M_k d_k = -F(x_k), \tag{9.4}$$

où M_k est une matrice inversible, pouvant être différente de $F'(x_k)$. Les méthodes de quasi-Newton entrent dans ce cadre (voir le chapitre 10).

Théorème 9.2 (convergence locale de l'algorithme de Newton) *On suppose que F a un zéro x_*, que F est de classe C^1 dans un voisinage Ω de x_* et que $F'(x_*)$ est inversible.*

1) *Alors, il existe $\varepsilon_x > 0$ et $\varepsilon_M > 0$ tels que si*

$$\|x_1 - x_*\| \leqslant \varepsilon_x \qquad \text{et} \qquad \|M_k - F'(x_k)\| \leqslant \varepsilon_M, \quad \forall k \geqslant 1,$$

l'algorithme de Newton avec d_k solution de (9.4), plutôt que de (9.3), est bien défini et génère une suite $\{x_k\}$ convergeant q-linéairement vers x_*.

2) *Si de plus*

$$\big(M_k - F'(x_*)\big)(x_k - x_*) = o(\|x_k - x_*\|),$$

alors la convergence est q-superlinéaire.

3) *Si de plus F' est lipschitzienne sur Ω et*

$$\big(M_k - F'(x_*)\big)(x_k - x_*) = O(\|x_k - x_*\|^2),$$

alors la convergence est q-quadratique.

Démonstration. On note $\beta := \|F'(x_*)^{-1}\|$ et on choisit $\varepsilon_M > 0$ tel que $\beta\varepsilon_M < 1$ et

$$r := \frac{3\beta\varepsilon_M}{1 - \beta\varepsilon_M} < 1.$$

On détermine ensuite $\varepsilon_x > 0$ tel que $\bar{B}(x_*, \varepsilon_x) \subseteq \Omega$ et tel que $\|x - x_*\| \leqslant \varepsilon_x$ implique que $\|F'(x) - F'(x_*)\| \leqslant \varepsilon_M$ (possible par la continuité de F').

Si une matrice M vérifie $\|M - F'(x_*)\| \leqslant \varepsilon_M$, alors $\|F'(x_*)^{-1}(M - F'(x_*))\| \leqslant \beta\varepsilon_M < 1$ et, par le lemme A.2 de perturbation de Banach, la matrice M est inversible et vérifie $\|M^{-1}\| \leqslant \beta/(1 - \beta\varepsilon_M)$. En appliquant cela à $M = M_k$ ou $M = F'(x)$, on trouve que, pour tout $k \geqslant 1$ et tout $x \in \bar{B}(x_*, \varepsilon_x)$, M_k et $F'(x)$ sont inversibles et

$$\|M_k^{-1}\| \quad \text{et} \quad \|F'(x)^{-1}\| \leqslant \frac{\beta}{1 - \beta\varepsilon_M}.$$

Dans ce cas, la formule (9.4) définit bien la direction d_k.

En utilisant $F(x_*) = 0$ et le fait que F est de classe C^1 sur $\bar{B}(x_*, \varepsilon_x)$ (ce qui autorise un développement de Taylor avec reste intégral), on a si $x_k \in \bar{B}(x_*, \varepsilon_x)$

$$\begin{aligned} x_{k+1} - x_* &= x_k - x_* + d_k \\ &= M_k^{-1}\big(M_k(x_k - x_*) - F(x_k)\big) \\ &= M_k^{-1}\big(M_k - F'(x_k)\big)(x_k - x_*) \\ &\quad + M_k^{-1}\int_0^1 \Big(F'(x_k) - F'(x_* + t(x_k - x_*))\Big)(x_k - x_*)\,\mathrm{d}t. \end{aligned}$$

En utilisant le fait que la norme d'une intégrale est plus petite que l'intégrale de la norme de l'intégrant, on en déduit que $\|x_{k+1} - x_*\| \leqslant r\|x_k - x_*\|$. Dès lors, par récurrence, toute la suite $\{x_k\} \subseteq \bar{B}(x_*, \varepsilon_x)$ si $x_1 \in \bar{B}(x_*, \varepsilon_x)$ (car $r \leqslant 1$). De plus $x_k \to x_*$ (car $r < 1$). Ceci démontre le point 1 du théorème.

Sous la condition additionnelle du point 2, l'estimation de l'erreur $x_{k+1} - x_*$ ci-dessus montre que $x_{k+1} - x_* = o(\|x_k - x_*\|)$, c'est-à-dire la convergence superlinéaire de $\{x_k\}$. Sous les conditions additionnelles du point 3, on trouve à partir de l'estimation de l'erreur $x_{k+1} - x_*$ ci-dessus que, pour une constante C, $\|x_{k+1} - x_*\| \leqslant C\|x_k - x_*\|^2$; on obtient la convergence quadratique de $\{x_k\}$. □

Le résultat de convergence ci-dessus s'applique directement à l'algorithme de Newton, c'est-à-dire lorsque $M_k = F'(x_k)$ pour tout $k \geqslant 1$. En particulier, on voit que sous les conditions de régularité de F spécifiées dans les trois parties du théorème, l'algorithme est bien défini et génère une suite convergeant quadratiquement, dès que le premier itéré x_1 est pris assez proche de x_*.

Le théorème de Kantorovitch offre une autre manière de montrer la convergence de l'algorithme de Newton. Il a la particularité intéressante de ne pas supposer l'existence d'un zéro de F, mais de l'affirmer. Ce résultat offre donc aussi un moyen de démontrer l'existence d'un zéro d'une équation non linéaire. Il est d'ailleurs apparenté à des théorèmes d'existence de points fixes (voir les notes en fin de chapitre). Le résultat s'exprime simplement : si x_1 est presqu'un zéro ($F(x_1) \simeq 0$) et si F' est inversible en x_1 et ne change pas trop vite, alors il doit y avoir un zéro dans un voisinage de x_1 ; de plus l'algorithme de Newton démarrant en x_1 converge vers ce zéro.

Théorème 9.3 (Kantorovitch) *Supposons que F soit différentiable sur un ouvert convexe $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$. On suppose également qu'en $x_1 \in \Omega$, $F'(x_1)$ est inversible, que $F'(x_1)^{-1}F'(\cdot)$ est lipschitzienne de module $L > 0$ sur Ω et que, pour $\delta := \|F'(x_1)^{-1}F(x_1)\|$ et $r := (1 - \sqrt{1-2\delta L})/L$, on a*

$$2\delta L \leqslant 1 \qquad \text{et} \qquad \bar{B}(x_1, r) \subseteq \Omega.$$

Alors,
1) *F a un zéro $x_* \in \bar{B}(x_1, r)$,*
2) *F n'a pas d'autre zéro que x_* dans $(\bar{B}(x_1, r) \cup B(x_1, r_+)) \cap \Omega$, où $r_+ := (1 + \sqrt{1-2\delta L})/L$,*
3) *l'algorithme de Newton démarrant en x_1 est bien défini et génère une suite $\{x_k\} \subseteq \bar{B}(x_1, r)$ convergeant vers x_*.*

Démonstration. □

Concluons cette section par une propriété de l'algorithme de Newton importante pour les applications : l'algorithme est invariant par changement de variables. De manière plus précise, supposons que l'on fasse le changement de variables

$$\tilde{x} = Ax,$$

où A est une matrice d'ordre n inversible. Soit $\tilde{F} = F \circ A^{-1}$ l'expression de F dans l'espace des $\tilde{x}$; donc $\tilde{F}(\tilde{x}) = F(x)$ si $\tilde{x}$ et x sont reliés par la relation ci-dessus. On a le résultat suivant.

Proposition 9.4 (invariance par changement de variables) *Dans les conditions décrites ci-dessus, si $\{x_k\}$ [resp. $\{\tilde{x}_k\}$] est la suite des itérés générés par l'algorithme de Newton pour résoudre le système non linéaire $F(x) = 0$ [resp. $\tilde{F}(\tilde{x}) = 0$] à partir d'un premier itéré x_1 [resp. $\tilde{x}_1 = Ax_1$], alors $\tilde{x}_k = Ax_k$ pour tout $k \geqslant 1$.*

Démonstration. Soit d_k la direction de Newton sur F en x_k et $\tilde{d}_k$ la direction de Newton sur $\tilde{F}$ en $\tilde{x}_k$. Si $\tilde{x}_k = Ax_k$, on a

$$\tilde{d}_k = -\tilde{F}'(\tilde{x}_k)^{-1}\tilde{F}(\tilde{x}_k) = -AF'(x)^{-1}F(x) = Ad_k,$$

car $\tilde{F}'(\tilde{x}_k) = F'(x_k)A^{-1}$ et $\tilde{F}(\tilde{x}_k) = F(x_k)$. On en déduit que

$$\tilde{x}_{k+1} = \tilde{x}_k + \tilde{d}_k = A(x_k + d_k) = Ax_{k+1}.$$

Le résultat s'en ensuit alors par récurrence. □

On obtient un résultat d'invariance analogue si, au lieu de pré-composer la fonction F par une application linéaire inversible, on la post-compose : $\tilde{F} = A \circ F$. Ces résultats nous montrent qu'il ne sert à rien de préconditionner l'algorithme de Newton par pré- ou post-composition avec une application linéaire inversible, puisque les itérés générés n'en seraient pas affectés. Un préconditionnement peut toutefois avoir une incidence en arithmétique flottante et dans les algorithmes de Newton tronqués, dans lesquels le système linéaire n'est résolu que partiellement (section **??**).

9.1.2 Optimisation

On considère le problème d'optimisation non linéaire sans contrainte suivant :

$$\begin{cases} \min f(x) \\ x \in \mathbb{R}^n, \end{cases} \tag{9.5}$$

dans lequel f est supposée régulière. Son équation d'optimalité s'écrit :

$$\nabla f(x) = 0,$$

où $\nabla f(x)$ est le gradient de f en x pour un produit scalaire arbitraire donné (on le note $\langle \cdot, \cdot \rangle$). Il s'agit d'un système de n équations non linéaires à n inconnues, que l'on peut résoudre par l'algorithme de Newton de la section 9.1.1, avec $F \equiv \nabla f$. Dans ce cas, l'équation de Newton (9.3) s'obtient en linéarisant en x_k l'équation d'optimalité ci-dessus, qui s'écrit aussi $f'(x) \cdot h = 0$, pour tout $h \in \mathbb{R}^n$. Cela donne $f'(x_k) \cdot h + f''(x_k) \cdot (d_k, h) = 0$, pour tout $h \in \mathbb{R}^n$; ou encore

$$\nabla^2 f(x_k) d_k = -\nabla f(x_k). \tag{9.6}$$

Dans (9.6), $\nabla^2 f(x_k)$ est donc la hessienne de f en x_k pour le produit scalaire ayant servi à calculer le gradient $\nabla f(x_k)$. On adapte ainsi aisément l'algorithme de la section 9.1.1 au cas de l'optimisation.

Algorithme 9.5 (Newton local en optimisation) On suppose qu'au début de l'itération k, on dispose d'un itéré $x_k \in \mathbb{R}^n$.

1. *Test d'arrêt.* Si $\nabla f(x_k) \simeq 0$, arrêt de l'algorithme.
2. *Direction.* Calculer d_k comme solution de (9.6).
3. *Nouvel itéré.* $x_{k+1} := x_k + d_k$.

Une autre approche conduisant au même résultat est la suivante. Étant donné l'itéré x_k, on cherche à trouver x_{k+1} en minimisant l'approximation quadratique de f. Ceci conduit au *problème quadratique osculateur* en x_k, qui est le problème en d suivant

$$\min_{d\in\mathbb{R}^n} \; f(x_k) + \nabla f(x_k)^\mathsf{T} d + \frac{1}{2} d^\mathsf{T} \nabla^2 f(x_k) d. \tag{9.7}$$

S'il a un *point stationnaire*, disons d_k, on prend alors $x_{k+1} = x_k + d_k$. Il est aisé de montrer qu'il s'agit du même algorithme de Newton : l'équation d'optimalité de (9.7) n'est autre que (9.6).

Il est important d'observer que l'algorithme de Newton construit des suites convergeant vers des points stationnaires, sans faire de distinction entre les minima ou les maxima, par exemple. Ceci est dû au fait qu'il est conçu pour trouver des zéros de $\nabla f(x) = 0$. Par conséquent, sans modification adéquate, si le premier itéré est proche d'un point stationnaire « régulier », la suite générée convergera vers ce point stationnaire. On comprend que, si l'on cherche à minimiser f, converger vers un maximum local n'est pas une propriété satisfaisante. Il sera donc nécessaire de modifier l'algorithme de Newton de manière à le contraindre à éviter les points stationnaires qui ne sont pas des minima. Ce n'est pas une tâche facile : si $\nabla f(x_1) = 0$, la direction de Newton est nulle et donc l'itéré suivant x_2 est identique au premier ! Cette question est toujours un objet d'études. Nous en reparlerons aux sections 9.3.1 et 9.3.2.

9.1.3 Défauts et remèdes

Les inconvénients de la méthode de Newton pour résoudre des systèmes d'équations non linéaires [resp. des problèmes d'optimisation] sont bien connus :

1. il faut calculer les dérivées premières de F [resp. les dérivées secondes de f], ce qui peut être coûteux en temps de calcul (n^2 éléments à évaluer), en effort humain (l'expression analytique de ces dérivées n'est pas toujours simple à obtenir) et en espace mémoire ;
2. l'algorithme n'est pas globalement convergent (si le premier itéré est éloigné d'une solution, le comportement des itérés suivants est souvent erratique) ;
3. l'algorithme n'est pas nécessairement défini aux points x où $F'(x)$ [resp. $\nabla^2 f(x)$] est singulière ;
4. pour les problèmes d'optimisation, si f n'est pas fortement convexe, l'algorithme ne génère pas nécessairement des directions de descente de f ;

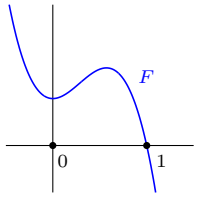
5. un système linéaire d'ordre n doit être résolu à chaque itération.

Voilà bien des défauts pour un algorithme aux propriétés locales tant souhaitées (il converge localement quadratiquement). Dans les sections suivantes, nous étudions des modifications de la méthode de Newton qui remédient partiellement à ces points faibles, tout en essayant de conserver son intérêt majeur qui est de générer des suites convergeant rapidement.

Les remèdes foisonnent et il n'est pas aisé de les exposer de manière concise. On peut en effet s'intéresser à la résolution de systèmes non linéaires ou à l'optimisation ; la globalisation de la convergence peut se faire par recherche linéaire, par région de confiance ou des méthodes de suivi de chemin ; le système de Newton peut être résolu exactement ou de manière approchée, par des méthodes directes ou itératives ; les algorithmes peuvent faire l'effort de ne pas utiliser la transposée de la jacobienne $F'(x)$ ou pas. Voilà donc beaucoup de possibilités à décrire et elles peuvent toutes être intéressantes en fonction du problème à résoudre. Nous serons brefs sur certaines approches si elles peuvent se déduire de méthodes déjà décrites ailleurs. Par ailleurs, nous ne considérerons pas les cas singuliers, où la jacobienne n'est pas inversible en la solution, où la fonction est non lisse, où la solution recherchée n'est pas isolée, *etc*, qui sont tous très importants pour pouvoir aborder des problèmes plus généraux que les deux considérés ici (annuler une fonction non linéaire et l'optimisation), comme les problèmes d'inéquations variationnelles ou de complémentarité, l'optimisation sous contrainte, *etc*.

Mais soyons clair : nonobstant cette abondance, il n'y a pas d'algorithme newtonien qui garantisse la convergence vers un zéro d'une fonction non linéaire F arbitraire quel que soit l'itéré initial. Cependant, les techniques numériques que nous allons présenter dans les sections suivantes améliorent grandement les qualités (efficacité et robustesse) des algorithmes en pratique, si bien qu'on ne peut les négliger. La difficulté se rencontre déjà en dimension 1, pour la fonction suivante

$$F(x) = \tfrac{1}{2} + 3x^2 - \tfrac{7}{2}x^3, \tag{9.8}$$



laquelle a un unique zéro en $x = 1$. Si l'on prend comme itéré initial $x_0 = 0$, les algorithmes échouent lamentablement. Il faut noter que la jacobienne de F y est nulle et donc que la direction de Newton n'y est pas définie. Par ailleurs, la fonction $x \mapsto |F(x)|$ a un minimum local en zéro, ce qui rend ce point attrayant aux yeux de beaucoup d'algorithmes. En réalité, il n'y a pas aujourd'hui de remède universel à cette difficulté fondamentale, qui trouve son origine dans le fait que l'algorithme de Newton est une méthode locale (en chaque itéré, elle n'utilise que les valeurs de F et de sa dérivée) alors que la détermination d'un zéro de F est de nature globale (dans l'exemple ci-dessus, en n'examinant F que dans le voisinage de 0, il est très difficile de savoir s'il faut s'éloigner de 0 en partant vers la gauche ou vers la droite — ce n'est pas impossible de faire le bon choix lorsque F est analytique et que l'on dispose des dérivées de tous ordres de F en zéro, mais en pratique il n'est possible d'utiliser qu'une quantité finie d'information).

On notera enfin que la situation est beaucoup plus favorable si les composantes de F sont des *polynômes*. La nature globale des zéros de F ne pose alors pas de difficulté aux techniques algébriques (via l'utilisation de *base de Gröbner* par exemple [133]) ou numériques (en utilisant des méthodes d'*optimisation globale* [348]) pourvu que le nombre de variables ou le degré des polynômes reste faible.

9.2 Méthodes inexactes ▲

9.2.1 Systèmes d'équations

Dans les problèmes de grande taille, il peut être coûteux de résoudre les systèmes linéaires de Newton (9.3) avec précision. Souvent même, une résolution exacte n'est pas possible, si bien qu'il faut définir un seuil de tolérance. Par ailleurs, on conviendra également qu'un calcul précis, qui fait entièrement confiance à la linéarisation de F, n'est probablement pas utile lorsque l'itéré courant x_k est éloigné d'un zéro de F, parce qu'en de tels points la direction de Newton d_k est généralement grande et qu'alors $F(x_k + d_k)$ est souvent éloigné de la valeur nulle prédite par le modèle linéarisé de F. Si le nombre de variables est important, les systèmes linéaires sont en général résolus par des méthodes itératives, dont l'arrêt est contrôlé par un test ; il est alors naturel d'avoir un test permissif, autorisant un important résidu $F(x_k) + F'(x_k)d_k$, lorsque $F(x_k)$ est grand et un test plus contraignant lorsque $F(x_k)$ est petit. Ces différentes considérations conduisent à la notion suivante.

On parle de *méthode de Newton inexacte* lorsque l'algorithme cherche à calculer des directions d_k, dites *de Newton inexactes*, vérifiant la condition suivante :

$$\|F(x_k) + F'(x_k)d_k\| \leqslant \eta_k \|F(x_k)\|, \tag{9.9}$$

où $\|\cdot\|$ est une norme arbitraire et $\eta_k \in [0, 1[$ est appelé le *facteur d'inexactitude*. Il est naturel de prendre $\eta_k < 1$ de manière à ne pas accepter une direction nulle. Par ailleurs, la direction de Newton, quand elle existe, annule le membre de gauche, si bien que (9.9) peut être vu comme une condition acceptant davantage de directions que celle de Newton. Comme annoncé, la condition (9.9) contrôle la précision avec laquelle il faut résoudre le système linéaire de Newton (9.3) au moyen de la grandeur $\|F(x_k)\|$, qui mesure la précision avec laquelle l'itéré courant résout le système non linéaire (9.1).

La condition (9.9) n'est pas nécessairement réalisable. La proposition suivante montre que l'on peut trouver une direction de Newton inexacte pour une norme arbitraire, essentiellement lorsque la direction de Newton elle-même existe, c'est-à-dire lorsque $F(x_k) \in \mathcal{R}(F'(x_k))$. Cependant, si la direction de Newton n'existe pas, on pourra parfois trouver une direction de Newton inexacte pour une norme particulière et un facteur d'inexactitude assez grand. Par exemple, si $F : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$ est la fonction linéaire définie par

$$F(x) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} x,$$

on a $F(0) \notin \mathcal{R}(F'(0))$, alors que $\|F(0) + F'(0)d\|_2 \leqslant \eta \|F(0)\|_2$ est réalisable pourvu que $\eta \in [\sqrt{2}/2, 1[$.

Proposition 9.6 (existence d'une direction de Newton inexacte) *Supposons que F soit différentiable en un itéré x_k tel que $F(x_k) \neq 0$. Alors, les propriétés suivantes sont équivalentes :*

(i) $F(x_k) \in \mathcal{R}(F'(x_k))$,
(ii) *pour toute norme $\|\cdot\|$ et tout $\eta_k \in [0,1[$, il existe un d_k vérifiant (9.9),*
(iii) *pour toute norme $\|\cdot\|$ associée à un produit scalaire, il existe un $\eta_k \in [0,1[$ et un d_k vérifiant (9.9).*

Démonstration. $[(i) \Rightarrow (ii)]$ Si $F(x_k) \in \mathcal{R}(F'(x_k))$, on peut trouver un d_k tel que $F(x_k) + F'(x_k)d_k = 0$. Cette direction de Newton d_k vérifie évidemment (9.9) quels que soient la norme et le $\eta_k \in [0,1[$.

$[(ii) \Rightarrow (iii)]$ Évident.

$[(iii) \Rightarrow (i)]$ Si $F(x_k) \notin \mathcal{R}(F'(x_k))$, on peut construire une base de $\mathbb{R}^n$ en complétant une base de $\mathcal{R}(F'(x_k))$ à laquelle on joint le vecteur $F(x_k)$. On prend sur $\mathbb{R}^n$ le produit scalaire $\langle\cdot,\cdot\rangle$ associé à cette base, qui est le produit scalaire euclidien des coordonnées dans cette base, et la norme associée, que l'on note $\|\cdot\|$. Alors $F(x_k)$ est orthogonal à $\mathcal{R}(F'(x_k))$, ce qui s'écrit

$$F'(x_k)^* F(x_k) = 0.$$

On en déduit que $d = 0$ minimise la fonction convexe différentiable $d \mapsto \|F(x_k) + F'(x_k)d\|$, c'est-à-dire que $\|F(x_k) + F'(x_k)d\| \geqslant \|F(x_k)\|$ pour tout $d \in \mathbb{R}^n$. Dès lors, quel que soit $\eta_k \in [0,1[$, (9.9) n'est pas réalisable pour la norme $\|\cdot\|$. □

9.2.2 Optimisation

9.3 Globalisation de la convergence

Grâce au théorème 9.2, on sait que la convergence de l'algorithme de Newton local 9.1 est garantie si l'itéré initial est « suffisamment » proche d'une solution (un zéro de F ou un minimum de f). Si le premier itéré est « éloigné » d'une solution, l'algorithme pourra générer une suite au comportement erratique, qui pourra accidentellement se retrouver dans le voisinage d'une solution et converger vers celle-ci, mais qui le plus souvent divergera (voir [36 ; 2012] pour un cas de cyclage, avec une fonction non différentiable, que l'on pourrait facilement lisser). En général, il est difficile de dire si un itéré initial est dans le voisinage d'une solution qui garantit la convergence de l'algorithme de Newton. Il est donc important de disposer de techniques permettant d'éviter le comportement désordonné indésirable probable de ses suites générées.

On entend par *globalisation de la convergence* de l'algorithme de Newton toute technique permettant d'améliorer la convergence des itérés vers une solution du problème, même si l'itéré initial est éloigné d'une solution. Cette notion n'a donc pas de lien avec la recherche d'un minimum global d'une fonction.

9.3.1 Recherche linéaire

Newton inexact ▲

On appelle *fonction de mérite*, toute fonction réelle qui atteint un minimum (si possible global) en une solution du problème que l'on cherche à résoudre. Si le problème considéré est celui de la minimisation sans contrainte (9.5), la fonction de mérite idéale est la fonction-coût elle-même. Dans le cas où l'on recherche un zéro de l'équation (9.1), une fonction de mérite naturelle est la *fonction de moindres-carrés* $\varphi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, définie par

$$\varphi(x) = \frac{1}{2}\|F(x)\|_2^2. \tag{9.10}$$

Le facteur $\frac{1}{2}$ n'est utile que pour simplifier l'expression de la dérivée ; la norme ℓ_2 et le carré assurent quant à eux la différentiabilité de φ.

La fonction φ atteint une valeur optimale nulle en toute solution de (9.1). Elle peut toutefois avoir des minima locaux qui ne sont pas solutions de (9.1). Ceux-ci vérifient la condition d'optimalité du premier ordre

$$F'(x)^\mathsf{T} F(x) = 0.$$

Ces points stationnaires seront donc des solutions de (9.1) si $F'(x)$ y est inversible, ce qui est loin d'être toujours le cas. Ce raisonnement simple met en évidence le rôle critique que jouera, dans cette approche, le lieu des points où la jacobienne $F'(x)$ est singulière :

$$\mathcal{S} := \{x \in \mathbb{R}^n : F'(x) \text{ est singulière}\}.$$

La situation est cependant plus compliquée : même si $\mathcal{S}$ est vide, certains algorithmes utilisant φ comme fonction de mérite pourront rencontrer des difficultés lorsque la fonction $x \mapsto F'(x)^{-1}$ n'est pas bornée. Autrement dit, une matrice $F'(x)$ « singulière à l'infini » peut aussi être une source de difficultés.

Les techniques de globalisation de la convergence utilisent souvent de telles fonctions de mérite, car on sait comment forcer la convergence d'itérés vers des minima locaux de fonctions, par recherche linéaire (chapitre 6) ou par régions de confiance (chapitre **??**), alors que l'on ne connaît pas de méthode systématique permettant de trouver un zéro d'une fonction. On peut dire qu'en adoptant une telle approche, ces techniques renoncent à trouver un zéro de F et se contentent d'un point stationnaire ou d'un minimum local de φ. Dans ce cadre, cette recherche de zéro revient à trouver un minimum global de la fonction φ ci-dessus, tâche considérée aujourd'hui comme très difficile, parfois impossible, et de toutes façons très coûteuse en toute généralité.

Nous nous intéressons donc, dans cette section, à la globalisation de la convergence de l'algorithme de Newton pour résoudre le système (9.1), au moyen de la fonction de mérite φ définie ci-dessus. Cette approche permet d'ailleurs de résoudre de manière approchée l'équation de Newton (9.3). On se satisfait en effet d'une direction d_k qui vérifie

$$\|F(x_k) + F'(x_k)d_k\|_2 \leqslant \eta_k \|F(x_k)\|_2, \tag{9.11}$$

où $0 \leqslant \eta_k \leqslant \eta < 1$ (η est une constante). En général, on prend η_k proche de 1 lorsque x_k est loin d'une solution, de manière à ne pas passer trop de temps dans la résolution d'un système linéaire qui n'est sans doute pas un bon modèle de F dans ce cas, et

l'on prend η_k proche de zéro lorsque x_k se rapproche d'une solution, de manière à bénéficier de la convergence rapide de l'algorithme de Newton dans le voisinage d'une solution. Rappelons que le fait que l'on puisse trouver une direction d_k vérifiant (9.11) cache une hypothèse sur $F'(x_k)$; voir la proposition 9.6.

A priori, on ne voit pas pourquoi la direction de Newton (inexacte) serait une direction de descente de φ, laquelle est définie de manière naturelle, mais sans lien évident avec l'algorithme de Newton. Le fait qu'il en soit ainsi est le premier miracle du couple Newton-φ (voir la proposition **??** pour le second).

Proposition 9.7 (descente) *Si $F(x_k) \neq 0$, toute direction d_k vérifiant (9.11) est une direction de descente (non nulle) de φ en x_k car on a*

$$\nabla\varphi(x_k)^\mathsf{T} d_k = F'(x_k)^\mathsf{T} F(x_k) d_k \leqslant -2(1-\eta_k)\varphi(x_k) < 0. \tag{9.12}$$

Démonstration. On a en effet $\nabla\varphi(x_k) = F'(x_k)^\mathsf{T} F(x_k)$. Puis en utilisant l'inégalité de Cauchy-Schwarz :

$$\nabla\varphi(x_k)^\mathsf{T} d_k = F(x_k)^\mathsf{T} \left(F(x_k) + F'(x_k)d_k\right) - \|F(x_k)\|_2^2 \leqslant -(1-\eta_k)\|F(x_k)\|_2^2 < 0.$$

Forcément, comme toute direction de descente, d_k ne peut être nulle. □

Comme on cherche à annuler F et qu'un zéro de F est un minimum global de φ, la propriété remarquable précédente légitime le fait de trouver l'itéré suivant x_k en faisant de la recherche linéaire le long de d_k. C'est ce que fait l'algorithme ci-dessous, qui porte le nom d'*algorithme de Newton inexact*, malgré la connotation péjorative de cette appellation. Cette approche, que l'on retrouvera pour l'algorithme de Newton en optimisation, semble providentielle. Nous verrons cependant qu'elle a ses propres limites.

Algorithme 9.8 (Newton inexact) On suppose qu'au début de l'itération k, on dispose d'un itéré $x_k \in \mathbb{R}^n$.

1. *Test d'arrêt.* Si $F(x_k) \simeq 0$, arrêt de l'algorithme.
2. *Direction.* Calculer d_k vérifiant (9.11). Si ce n'est pas possible l'algorithme échoue.
3. *Recherche linéaire.* Déterminer un pas $\alpha_k > 0$ « suffisamment grand » le long de d_k de manière à faire décroître φ « suffisamment ».
4. *Nouvel itéré.* $x_{k+1} := x_k + \alpha_k d_k$.

La description de la recherche linéaire utilisée à l'étape 3 est vague et sera précisée dans les résultats de convergence ci-dessous. Il est courant cependant d'utiliser la règle d'Armijo (section 6.3.3) : pour ω et $\beta \in]0,1[$, le pas α_k est pris égal à $\beta^{i_k}\alpha_k^1$ où α_k^1 plus grand qu'une constante strictement positive et i_k est le plus petit entier positif tel que

$$\varphi(x_k + \alpha_k d_k) \leqslant \varphi(x_k) - 2\omega\alpha_k(1-\eta_k)\varphi(x_k). \tag{9.13}$$

En utilisant la proposition 9.7, on voit facilement qu'un tel pas existe.

Le premier énoncé de convergence globale que nous donnons ci-après montre que les points d'adhérence *réguliers* (dans un sens précisé dans l'énoncé) de la suite $\{x_k\}$ générée par l'algorithme 9.8 sont des zéros de F. Il faut se garder de penser que la question de la convergence globale de l'algorithme de Newton est réglée avec ce résultat, car il se peut très bien que de tels points stationnaires réguliers n'existent pas et que la suite générée converge vers un point non régulier qui n'est pas un zéro de F. Néanmoins, un tel résultat est une première indication sur la bonne conception de l'algorithme et nous l'énonçons et le démontrons pour cette raison.

Proposition 9.9 (Newton inexact et points d'adhérence) *On considère l'algorithme de Newton inexact 9.8 pour résoudre le système $F(x) = 0$ où $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ est différentiable avec $F'(x_k)$ inversible en tout itéré x_k généré par l'algorithme. On suppose que l'algorithme utilise la règle de recherche linéaire d'Armijo décrite autour de (9.13). Alors, s'il existe un point d'adhérence $\bar{x}$ de $\{x_k\}$ tel que $F'(\bar{x})$ est inversible et si F' y est continue, il s'ensuit que $\varphi(x_k) \to 0$ et $F(\bar{x}) = 0$.*

Démonstration. Si $\bar{x}$ est un point d'adhérence de $\{x_k\}$, il existe une sous-suite d'indices $\mathcal{K}$ tel que $x_k \to \bar{x}$ lorsque $k \to \infty$ dans $\mathcal{K}$.

Montrons que $\{d_k\}_{k\in\mathcal{K}}$ *est bornée* (c'est une conséquence de la régularité de $\bar{x}$). On raisonne par l'absurde, en supposant que $\{d_k\}$ n'est pas bornée. Alors, en extrayant une sous-suite au besoin, on peut supposer que $\|d_k\| \to \infty$ et $d_k/\|d_k\| \to d \neq 0$ lorsque $k \to \infty$ dans $\mathcal{K}$. En divisant les deux membres de l'inégalité (9.11) par $\|d_k\|$ et en passant à la limite lorsque $k \to \infty$, on trouve que $F'(\bar{x})d = 0$, ce qui contredit l'inversibilité supposée de $F'(\bar{x})$ puisque $d \neq 0$.

Par la règle d'Armijo, la suite $\{\varphi(x_k)\}$ est décroissante. Comme elle est aussi borné inférieurement (par zéro), elle converge. Alors, la règle d'Armijo et $\eta_k \leqslant \eta < 1$ impliquent que

$$\alpha_k \varphi(x_k) \to 0.$$

On poursuit en examinant deux cas complémentaires.

1) Supposons d'abord que $\alpha_k \not\to 0$. Alors, $\varphi(x_k) \to 0$ pour une sous-suite d'indices tendant vers l'infini. Par la décroissance de la suite $\{\varphi(x_k)\}$, on voit que toute la suite $\{\varphi(x_k)\} \to 0$. Dès lors, tout point d'adhérence $\bar{x}$ de $\{x_k\}$ vérifie $\varphi(\bar{x}) = 0$ ou $F(\bar{x}) = 0$.

2) Considérons à présent le cas plus difficile où $\alpha_k \to 0$. On peut supposer que $\alpha_k < 1$, ce qui veut dire que le pas $\hat{\alpha}_k := \alpha_k/\beta$ n'est pas accepté par la règle d'Armijo ou encore, qu'au point $\hat{x}_k := x_k + \hat{\alpha}_k d_k$, on a

$$\varphi(\hat{x}_k) > \varphi(x_k) - 2\omega\hat{\alpha}_k(1 - \eta_k)\varphi(x_k). \tag{9.14}$$

Notons que $\hat{\alpha}_k \to 0$ et que, par la bornitude de $\{d_k\}_{k\in\mathcal{K}}$, $\hat{x}_k \to \bar{x}$ pour $k \to \infty$ dans $\mathcal{K}$. On peut estimer l'écart $\varphi(\hat{x}_k) - \varphi(x_k)$ comme suit. Par le théorème des accroissements finis (corollaire C.13), on a

$$\|F(\hat{x}_k) - F(x_k) - F'(x_k)(\hat{x}_k - x_k)\| \leqslant \left(\sup_{z \in]x_k, \hat{x}_k[} \|F'(z) - F'(x_k)\| \right) \|\hat{x}_k - x_k\|.$$

Par la continuité supposée de F' en $\bar{x}$, le facteur entre parenthèses du membre de droite tend vers zéro quand $k \to \infty$ dans $\mathcal{K}$. En utilisant $\hat{x}_k - x_k = \hat{\alpha}_k d_k$, on obtient $F(\hat{x}_k) = F(x_k) + \hat{\alpha}_k F'(x_k) d_k + o(\hat{\alpha}_k)$ et donc

$$\begin{aligned} \varphi(\hat{x}_k) &= \varphi(x_k) + \hat{\alpha}_k F(x_k)^{\mathsf{T}} F'(x_k) d_k + o(\hat{\alpha}_k) \\ &\leqslant \varphi(x_k) - 2\hat{\alpha}_k (1 - \eta_k) \varphi(x_k) + o(\hat{\alpha}_k) \qquad [(9.12)]. \end{aligned}$$

Alors (9.14) conduit à

$$0 \leqslant 2(1 - \omega)\hat{\alpha}_k (1 - \eta_k) \varphi(x_k) \leqslant o(\hat{\alpha}_k).$$

En divisant chaque membre de ces inégalités par $\hat{\alpha}_k > 0$, en utilisant $\omega < 1$, en extrayant une sous-suite convergente de $\{\eta_k\}_{k \in \mathcal{K}} \subseteq]0, \eta]$ et en passant à la limite lorsque $k \to \infty$ dans $\mathcal{K}$, on obtient que $\varphi(\bar{x}) = 0$ ou $F(\bar{x}) = 0$. □

La recherche linéaire est considérée comme raisonnable dans le résultat de convergence qui suit, si elle permet d'obtenir la condition de Zoutendijk (6.19). La règle d'Armijo (algorithme 6.3) avec le pas initial $\alpha_k^1 = 1$ est souvent utilisée. Selon le chapitre 6, il faut souvent que φ soit $\mathcal{C}^{1,1}$ pour que la condition de Zoutendijk soit vérifiée par les recherches linéaires qui y sont étudiées. Dès lors, exiger la condition de Zoutendijk cache une hypothèse de régularité sur F.

Proposition 9.10 (convergence globale de Newton inexact) *Considérons l'algorithme de Newton inexact 9.8, avec une recherche linéaire vérifiant la condition de Zoutendijk (6.19), et supposons qu'il génère une suite $\{x_k\}$ telle que le conditionnement $\kappa_2(F'(x_k))$ soit borné. Alors*
1) $\nabla\varphi(x_k) \to 0$,
2) *si, de plus, la suite $\{F'(x_k)^{-1}\}$ est bornée, alors $F(x_k) \to 0$.*

Démonstration. Comme $\varphi(x_k)$ est bornée inférieurement, la proposition 6.8 montre que (6.21) a lieu. Le point 1 sera démontré si l'on prouve que le cosinus de l'angle θ_k entre $\nabla\varphi(x_k) = F'(x_k)^{\mathsf{T}} F(x_k)$ et $-d_k$ est uniformément positif. On a par (9.11)

$$\|d_k\|_2 \leqslant \|F'(x_k)^{-1}\|_2 \, \|F'(x_k) d_k\|_2 \leqslant (1 + \eta_k) \|F'(x_k)^{-1}\|_2 \, \|F(x_k)\|_2.$$

Dès lors, si C est une borne sur $\kappa_2(F'(x_k))$, on a

$$\cos\theta_k = \frac{-\nabla\varphi(x_k)^{\mathsf{T}} d_k}{\|\varphi(x_k)\|_2 \, \|d_k\|_2} \geqslant \frac{1 - \eta_k}{1 + \eta_k} \frac{1}{\|F'(x_k)\|_2 \, \|F'(x_k)^{-1}\|_2} \geqslant \frac{1 - \eta}{2C}.$$

Pour le point 2, on déduit de $\nabla\varphi(x_k) = F'(x_k)^{\mathsf{T}} F(x_k) \to 0$ et du caractère borné de $\{F'(x_k)^{-1}\}$ que

$$\|F(x_k)\|_2 \leqslant \|F'(x_k)^{-\mathsf{T}}\|_2 \, \|F'(x_k)^{\mathsf{T}} F(x_k)\|_2 \to 0.$$ □

Proposition 9.11 (convergence locale de Newton inexact) *On suppose que F a un zéro x_*, que F est de classe C^1 dans un voisinage Ω de x_* et que $F'(x_*)$ est inversible. On considère l'algorithme de Newton inexact 9.8, avec pas unité. Alors ...*

Démonstration. □

Newton tronqué

Les algorithmes étudiés dans cette section apportent un remède aux inconvénients de l'algorithme de Newton original sur les deux points suivants : (1) les problèmes de consistance et de convergence de la recherche linéaire et (2) le coût de résolution du système linéaire requis à chaque itération de l'algorithme de Newton. L'idée est de résoudre de manière partielle ce système linéaire (d'où le mot *tronqué*), ce qui permettra du même coup d'obtenir une direction de descente de qualité. On suppose toutefois que des dérivées premières de F (ou secondes de f en optimisation) sont évaluées, mais il n'est pas nécessaire de calculer toute la jacobienne $F'(x)$ (toute la hessienne $\nabla^2 f(x)$ en optimisation).

On peut décrire l'*algorithme de Newton tronqué* brièvement, comme suit. C'est une méthode à directions de descente, dans laquelle les directions sont déterminées en résolvant de manière approchée l'*équation de Newton*, qui est l'équation linéaire en $d_k \in \mathbb{R}^n$ suivante

$$H_k d_k = -g_k. \tag{9.15}$$

On y a noté $H_k := \nabla^2 f(x_k)$ la hessienne de f en x_k et $g_k := \nabla f(x_k)$ son gradient en x_k. L'algorithme fait ensuite de la recherche linéaire le long de d_k pour déterminer un pas $\alpha_k > 0$. Ceci conduit au nouveau point $x_{k+1} := x_k + \alpha_k d_k$.

Ce que l'on vient de décrire est une *itération externe* de l'algorithme. La résolution approchée de l'équation de Newton se fait en général par un processus itératif (le plus souvent il s'agit d'itérations de gradient conjugué) que l'on arrête avant d'avoir trouvé la solution et dont les itérations sont dites *internes*. Il y a dans ce cas deux processus itératifs imbriqués. On dit que l'algorithme de Newton est tronqué, pour exprimer le fait que le processus interne est interrompu avant convergence. Certains auteurs utilisent le terme « inexact » pour exprimer que (9.15) n'est pas résolue exactement à chaque itération (voir []), mais ce terme peut laisser penser que la méthode n'est pas très précise, ce qui n'est pas le cas.

Cette approche est justifiée par les considérations suivantes. La résolution précise de l'équation de Newton (9.15) peut prendre beaucoup de temps de calcul (pensez au cas où $n = 10^3 \dots 10^6$ et au fait qu'un système linéaire général se résout en $O(n^3)$ opérations), si bien qu'il est tentant d'en calculer une solution approchée à un coût inférieur. D'autre part, si la direction de Newton est bonne près d'une solution, il n'en est pas de même si l'itéré en est éloigné. Il est donc raisonnable de penser que l'on va être plus efficace et réduire le temps de calcul total en résolvant (9.15) grossièrement lorsqu'on est loin de la solution et avec plus de précision lorsqu'on s'en rapproche.

En pratique, c'est la stratégie qu'il faut suivre, mais l'on voit que le choix du nombre d'itérations internes à exécuter par itération externe est délicat. C'est le talon d'Achille de la méthode : il faut que l'algorithme « sente » la proximité d'une solution pour bien doser l'effort à faire à chaque itération externe. Ceci demande souvent un réglage qui peut dépendre du problème.

On utilise souvent le gradient conjugué (GC) pour résoudre le système (9.15) de manière approchée et c'est avec ce processus itératif interne que nous présenterons l'algorithme. Par là on cherche à annuler ou à faire décroître le *résidu* (c'est le gradient de la fonction quadratique $\varphi_k(d) = \frac{1}{2} d^{\mathsf{T}} H_k d + g_k^{\mathsf{T}} d$)

$$r_k := H_k d_k + g_k.$$

Ceci revient aussi à minimiser partiellement le problème quadratique osculateur (9.7). De plus, l'algorithme du GC est démarré avec $d_k^0 = 0$. Dans ce cas, le résidu initial est $r_k^0 = g_k$ et la première direction de recherche est $-g_k$. Si l'algorithme s'arrête après la première itération, d_k sera approché par une direction parallèle à $-g_k$, si bien que l'algorithme de Newton tronqué se ramène à la méthode de la plus forte pente. D'autre part, plus on fait d'itérations internes, plus l'algorithme de Newton tronqué se rapproche de l'algorithme de Newton. Il s'agit donc d'une méthode intermédiaire entre ces deux extrêmes. Si on suit la stratégie mentionnée ci-dessus, la méthode est proche de l'algorithme du gradient dans les premières itérations et obtient la convergence rapide de l'algorithme de Newton proche de la solution. Cet algorithme converge si f est régulière et si $\{\nabla^2 f(x_k)\}$ reste bornée. Il n'est pas nécessaire que $\{\nabla^2 f(x_k)^{-1}\}$ soit bornée.

Voyons cela de manière plus précise. Soit $\{x_k\}$ la suite générée. L'algorithme a besoin que l'on spécifie deux constantes (indépendantes de l'itération k), $\gamma \in]0,1[$ et $\omega_1 \in]0, \frac{1}{2}[$, qui sont utilisées dans la recherche linéaire. Ensuite, l'algorithme doit détecter quand est-ce qu'une direction interne générée par le gradient conjugué correspond à une courbure positive de f trop proche de zéro. Ceci se fait au moyen d'une valeur-seuil $\nu = \nu_k > 0$ qui pourra éventuellement être modifiée au cours des itérations externes. On dit alors qu'une direction v est *à courbure quasi-négative* pour f en x si

$$v^{\mathsf{T}} \nabla^2 f(x) v < \nu \|v\|_2^2. \tag{9.16}$$

Nous pouvons maintenant décrire une itération de l'algorithme, celle qui démarre en $x_k \in \mathbb{R}^n$.

Algorithme 9.12 (Newton tronqué en optimisation) On suppose qu'au début de l'itération k, on dispose d'un itéré $x_k \in \mathbb{R}^n$.

1. *Test d'arrêt.* Si $\nabla f(x_k) \simeq 0$, arrêt de l'algorithme.
2. *Direction.* On calcule d_k par i_k itérations (internes) de gradient conjugué qui démarrent en $d_k^0 := 0$. Pour $j \geqslant 0$:

   2.1. Calcul de la direction conjuguée interne ($r_k^j := H_k d_k^j + g_k$) :

$$v_k^j := \begin{cases} -r_k^0 & (= -g_k) & \text{si } j = 0 \\ -r_k^j + \beta_k^j v_k^{j-1} & (\beta_k^j := \|r_k^j\|_2^2 / \|r_k^{j-1}\|_2^2) & \text{si } j \geqslant 1. \end{cases}$$

2.2. Test d'arrêt : on interrompt les itérations internes (et on va au point 3) quand on veut, mais certainement quand $r_k^j = 0$ ou quand la direction interne v_k^i est à courbure « quasi-négative », c'est-à-dire si elle vérifie (9.16) avec $v = v_k^j$ et $\nu = \nu_k$. Dans ce cas, on prend

$$d_k := \begin{cases} -g_k & \text{si } j = 0 \\ d_k^j & \text{si } j \geqslant 1 \end{cases}$$

et on passe à l'étape 3.

2.3. Nouvel itéré interne

$$d_k^{j+1} := d_k^j + t_k^j v_k^j,$$

où le pas $t_k^j > 0$ est calculé par la formule habituelle

$$t_k^j := -\frac{(r_k^j)^\mathsf{T} v_k^j}{(v_k^j)^\mathsf{T} H_k v_k^j}.$$

3. *Calcul du pas.* On calcule un pas $\alpha_k > 0$ par la règle d'Armijo : α_k est le premier nombre (et le plus grand) dans $\{1, \gamma, \gamma^2, \gamma^3, \ldots\}$ tel que l'on ait

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leqslant f(x_k) + \omega_1 \alpha_k g_k^\mathsf{T} d_k.$$

4. *Nouvel itéré.* $x_{k+1} := x_k + \alpha_k d_k$.

Voici quelques remarques sur l'algorithme.

– Il n'utilise de la hessienne $H_k = \nabla^2 f(x_k)$ que ses produits $H_k v$ par une direction conjuguée v. Il n'est donc pas nécessaire de calculer la hessienne complètement. Une routine qui calcule ces produits suffira. Rappelons que $H_k v$ est la dérivée du gradient en x_k et dans la direction v.

– Le contrôle du nombre d'itérations internes par itération externe est une tâche délicate. Nous avons donné les tests d'arrêt minimal. Comme on peut s'arrêter quand on veut (pour avoir convergence, d'après la proposition 9.13), on peut ajouter d'autres conditions d'arrêt librement. C'est dans ce sens que l'algorithme décrit ci-dessus est dit être dans sa version minimale.

– À la première étape, l'algorithme du GC ne voit pas la non définie positivité éventuelle de H_k, puisque $(v_k^j)^\mathsf{T} H_k v_k^j \geqslant \nu_k \|v_k^j\|_2^2$ pour toute direction interne v_k^j acceptée. Il est donc bien défini.

  Si la première direction direction interne du GC, qui n'est autre que $-g_k$, est à courbure quasi-négative, l'algorithme ne la rejette pas (comme c'est le cas dans les itérations internes suivantes), mais la prend : $d_k = -g_k$. Donc, même

si $\nabla^2 f(x_k) = 0$, cette étape de l'algorithme est bien définie et fournit $d_k = -g_k$ comme direction de recherche.

– On n'a pas précisé comment choisir le seuil ν_k au cours des itérations externes. C'est clairement un point délicat. Le résultat de convergence ci-dessous autorise plusieurs règles. On peut maintenir ν_k supérieur à un seuil constant $\nu > 0$, mais c'est assez restrictif, car il est difficile de savoir quelle est la bonne valeur de ν. La proposition analyse aussi le cas où ν_k n'est décru que lorsque le pas unité est accepté par la recherche linéaire. On a alors un résultat plus faible ($\liminf \|g_k\| = 0$), mais si l'on maintient ν_k supérieur à un seuil proportionnel à $\|g_k\|^p$ (p étant une constante positive), on retrouve un résultat de convergence satisfaisant ($g_k \to 0$). Cette dernière règle permet à ν_k de décroître dans le voisinage d'une solution, ce qui permet de ne pas empêcher la convergence quadratique de l'algorithme.

  Au lieu de contrôler par ν_k la petitesse des quotients de Rayleigh $v^T H_k v / \|v\|_2^2$ de H_k, on peut aussi contrôler celle de

$$\cos\theta_k := \frac{-g_k^T d_k}{\|g_k\| \, \|d_k\|}$$

  qui, contrairement aux quotients de Rayleigh, a l'élégance de décroître de façon monotone au cours des itérations internes (voir exercice 8.2).

L'algorithme de Newton tronqué permet d'avoir un résultat de convergence relativement fort ($g_k \to 0$), sous la seule condition que les hessiennes $\nabla^2 f(x_k)$ forment une suite bornée. On n'a pas besoin que l'inverse des hessiennes (qui n'existent peut être pas !) forment une suite bornée.

Proposition 9.13 (convergence de Newton tronqué) *Supposons que f soit deux fois dérivable. On considère l'algorithme de Newton tronqué décrit ci-dessus.*

(i) Si $x_k \in \mathbb{R}^n$ n'est pas un point stationnaire de f, la direction d_k est de descente pour f en x_k et l'algorithme est bien défini en x_k.

(ii) Supposons que la suite $\{f(x_k)\}$ soit bornée inférieurement, que la suite $\{\nabla^2 f(x_k)\}$ soit bornée et qu'aucun itéré x_k généré ne soit un point stationnaire de f.

  (a) Si ν_k est maintenu plus grand qu'une constante $\nu > 0$, alors $\nabla f(x_k) \to 0$.

  (b) Si ν_k n'est décru que si le pas unité est accepté par la recherche linéaire à l'étape k, alors $\liminf_{k\to\infty} \|\nabla f(x_k)\| = 0$.

  (c) Si ν_k n'est décru que si le pas unité est accepté par la recherche linéaire à l'étape k et si ν_k vérifie

$$\nu_k \geqslant \nu \|\nabla f(x_k)\|^p, \tag{9.17}$$

  où $\nu > 0$ et $p \geqslant 0$ sont des constantes, alors $\nabla f(x_k) \to 0$. Le même résultat a lieu si l'on prend $\cos\theta_k$ au lieu de ν_k dans (9.17).

Démonstration. Commençons par donner une formule de la direction d_k. Pour cela, on constate que si $i_k \geqslant 1$, on a pour $0 \leqslant j \leqslant i_k$

$$(v_k^j)^\mathsf{T} H_k d_k^j = (v_k^j)^\mathsf{T} H_k \left(\sum_{l=0}^{j-1} t_k^l v_k^l \right) = 0,$$

parce que les directions internes v_k^l d'indices l différents sont conjuguées. Dès lors $(v_k^j)^\mathsf{T} r_k^j = (v_k^j)^\mathsf{T}(H_k d_k^j + g_k) = (v_k^j)^\mathsf{T} g_k$. On en déduit que

$$d_k = \sum_{j=0}^{i_k-1} t_k^j v_k^j = - \sum_{j=0}^{i_k-1} \frac{v_k^j (v_k^j)^\mathsf{T} g_k}{(v_k^j)^\mathsf{T} H_k v_k^j} = -J_k g_k,$$

où J_k est la matrice semi-définie positive de rang i_k donnée par la formule

$$J_k := \sum_{j=0}^{i_k-1} \frac{v_k^j (v_k^j)^\mathsf{T}}{(v_k^j)^\mathsf{T} H_k v_k^j}.$$

Si $i_k = 0$, on a aussi $d_k = -J_k g_k$, avec cette fois $J_k = I$.

On voit alors facilement que, si x_k n'est pas stationnaire, d_k est une direction de descente de f en x_k. En effet, si $i_k = 0$, $g_k^\mathsf{T} d_k = -\|g_k\|_2^2$. Si $i_k \geqslant 1$, en utilisant le fait que $(v_k^j)^\mathsf{T} H_k v_k^j > 0$ et que $v_k^0 = -g_k$, on a

$$g_k^\mathsf{T} d_k = - \sum_{j=0}^{i_k-1} \frac{(g_k^\mathsf{T} v_k^j)^2}{(v_k^j)^\mathsf{T} H_k v_k^j} \leqslant - \frac{(g_k^\mathsf{T} v_k^0)^2}{(v_k^0)^\mathsf{T} H_k v_k^0} = - \frac{\|g_k\|_2^4}{g_k^\mathsf{T} H_k g_k} \leqslant - \frac{\|g_k\|_2^2}{\|H_k\|_2}.$$

En rassemblant les deux cas:

$$g_k^\mathsf{T} d_k \leqslant - \min \left(1, \frac{1}{\|H_k\|_2} \right) \|g_k\|_2^2. \tag{9.18}$$

Donc $g_k^\mathsf{T} d_k < 0$ si $g_k \neq 0$.

Supposons à présent que, pour tout $k \geqslant 1$, $\nu_k \geqslant \nu$, où $\nu > 0$ est une constante. Montrons qu'il existe une constante $C > 0$ telle que

$$f(x_{k+1}) \leqslant f(x_k) - C \|g_k\|^2. \tag{9.19}$$

La convergence de $g_k \to 0$ s'en déduit du fait que $\{f(x_k)\}$ est décroissante et bornée inférieurement. D'après la proposition 6.11, il existe une constante $C_1 > 0$ telle que $\forall k \geqslant 1$, on ait soit

$$f(x_{k+1}) \leqslant f(x_k) - C_1 |g_k^\mathsf{T} d_k|, \tag{9.20}$$

soit

$$f(x_{k+1}) \leqslant f(x_k) - C_1 \|g_k\|^2 \cos^2 \theta_k, \tag{9.21}$$

où $\cos \theta_k = -(g_k^\mathsf{T} d_k)/(\|g_k\|_2 \|d_k\|_2)$. Si la première inégalité (9.20) a lieu, on a par l'estimation (9.18) de $g_k^\mathsf{T} d_k$:

$$f(x_{k+1}) \leqslant f(x_k) - C_1 \min \left(1, \frac{1}{\|H_k\|_2} \right) \|g_k\|_2^2. \tag{9.22}$$

On en déduit (9.19) du fait que $\{H_k\}$ est supposée bornée. Supposons à présent que la seconde inégalité (9.21) ait lieu. Notons d'abord que $\|uu^\mathsf{T}\|_2 = \|u\|_2^2$ et que

$(v_k^j)^\mathsf{T} H_k v_k^j \geqslant \nu_k \|v_k^j\|_2^2$ pour tout $j = 0, \ldots, i_k$. Dès lors $\|J_k\|_2 \leqslant \max(1, n\nu_k^{-1})$ et par (9.18)

$$\cos\theta_k = \frac{-g_k^\mathsf{T} d_k}{\|g_k\|_2 \|d_k\|_2} \geqslant \min\left(1, \frac{1}{\|H_k\|_2}\right) \frac{\|g_k\|_2}{\|d_k\|_2} \geqslant \min\left(1, \frac{1}{\|H_k\|_2}\right) \min\left(1, \frac{\nu_k}{n}\right).$$

La suite $\{H_k\}$ étant supposée bornée, le cosinus de θ_k est uniformément positif et on obtient également (9.19).

Si ν_k n'est décru que lorsque le pas unité est accepté par la recherche linéaire, deux cas peuvent se présenter. Soit $\liminf \nu_k > 0$ et on est ramené au point (*ii-a*), selon lequel $g_k \to 0$. Soit il existe une sous-suite d'itérés pour lesquels le pas unité est accepté. Pour les indices k correspondants, on a (9.20) avec $C_1 = \omega_1$, donc (9.22), et du fait que $\{H_k\}$ est bornée, cela implique que $g_k \to 0$ pour les indices k considérés.

Considérons pour terminer le cas où ν_k n'est décru que lorsque le pas unité est accepté par la recherche linéaire et où (9.17) a lieu (éventuellement avec $\cos\theta_k$ au lieu de ν_k). On sait déjà que $\liminf \|g_k\| = 0$. Si toute la suite $\{g_k\}$ ne converge pas vers zéro, on peut trouver une constante $\gamma > 0$ et une suite d'indices $\{l_k\}_{k\geqslant 0}$ strictement croissante telle que pour tout $k \geqslant 0$:

$$\|g_{l_{2k}}\| \geqslant \gamma \quad \text{et} \quad \|g_{l_{2k+1}}\| \leqslant \gamma/2.$$

Pour $l_{2k} \leqslant l < l_{2k+1}$, en utilisant la borne inférieure sur $\cos\theta_k$ ci-dessus et (9.17), on obtient

$$f(x_{l+1}) \leqslant f(x_l) - \omega_1 \|g_l\| \|s_l\| \cos\theta_l \leqslant f(x_l) - C\|s_l\|,$$

où $s_l = x_{l+1} - x_l$ et $C > 0$ est une constante indépendante de k et de l. On en déduit

$$\|x_{l_{2k+1}} - x_{l_{2k}}\| \leqslant \sum_{l=l_{2k}}^{l_{2k+1}-1} \|s_l\| \leqslant \frac{1}{C}\Big(f(x_{l_{2k}}) - f(x_{l_{2k+1}})\Big).$$

Dès lors $\|x_{l_{2k+1}} - x_{l_{2k}}\| \to 0$ et, par l'uniforme continuité de ∇f, $\|g_{l_{2k+1}} - g_{l_{2k}}\| \to 0$, ce qui contredit le fait que $\|g_{l_{2k+1}} - g_{l_{2k}}\| \geqslant \gamma/2$. □

9.3.2 Régions de confiance ▲

Cette globalisation de la convergence offre plus de robustesse (résultats de convergence meilleurs, moins de problème à l'utilisation), mais elle n'est pas toujours utilisable pour résoudre des systèmes non linéaires de très grande taille.

Systèmes non linéaires

Présenter l'algortithme classique qui minimise $\|F(\cdot)\|$ ou $\frac{1}{2}\|F(\cdot)\|_2^2$ avec le pas de Cauchy $-\alpha^C F'(x)^\mathsf{T} F(x)$. Discuter des méthodes avec résolution directe ou itérative du système de Newton. Pour les résolutions itératives, discuter des méthodes qui permettent d'avoir la croissance du pas de Newton approché au cours des itérations internes.

Cet algorithme classique a l'inconvénient de requérir le calcul du produit de la *transposée* de la jacobienne par un vecteur pour estimer le pas de Cauchy. Ceci peut être un inconvénient majeur pour les grands problèmes dans lesquels les produits jacobienne-vecteur sont estimés par différences finies. Le seul algorithme n'utilisant pas la transposée de la jacobienne semble être celui de Brown et Saad [83 ; 1990], mais sa convergence n'est pas démontrée.

Optimisation

Tout un chapitre est consacré à cette méthode importante (le chapitre **??**). Mentionnons seulement ici son principe.

9.3.3 Autres méthodes

Nous évoquons succintement dans cette section d'autres approches de globalisation de la convergence, sans en étudier lleur convergence.

Réduction du pas de temps dans la résolution d'équations différentielles

Supposons que l'on cherche à résoudre l'équation différentielle

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} + \phi(x) = 0, \quad x(0) = x_0, \tag{9.23}$$

où l'état initial $x_0 \in \mathbb{R}^n$ est donné et $\phi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ est une fonction non linéaire.

Un schéma de discrétisation en temps de (9.23) est *implicite* si l'état (approché) x_{i+1} au temps $t_{i+1} > 0$ est solution d'une équation faisant intervenir $\phi(x_{i+1})$. Ainsi, dans le *schéma d'Euler implcite*, x_{i+1} est solution de l'équation non linéaire en x suivante :

$$\frac{x - x_i}{\delta_i} + \phi(x) = 0, \tag{9.24}$$

où $\delta_i := t_{i+1} - t_i > 0$ est un *pas de temps* que l'on se donne.

On cherche parfois une solution de l'équation non linéaire (9.24) par des itérations de Newton. Si δ_i est petit, l'*état précédent* x_i ou l'*état prédit*

$$x_i - \phi(x_i)\,\delta_i \quad \left[= x_i + \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}(t_i)\,\delta_i\right]$$

sont en général de bons points de départ pour ces itérations. Si la solution de l'équation différentielle (9.23) dépend continûment du temps, ces points de départ seront d'autant meilleurs que δ_i est petit (on calcule alors une approximation de $x(t_i+\delta_i)$, qui dépend du choix de δ_i). Un moyen d'obtenir la convergence des itérés de Newton est de prendre un pas de temps δ_i suffisamment petit et de le réduire si la convergence ne se produit pas en quelques itérations (10 par exemple).

Méthode du régime pseudo-transitoire

Bien que rappelant la section précédente par certains aspects, l'approche décrite ici est bien différente. L'idée est de chercher à calculer un zéro de F comme un *état stationnaire* (c.-à-d., ne dépendant pas du temps) de l'équation différentielle

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} + F(x) = 0, \quad x(0) = x_0. \tag{9.25}$$

On constate en effet qu'il y a une bijection entre les états stationnaires de (9.25) et les zéros de F. L'équation (9.25) rappelle l'équation différentielle (9.23), mais elle est introduite ici de manière artificielle. De plus, on n'est pas intéressé ici par l'évolution

de l'état $x(t)$, la solution de (9.25), au cours du temps fictif t, mais seulement par l'état asymptotique, lorsque $t \uparrow \infty$.

Observons que l'approche du régime pseudo-stationnaire n'est pas symétrique dans le sens suivant. Si l'équation non linéaire $F(x) = 0$ ne change pas si on remplace F par $-F$ (on garde les mêmes zéros), l'équation différentielle (9.25) est sensible au fait de remplacer F par son opposé. Par exemple, si F est donnée par (9.8) et $x_0 = 0$, on a $x(t) < 0$ pour tout $t > 0$ et la trajectoire s'écarte de l'unique état stationnaire $x_* = 1$ lorsque t augmente ; par contre si on change le signe de F, la trajectoire se dirige vers $x_* = 1$ lorsque $t \uparrow \infty$. Techniquement et pratiquement, la convergence de l'approche du régime transitoire ne pourra être garantie que si l'on peut faire l'hypothèse que la trajectoire issue de x_0 converge vers un zéro de F lorsque $t \uparrow \infty$.

Voici la méthode. Dans un premier temps, on discrétise l'équation différentielle (9.25) par un *schéma d'Euler implcite* : en l'itéré x_k ($k \geqslant 0$), on s'intéresse à la solution de l'équation non linéaire

$$\frac{x - x_k}{\delta_k} + F(x) = 0, \tag{9.26}$$

où $\delta_k > 0$ est un *pas de temps*. Le plus souvent, l'itéré suivant est obtenu en faisant une unique itération de Newton pour résoudre cette équation, ce qui conduit à prendre x_{k+1} qui vérifie

$$F(x_k) + \left[\delta_k^{-1} I + F'(x_k)\right](x_{k+1} - x_k) = 0.$$

Si $\delta_k^{-1} I + F'(x_k)$ est inversible, on obtient

$$x_{k+1} = x_k - \left[\delta_k^{-1} I + F'(x_k)\right]^{-1} F(x_k).$$

On retrouve l'algorithme de Newton lorsque $\delta_k = \infty$. Il est coutumier de choisir les pas de temps par des variantes de la règle suivante [408, 533, 329]

$$\delta_k = \frac{\|F(x_{k-1})\|}{\|F(x_k)\|}\,\delta_{k-1},$$

qui fait croître δ_k autant que $\|F(x_k)\|$ décroît. On peut aussi plafonner le pas de temps δ_k par $\delta_{\max} > 0$ si la valeur donnée par la formule précédente dépasse le seuil fixé $\delta_{\max}$ [314] ou le prendre infini dans les mêmes circonstances [181].

Il faut noter que dans l'approche du régime transitoire la suite $\{\|F(x_k)\|\}$ n'est pas nécessairement décroissante, ce qui permet parfois d'éviter les minima locaux de $\|F(\cdot)\|$, une propriété que n'ont pas la recherche linéaire et les régions de confiance.

Des conditions de convergence de cette technique sont données dans [328].

Méthodes de continuation

Les *méthodes de continuation* peuvent constituer une approche intéressante lorsque l'équation non linéaire à résoudre $F(x) = 0$ contient un paramètre $p \in \mathbb{R}$ qui peut atténuer la difficulté du problème lorsqu'on change sa valeur. De façon plus précise, l'équation originale correspond à la valeur $p = p_1$ du paramètre :

$$\forall x \in \mathbb{R}^n : \quad F(x) = \Phi(x, p_1),$$

où $\Phi : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}^n$, et le système

$$\Phi(x, p) = 0 \tag{9.27}$$

est « facile » à résoudre lorsque $p = p_0$ (que l'on va supposer $< p_1$). On note x_0 une solution (approchée) de (9.27) avec $p = p_0$. Un exemple typique en mécanique des fluides est celui des équations de Navier-Stokes, dans lesquelles le nombre de Reynolds peut jouer le rôle du paramètre p ci-dessus.

La version la plus simple des méthodes de continuation suppose qu'il existe une fonction implicite $p \in \mathbb{R} \mapsto x(p)$ telle que $\Phi(x(p), p) = 0$ pour tout $p \in [p_0, p_1]$ et elle cherche à suivre approximativement le chemin $x([p_0, p_1])$ en faisant croître progressivement p de p_0 à p_1. Connaissant une solution approchée x_i de (9.27) avec $p = p_i$ (indice i fractionnaire dans $[0, 1]$), un bon point de départ pour calculer une solution de (9.27) avec $p = p_{i+1}$ est obtenu par la *phase de prédiction* suivante :

$$x_{i+1}^0 = x_i + x'(p_i)(p_{i+1} - p_i).$$

On obtient la dérivée $x'(p)$ de la fonction implicite $p \mapsto x(p)$ en différentiant l'identité $\Phi(x(p), p) \equiv 0$ par rapport à p, ce qui donne

$$x'(p_i) = -\left(\frac{\partial \Phi}{\partial x}(x_i, p_i)\right)^{-1} \frac{\partial \Phi}{\partial p}(x_i, p_i).$$

On peut alors calculer le point de prédiction x_{i+1}^0 à partir duquel quelques itérations de Newton sur le système $\Phi(\cdot, p_{i+1}) = 0$ permettent de trouver x_{i+1}.

Le problème est plus compliqué si, le long du chemin suivi, on rencontre des points de bifurcation, de rebroussement, *etc.* Comme points d'entrée sur ce sujet à peine ébauché, citons [340, 541, 8, 9, 116].

Notes

Isaac Newton (1642-1727) était intéressé par le calcul de zéro de polynôme et sa méthode, exposée dans l'épigraphe de ce chapitre, était sensiblement différente de l'algorithme de Newton tel que nous le connaissons aujourd'hui, celui présenté à la section 9.1.1. Même si les itérés générés sont identiques dans les deux approches, celle de Newton ne s'étend pas aisément aux fonctions non polynomiales. Le texte donné en épigraphe est tiré de *Methodus fluxionum et serierum infinitorum*, qui fut écrit en latin entre 1664 et 1671, édité en anglais en 1736 ; l'algorithme fut également exposé dans *De analysi per aequationes numero terminorum infinitas*, ouvrage composé en 1669 mais seulement publié en 1711. [99]

On associe souvent le nom de *Joseph Raphson* (peut-être 1648-1712) à celui de Newton pour nommer l'algorithme 9.1. Raphson s'intéressait aussi au calcul de zéro de polynôme. Sa contribution, qui date de 1690 et 1697 [453], a été d'écrire l'algorithme sous la forme $x_{k+1} = \varphi(x_k)$, où la fonction rationnelle φ est construite à partir du polynôme considéré, mais sans faire intervenir sa dérivée. [335, 559]

Les apports de *Thomas Simpson* (1710-1761) à l'algorithme 9.1 ont trop souvent été oubliés. Ils furent pourtant essentiels. On peut en citer trois. Le premier est

d'avoir fait intervenir la dérivée de la fonction (qu'il appelle *fluxion*, comme Newton) dans le calcul du nouvel itéré, permettant ainsi d'appliquer l'algorithme à des fonctions non polynomiales, ce qu'il fit [493 ; 1740, p. 83-84]. Sa seconde contribution est d'avoir montré comment on pouvait utiliser l'algorithme pour résoudre un système de 2 équations à 2 inconnues, en résolvant un système linéaire dont la matrice est la jacobienne de la fonction en l'itéré courant [493 ; 1740, p. 82]. Enfin, il donne sans doute le premier exemple de maximisation d'une fonction de plusieurs variables sans contrainte, par recherche d'un zéro de son gradient [492 ; 1737]. [559]

Ypma [559] attribue l'absence de reconnaissance aux autres contributeurs à l'algorithme de Newton au livre influent de Fourier [205 ; 1831], lequel l'appelait la *méthode newtonienne*, sans faire référence à Raphson ou Simpson.

En 1939, Kantorovitch [318] a présenté un résultat préliminaire de convergence de l'algorithme de Newton, qu'il améliora substantiellement en 1948/49 [319, 320]. La version du théorème proposée (théorème 9.3, [155, 322]) est parfois qualifiée d'*invariante par transformation linéaire* (« affine invariant »), parce qu'elle est invariante lorsqu'on pré-compose F avec une application linéaire bijective (F devient $F \circ A$, avec A linéaire inversible), comme l'est l'algorithme de Newton (proposition 9.4). Les hypothèses du théorème de Kantorovitch sont plus fortes que celles d'autres théorèmes d'existence de zéro, tels que ceux de Miranda, de Moore, de Borsuk [6, 5] et d'autres théorèmes de point fixe, mais elles donnent aussi plus d'informations, à savoir la convergence des itérés de Newton et donc un moyen numérique de calculer le point fixe. Pour une revue de l'évolution de l'analyse de la convergence de l'algorithme de Newton, on pourra consulter [554].

Le premier exemple de système non linéaire $F(x) = 0$ pour lequel l'algorithme de Newton *avec recherche linéaire* génère des points convergeant vers un point singulier de F' qui n'est ni un zéro de F ni un point stationnaire de $\|F(\cdot)\|_2^2$ est dû à Powell [439 ; 1970]. Cet exemple a motivé l'introduction des méthodes à régions de confiance pour globaliser l'algorithme de Newton pour ces problèmes, approche qui ne présente pas le même inconvénient. En optimisation aussi, l'algorithme de Newton avec recherche linéaire (celle de Wolfe par exemple) présente le même type de défaut : il peut générer des itérés x_k convergeant vers un point où le gradient n'est pas nul, alors que la hessienne est définie positive en tout itéré [381 ; 2008].

Le comportement de l'algorithme de Newton pour résoudre un système d'équations non linéaires dont la jacobienne est singulière en la solution a souvent été exploré, notamment en dimension un [558]. La revue de Griewank [265 ; 1985] considère le cas multidimensionnel et présente quelques modifications de la méthode de Newton pour faire face aux problèmes de convergence et de stabilité numérique que cette singularité entraîne ; mentionnons une technique de *sur-relaxation*, dans laquelle $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$, où d_k est la direction de Newton et le pas α_k est pris dans l'intervalle $[1, 2[$. Une autre possibilité, explorée par Schnabel et ses collaborateurs [71 ; 1998], sont les méthodes dites *tensorielles*, dans lesquelles on ajoute à l'approximation linéaire de F, quelques termes d'ordre 2 (des tenseurs), qui sont approchés par des techniques quasi-newtoniennes.

Les *méthodes de Newton inexactes* ont été beaucoup étudiées, car elles sont très utilisées pour résoudre les grands systèmes non linéaires issus de la discrétisation d'équations aux dérivées partielles. L'article fondateur est [148 ; 1982] et on trouvera de nombreux articles de synthèse et de monographies sur cette question (par

exemple [331]). Pour la proposition 9.9, nous avons repris les arguments de [171], eux-mêmes inspirés de [426, 281], qui considèrent la situation plus complexe d'équation non lisse. L'*algorithme de Newton tronqué* décrit à la section 9.3.1, qui s'inscrit dans la veine des méthodes inexactes, est dû à Dembo et Steihaug [149 ; 1983].

L'effet de l'arithmétique flottante sur l'algorithme de Newton a été étudié par divers auteurs ; citons Dennis et Walker [153 ; 1984] et Tisseur [517 ; 2001].

L'extension de l'algorithme de Newton à la résolution du système d'équations non linéaires $F(x) = 0$ dans lequel F est *non différentiable* s'est faite suivant plusieurs directions. Le cas des fonctions C^1 par morceaux est analysé par Kojima et Shindo [334 ; 1986] qui montrent que la convergence quadratique locale est préservée par l'algorithme qui utlise une quelconque des jacobiennes des fonctions actives au point courant, pourvu que soient vérifiées des hypothèses naturelles (au vu du théorème 9.2) incluant l'inversibilité des jacobiennes des fonctions actives en la solution ; nous ne connaissons pas de résultat de convergence globale pour cet algorithme. On a ensuite étudié le cas fréquemment rencontré des *fonctions B-différentiables*, qui sont celles qui vérifient l'estimation (C.9) des fonctions Fréchet-différentiables, mais avec une application $h \mapsto Lh \equiv F'(x)h$ qui n'est plus que positivement homogène de degré 1 (on perd la linéarité). Des résultats de convergence locale et globale par recherche linéaire peuvent être obtnus [425 ; 1990], mais l'équation de Newton à résoudre à chaque itération, $F(x) + F'(x)d = 0$, est cette fois non linéaire, ce qui complique l'algorithme. Le cas où F est *semi-lisse* a commencé a être exploré par Qi et Sun [452 ; 1993], qui ont proposé un algorithme ne requérant que la résolution d'un système linéaire à chaque itération, ce qui est attractif, mais dont la globalisation de la convergence est plus difficile à mettre au point. On pourra lire sur ce thème la synthèse très complète de Facchinei et Pang [184], qui appliquent les algorithmes présentés à la résolution des *problèmes de complémentarité* ou d'*inéquations variationnelles*.

Une extension de l'algorithme de Newton à la recherche de zéro de fonction non lisse, avec zéro non isolé et en présence de contrainte est proposée dans [183 ; 2014].

Autres monographies sur l'algorithme de Newton : Kelley [325, 326, 327 ; 1995-2003], dont la dernière référence contient de nombreux conseils sur la mise en œuvre et le contrôle de l'algorithme ; Higham [291 ; 2002, § 2.5] donne une analyse d'erreur ; Deuflhard [154 ; 2004] décrit l'utilisation des algorithmes de Newton dans la résolution de problèmes gouvernés par des équations différentielles ; Dedieu [145 ; 2006] présente la théorie en dimension infinie (avec des résultats de Smale) ; Argyros [16 ; 2008] ; Ulbrich [524 ; 2011] fait une synthèse en dimension infinie sur la méthode de Newton semi-lisse, Izmailov and Soldov [308 ; 2014] traitent des problèmes d'optimisation et d'inéquations variationnelles.

Exercices

9.1. Montrez qu'en un point non stationnaire, lorsqu'elle est bien définie, la direction de Newton pour minimiser f est une direction de descente de $x \mapsto \varphi(x) := \|\nabla f(x)\|$, où $\|\cdot\|$ est une norme quelconque.

Remarque. On sait qu'au contraire la direction de Newton n'est pas nécessairement une direction de descente de f en un point éloigné d'une solution forte. On pourrait donc penser qu'il est préférable de globaliser la méthode de Newton en cherchant à minimiser φ. Il n'en est rien. Cela vient du fait que φ est moins bien conditionnée

que f (pensez au cas quadratique), si bien que loin d'une solution le pas accepté par φ peut être très petit, au point d'empêcher tout progrès significatif vers la solution.

9.2. On considère l'algorithme de Newton pour résoudre l'équation non linéaire $F(x) = 0$, où $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ est $\mathcal{C}^{1,1}$ dans le voisinage de x_*, une solution telle que $F'(x_*)$ soit inversible. Pour mesurer le progrès vers la solution, on utilise la fonction $x \mapsto \varphi(x) := \|F(x)\|$, où $\|\cdot\|$ est une norme quelconque. Montrez que le pas unité le long de la direction de Newton $d = -F'(x)^{-1}F(x)$ est accepté localement par l'inégalité d'Armijo : si x est voisin de x_* et $\omega \in]0, 1[$, on a $\varphi(x + d) \leqslant \varphi(x) + \omega\varphi'(x; d)$.

Montrez qu'il en est de même si $\varphi(x) = \|F(x)\|^p$, avec $p \geqslant 1$ (norme arbitraire).

9.3. *Lignes de flux de Newton.* On considère le problème de la minimisation d'une fonction $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$. Les *lignes de flux de Newton* sont les courbes $t \mapsto x(t)$, solutions de l'équation différentielle

$$\dot{x} = -H(x)^{-1}g(x), \qquad x(0) = x_0,$$

où $\dot{x}$ désigne la dérivée de $x(\cdot)$ par rapport à t, $H(x) := \nabla^2 f(x)$ est supposé inversible aux points visités $x(t)$, $g(x) := \nabla f(x)$ et x_0 est une condition initiale arbitraire. Ces courbes ont des propriétés remarquables dont certaines sont aisées à vérifier.

1) Le gradient le long d'une ligne de flux vérifie $g(x(t)) = e^{-t}g(x_0)$ et donc, si $g(x_0) \neq 0$, le gradient normalisé $g(x)/\|g(x)\|$ y est constant (la norme $\|\cdot\|$ est arbitraire).

Soient $x_0 \in \mathbb{R}$ et $\mathcal{N}_0 := \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leqslant f(x_0)\}$. On suppose à présent que $H(x) \succ 0$ pour tout $x \in \mathcal{N}_0$ et qu'il existe un point $x_* \in \mathcal{N}_0$ tel que $\nabla f(x_*) = 0$.

2) Montrez que $\lim_{t\to\infty} x(t) = x_*$.
3) Montrez que $\lim_{t\to\infty} e^t\dot{x}(t) = -H(x^*)^{-1}g(x_0)$.
4) Montrez que l'application $x \in \mathcal{N}_0 \mapsto g(x)$ est injective.

On se donne à présent une autre fonction $\tilde{f} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ telle que $\nabla^2\tilde{f}(x) \succ 0$ pour $x \in \mathcal{N}_0$ et qui ne diffère de f que sur un ouvert $\Omega := \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \neq \tilde{f}(x)\}$ tel que $x_0 \notin \overline{\Omega}$. On note $\tilde{x} : [0, +\infty[\mapsto \mathbb{R}^n$ la ligne de flux de Newton associée à $\tilde{f}$, issue de $x_0 := \tilde{x}(0)$.

5) Montrez que $\tilde{x}(t) = x(t)$ si $x(t) \notin \Omega$ ou si $\tilde{x}(t) \notin \Omega$.

Conclusion. On a donc le résultat étonnant suivant : le flux de Newton associé à une perturbation modérée $\tilde{f}$ de f (telle que $\nabla^2\tilde{f}(x) \succ 0$) n'est différent de celui associé à f qu'aux points x tels que $f(x) \neq \tilde{f}(x)$. Dès lors, après la zone perturbée, le flux de Newton recolle au flux de la fonction non perturbée.

10 Algorithmes de quasi-Newton

The key ideas that led me to the development of variable-metric algorithms were 1) to update a metric in the space of gradients during the search for an optimum, rather than waiting until the search was over, and 2) to accelerate convergence by using each updated metric to choose the next search direction.

W.C. Davidon, dans la nouvelle introduction de son article fondateur des méthodes de quasi-Newton, écrit en 1959, mais qui ne fut publié qu'en 1991, lors de la parution du premier numéro de la revue *SIAM Journal on Optimization* [141, 142].

I was able to minimize some nonquadratic functions of 100 variables by Davidon's method in 1962. I mentioned this fact at a meeting that was held at Imperial College then, but this remark was impromptu, it was made in a discussion that included the view from a senior person that 10-variable problems were usually too difficult and I was nervous.

M.J.D. Powell [445 ; 2003].

Dans ce chapitre, on s'intéresse à la résolution du problème d'optimisation sans contrainte

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

par des algorithmes à directions de descente particuliers. On note $\{x_k\}_{k\geqslant 1}$ la suite des itérés et $g_k = \nabla f(x_k)$ le gradient de f en x_k. Les itérés sont donc générés par la récurrence

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

où le pas $\alpha_k > 0$ est déterminé par recherche linéaire (section 6.3) et d_k est une direction de descente. Dans les méthodes de quasi-Newton, d_k est de la forme

$$d_k = -M_k^{-1} g_k. \tag{10.1}$$

Si $M_k = \nabla^2 f(x_k)$, on retrouve la méthode de Newton, si bien que le nom donné aux méthodes décrites ci-dessous apparaît naturel. Cependant, tout algorithme ayant une direction de descente de la forme (10.1) ne se retrouve pas pour autant dans cette classe de méthodes. Le qualificatif *quasi-Newton* fait en effet référence à un ensemble

de techniques mises au point à partir des années 1960 permettant de générer les matrices M_k à partir des gradients g_k.

Dans beaucoup de problèmes, on cherche à éviter le calcul des dérivées secondes, pour les raisons suivantes :

- l'évaluation de $\nabla^2 f(x_k)$ ou le produit de cete hessienne par un vecteur comme dans l'algorithme de Newton tronqué (section 9.3.1) peut demander trop de temps de calcul,
- on ne dispose pas toujours des dérivées secondes et leur calcul peut demander un investissement humain trop important, alors que l'on voudrait obtenir un résultat rapidement par des algorithmes peut-être plus lents que l'algorithme de Newton mais ne demandant que le calcul des dérivées premières,
- la fonction peut ne pas être deux fois dérivable,
- on ne dispose pas de place mémoire pour stocker les $O(n^2)$ éléments d'une matrice (c'est la moins bonne des raisons, voir section 9.3.1).

Ce sont des situations dans lesquelles les algorithmes de quasi-Newton sont très utiles. Dans ceux-ci, la matrice M_k dans (10.1) n'est pas égale à $\nabla^2 f(x_k)$, mais est générée par des formules qui cherchent à ce que cette matrice soit proche de la hessienne de f. On parle de *formules de mise à jour*. Celles-ci ne font intervenir que les dérivées premières de f. C'est en utilisant la variation du gradient de f d'une itération à l'autre que ces formules permettent d'engranger de l'information sur la hessienne.

Dans ce chapitre, on se propose d'introduire et d'étudier ces formules de mise à jour et les algorithmes de quasi-Newton qui les utilisent. Voici quelques propriétés de ces algorithmes.

- Localement (proche d'une solution), les algorithmes de quasi-Newton convergent moins rapidement que l'algorithme de Newton. Dans les implémentations correctes, les itérés convergent toutefois q-superlinéairement.
- Chaque itération demande moins de calcul au simulateur que dans l'algorithme de Newton : il ne faut pas évaluer les dérivées secondes.
- Dans leur version standard, ces algorithmes peuvent être utilisés pour un nombre de variables qui n'est pas trop grand, disons $n \leqslant 500$ pour fixer les idées. Cette borne sur n vient d'une part du coup de l'itération (de l'ordre de $O(n^2)$ opérations dans l'optimiseur) et du fait que les algorithmes deviennent plus lents lorsque n augmente. Notons qu'il existe des adaptations de ces algorithmes quasi-newtoniens pouvant être utilisées pour résoudre des problèmes de très grande taille, avec plusieurs millions de variables, par exemple. Ces méthodes sont dites *à mémoire limitée* car elles ne demandent pas que l'on garde M_k en mémoire. L'algorithme ℓ-BFGS de la section 10.2.5 est de ce type. Il est très utilisé.

Hypothèse générale à ce chapitre. Nous développerons la théorie lorsque le produit scalaire que l'on se donne sur $\mathbb{R}^n$ est le produit scalaire euclidien : $(u, v) \mapsto u^{\mathsf{T}} v$. Dans ce cas, $\nabla f(x)$ est le vecteur des dérivées partielles de f. On peut se placer dans un cadre plus général en ne faisant aucune hypothèse sur le produit scalaire $(u, v) \mapsto \langle u, v \rangle$ utilisé. Il faut alors utiliser le produit tensoriel associé $(u, v) \mapsto u \otimes v$, où $(u \otimes v)$ est la matrice d'ordre n définie par

$$(u \otimes v)d := \langle v, d \rangle \, u, \quad \text{pour tout } d \in \mathbb{R}^n.$$

Pour obtenir des formules de mise à jour tenant compte du produit scalaire utilisé (et donc du préconditionnement que cela implique), il suffit le plus souvent de remplacer dans les formules obtenues une matrice de la forme uv^T par la matrice $u \otimes v$. Voir par exemple [226] et ses références pour plus détails.

10.1 Système d'équations

10.1.1 Formules de mise à jour

10.1.2 Convergence linéaire locale

Lemme 10.1 (détérioration bornée)

Démonstration. □

10.2 Optimisation

10.2.1 Formules de mise à jour

Principes

Supposons que M_k soit connue et cherchons quelle valeur donner à M_{k+1} pour que cette matrice approche $\nabla^2 f(x_{k+1})$. On cherche à ce que M_{k+1} soit proche de la hessienne de f pour que l'algorithme hérite des bonnes propriétés de convergence locale de l'algorithme de Newton.

Soient

$$s_k := x_{k+1} - x_k \quad \text{et} \quad y_k := g_{k+1} - g_k,$$

où $g_k = \nabla f(x_k)$ comme d'habitude. Le développement de Taylor avec reste intégral s'écrit

$$y_k = \left(\int_0^1 \nabla^2 f(x_k + t s_k) \, \mathrm{d}t \right) s_k.$$

Si on veut que la nouvelle matrice M_{k+1} approche la hessienne de f, il semble raisonnable de lui imposer de satisfaire l'équation vérifiée par la hessienne *moyenne* $\int_0^1 \nabla^2 f(x_k + t s_k) \, \mathrm{d}t$, à savoir

$$y_k = M_{k+1} s_k. \tag{10.2}$$

Cette relation porte le nom d'*équation de quasi-Newton*. D'autre part, comme la hessienne de f est symétrique, il est normal d'imposer également cette propriété à M_{k+1} :

$$M_{k+1} = M_{k+1}^\mathsf{T}. \tag{10.3}$$

Rien n'assure a priori que cette idée simple d'imposer à M_{k+1} de vérifier des propriétés facilement exprimable de la hessienne moyenne donnera une matrice avec de bonnes propriétés, mais l'expérience a montré que l'inspiration est excellente.

Si $n > 1$, les conditions (10.2) et (10.3) ne suffisent pas pour déterminer M_{k+1} : il y a $n(n+1)/2$ inconnues et n équations seulement. Ce manque de conditions laisse une liberté dont ne se sont pas privé les spécialistes en optimisation numérique. Les années 1960-80 ont vu ainsi naître de nombreuses formules de mise à jour. Les plus importantes en optimisation sont la formule SR1 et la formule de BFGS.

Avant d'introduire ces formules, notons que lorsque $n = 1$, les conditions (10.2) et (10.3) déterminent M_{k+1}, qui est le scalaire y_k/s_k (on suppose $x_{k+1} \neq x_k$). L'algorithme de quasi-Newton avec pas unité associé donne (en décalant les indices d'une unité et en supposant $g_{k-1} \neq g_k$ et $g_k \neq 0$) :

$$x_{k+1} = x_k - \frac{s_{k-1}}{y_{k-1}} g_k \qquad \text{ou} \qquad \frac{x_k - x_{k+1}}{g_k - 0} = \frac{x_{k-1} - x_k}{g_{k-1} - g_k}.$$

On reconnaît l'*algorithme de la sécante*. Les méthodes de quasi-Newton portent d'ailleurs parfois ce nom. La figure 10.1 rappelle ce qu'est l'algorithme de la sécante en

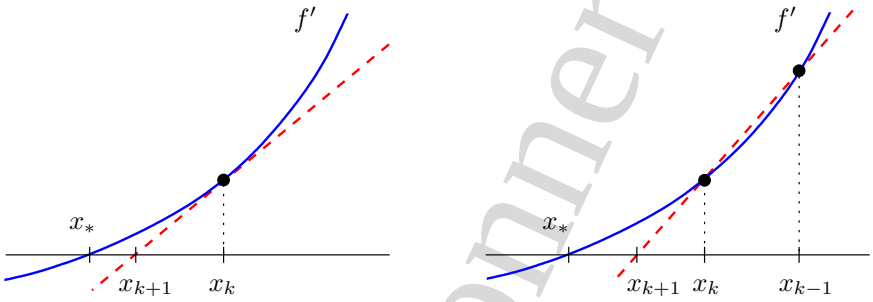


Fig. 10.1. Comparaison des algorithmes de Newton (à gauche) et de quasi-Newton (à droite) lorsque $n = 1$

dimension 1 et le compare à l'algorithme de Newton lorsque l'on cherche à minimiser une fonction $x \in \mathbb{R} \mapsto f(x) \in \mathbb{R}$ en annulant sa dérivée. Dans l'algorithme de Newton (à gauche), le nouvel itéré x_{k+1} est obtenu en calculant l'intersection avec l'axe des abscisses de la droite tangente à la courbe $x \mapsto f'(x)$ en $(x_k, f'(x_k))$ (c'est le zéro de la fonction f' linéarisée en x_k), tandis que dans l'algorithme de la sécante (à droite), on prend l'intersection du même axe avec la droite passant par $(x_{k-1}, f'(x_{k-1}))$ et $(x_k, f'(x_k))$. Dans ce dernier algorithme, on ne doit pas linéariser f' (c'est-à-dire calculer la dérivée seconde de f), mais on doit utiliser la valeur de f' aux deux points x_{k-1} et x_k.

Formule SR1 ⊖

Une première idée est de rechercher parmi les matrices vérifiant (10.2) et (10.3), une matrice M_{k+1} suffisamment proche de M_k en imposant que la différence entre les deux matrices soit de rang 1. On prend une correction de faible rang de manière à assurer une certaine stabilité à la suite $\{M_k\}$. Il semble en effet raisonnable de souhaiter que ces matrices n'oscillent pas trop au cours des itérations.

On cherche donc une mise à jour de la forme

$$M_{k+1} = M_k + uv^\mathsf{T},$$

où u et v sont deux vecteurs de $\mathbb{R}^n$ à déterminer. Si on veut que M_{k+1} vérifie l'équation de quasi-Newton (10.2), il faut que u et v satisfassent

$$y_k = M_k s_k + (v^\mathsf{T} s_k)u.$$

Si $v^\mathsf{T} s_k = 0$, soit M_k vérifie déjà l'équation de quasi-Newton, soit une correction de rang 1 de M_k ne permet pas d'obtenir une matrice vérifiant cette équation. Si $v^\mathsf{T} s_k \neq 0$, la relation ci-dessus permet de déterminer u, ce qui conduit à

$$M_{k+1} = M_k + \frac{(y_k - M_k s_k)v^\mathsf{T}}{v^\mathsf{T} s_k}.$$

Pour que M_{k+1} soit symétrique (on suppose que M_k l'est), il faut donc prendre $v = y_k - M_k s_k$, ce qui donne

$$\boxed{M_{k+1} = M_k + \frac{(y_k - M_k s_k)(y_k - M_k s_k)^\mathsf{T}}{(y_k - M_k s_k)^\mathsf{T} s_k}.} \tag{10.4}$$

Cette formule porte le nom de *formule SR1* (Symétrique de Rang 1). Elle n'est bien définie que si $(y_k - M_k s_k)^\mathsf{T} s_k \neq 0$. En pratique, cela nécessite l'utilisation de garde-fous corrigeant le dénominateur dans (10.4) s'il est trop petit. La formule SR1 est souvent utilisée lorsqu'il n'est pas possible ou qu'il n'est pas nécessaire que M_{k+1} soit définie positive. Si cette propriété est souhaitable, on recourt à la formule de BFGS décrite ci-après, laquelle a de meilleures propriétés que la formule SR1.

Formule de BFGS

Une autre manière d'imposer à M_{k+1} d'être proche de M_k est de minimiser l'« écart » entre M_{k+1} et M_k, toujours en requérant que M_{k+1} soit symétrique et vérifie l'équation de quasi-Newton (10.2). On est donc conduit à considérer le problème en la variable matricielle $M \in \mathbb{R}^{n\times n}$ suivant :

$$\begin{cases} \min \ \text{« écart »}(M, M_k) \\ y_k = M s_k \\ M = M^\mathsf{T}. \end{cases} \tag{10.5}$$

On dit alors que la matrice est obtenue par une *approche variationnelle*. La fonction « écart » utilisée dans ce problème est spécifiée ci-dessous.

Il est souvent intéressant d'imposer également la définie positivité des matrices M_k. En effet, dans ce cas, d_k donnée par (10.1) est une direction de descente de f en x_k. Cette exigence n'est pas dépourvue de fondement puisque M_k doit approcher $\nabla^2 f(x_*)$ qui est semi-définie positive en la solution et définie positive en des solutions fortes (celles vérifiant les conditions d'optimalité du second ordre).

Pour obtenir des matrices ayant cette propriété de définie positivité, il ne suffit pas d'ajouter cette contrainte au problème (10.5). En effet, le cône $\mathcal{S}^n_{++}$ des matrices symétriques définies positives est un ouvert dans l'espace vectoriel des matrices $\mathbb{R}^{n\times n}$, si bien qu'avec cette contrainte additionnelle, (10.5) peut ne pas avoir de solution.

Imposer la semi-définie positivité (on a alors un fermé) n'est pas satisfaisant non plus, car M_{k+1} ne serait pas nécessairement inversible et d_k ne serait pas bien défini par (10.1). On va donc chercher à ce que ce soit le critère dans (10.5) qui impose la définie positivité de la matrice solution.

Dans ce but, on commence par introduire une fonction $\psi : \mathcal{S}^n \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$, dont le domaine est $\mathcal{S}^n_{++}$ et qui forme une « barrière » au bord du cône $\mathcal{S}^n_{++}$ (elle tend vers l'infini lorsque son argument se rapproche du bord de $\mathcal{S}^n_{++}$) ainsi qu'à l'infini :

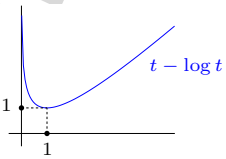
$$\psi(M) = \operatorname{tr} M + \operatorname{ld} M, \tag{10.6}$$

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

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

Les propriétés annoncées de ψ peuvent se voir sur son expression suivante. Si on note $\{\lambda_i\}$ les valeurs propres de M, on a $\operatorname{tr} M = \sum_{i=1}^n \lambda_i$, $\det M = \prod_{i=1}^n \lambda_i$ et donc

$$\psi(M) = \sum_{i=1}^n (\lambda_i - \log \lambda_i), \quad \text{si } M \in \mathcal{S}^n_{++}. \tag{10.7}$$



Étant donné l'allure de la fonction $t \in \mathbb{R}_{++} \mapsto t - \log t$, $\psi(M)$ tend vers l'infini si l'une des valeurs propres de M tend vers zéro ou vers l'infini.

La formule (10.7) montre aussi que l'unique minimiseur de ψ est la matrice identité ($\lambda_i = 1$ pour tout i). Afin de minimiser l'écart entre M et M_k, on va chercher à ce que $M_k^{-1/2} M M_k^{-1/2}$ soit proche de I. Ceci peut être obtenu en minimisant $\psi(M_k^{-1/2} M M_k^{-1/2})$. On est donc conduit à résoudre le problème suivant sur l'espace vectoriel $\mathcal{S}^n$ des matrices symétriques :

$$\begin{cases} \min\ \psi(M_k^{-1/2} M M_k^{-1/2}) \\ y_k = M s_k \\ M \in \mathcal{S}^n_{++} \quad \text{(contrainte implicite)}. \end{cases} \tag{10.8}$$

Si $s_k = 0$, de deux choses l'une : soit $y_k \neq 0$ et le problème ci-dessus n'a pas de solution (son ensemble admissible est vide), soit $y_k = 0$ et sa solution est M_k (ψ prend alors sa valeur minimale n sur $\mathcal{S}^n_{++}$). Le cas non trivial où $s_k \neq 0$ est examiné dans la proposition suivante.

Proposition 10.2 *Supposons que M_k soit symétrique définie positive et que $s_k \neq 0$. Alors, le problème (10.8) a une solution si, et seulement si, $y_k^{\mathsf{T}} s_k > 0$. Sous cette condition la solution M_{k+1} de (10.8) est unique et est donnée par l'une des formules suivantes :*

$$M_{k+1} = M_k + \frac{y_k y_k^\mathsf{T}}{y_k^\mathsf{T} s_k} - \frac{M_k s_k s_k^\mathsf{T} M_k}{s_k^\mathsf{T} M_k s_k}, \tag{10.9}$$

$$W_{k+1} = \left(I - \frac{s_k y_k^\mathsf{T}}{y_k^\mathsf{T} s_k}\right) W_k \left(I - \frac{y_k s_k^\mathsf{T}}{y_k^\mathsf{T} s_k}\right) + \frac{s_k s_k^\mathsf{T}}{y_k^\mathsf{T} s_k}, \tag{10.10}$$

où on a noté $W_k := M_k^{-1}$ *et* $W_{k+1} := M_{k+1}^{-1}$.

Démonstration. D'abord, il est clair que si (10.8) a une solution M_{k+1}, qui est une matrice symétrique définie positive, on a $y_k^\mathsf{T} s_k = s_k^\mathsf{T} M_{k+1} s_k > 0$. On suppose dorénavant que $y_k^\mathsf{T} s_k > 0$.

Montrons d'abord que le problème (10.8) a au plus une solution. L'ensemble admissible de (10.8) étant clairement convexe, il suffit de vérifier que ψ est strictement convexe, ce que l'on fait en calculant ses dérivées secondes. Rappelons que, pour une matrice inversible A, $\det'(A) \cdot H = (\det A)\,\mathrm{tr}(A^{-1}H)$. Alors, pour tout $M \in \mathcal{S}_{++}^n$ et tout $H \in \mathcal{S}^n$ non nul, on a avec $W := M^{-1}$:

$$\psi'(M) \cdot H = \mathrm{tr}\, H - \mathrm{tr}(WH),$$

$$\psi''(M) \cdot H^2 = \mathrm{tr}(W^{1/2} H W^{1/2})(W^{1/2} H W^{1/2}) > 0.$$

On achève la démonstration en calculant explicitement la solution $M = M_{k+1}$ de (10.8) au moyen des conditions d'optimalité du premier ordre. On travaille dans l'espace vectoriel $\mathcal{S}^n$ des matrices symétriques d'ordre n, muni du produit scalaire $\langle A, B\rangle = \mathrm{tr}\, AB$. On note $\lambda \in \mathbb{R}^n$ le multiplicateur de Lagrange associé à la contrainte affine de (10.8), si bien que le lagrangien s'écrit

$$\ell(M, \lambda) = \psi(W_k^{1/2} M W_k^{1/2}) + \lambda^\mathsf{T}(y_k - M s_k).$$

On cherche $M \in \mathcal{S}_{++}^n$ telle que pour tout $H \in \mathcal{S}^n$ la dérivée directionnelle de ℓ en M dans la direction H soit nulle, c'est-à-dire

$$\mathrm{tr}(W_k^{1/2} H W_k^{1/2}) - \mathrm{tr}(M_k^{1/2} W M_k^{1/2})(W_k^{1/2} H W_k^{1/2}) - \lambda^\mathsf{T} H s_k = 0.$$

En utilisant la relation $\mathrm{tr}(AB) = \mathrm{tr}(BA)$, on obtient pour tout $H \in \mathcal{S}^n$:

$$0 = \mathrm{tr}(W_k H) - \mathrm{tr}(WH) - \mathrm{tr}(s_k \lambda^\mathsf{T} H) = \mathrm{tr}\left(\left[W_k - W - \frac{s_k \lambda^\mathsf{T} + \lambda s_k^\mathsf{T}}{2}\right] H\right).$$

Comme le facteur de H ci-dessus est dans $\mathcal{S}^n$, on a

$$W = W_k - \frac{s_k \lambda^\mathsf{T} + \lambda s_k^\mathsf{T}}{2}.$$

Pour calculer λ, on utilise l'équation de quasi-Newton, qui donne

$$s_k = W_k y_k - \frac{y_k^\mathsf{T}\lambda}{2} s_k - \frac{y_k^\mathsf{T} s_k}{2}\lambda.$$

En prenant le produit scalaire avec y_k et en utilisant le fait que $y_k^\mathsf{T} s_k \neq 0$, on trouve $y_k^\mathsf{T}\lambda = y_k^\mathsf{T}(W_k y_k - s_k)/(y_k^\mathsf{T} s_k)$ qui, injecté dans la relation ci-dessus, fournit la valeur du multiplicateur

$$\lambda = \frac{-2}{y_k^\mathsf{T} s_k}(s_k - W_k y_k) + \frac{y_k^\mathsf{T}(s_k - W_k y_k)}{(y_k^\mathsf{T} s_k)^2} s_k.$$

En utilisant celle-ci dans la formule de W ci-dessus, on trouve l'expression de W_{k+1} suivante

$$W_{k+1} = W_k + \frac{(s_k - W_k y_k)s_k^\mathsf{T} + s_k(s_k - W_k y_k)^\mathsf{T}}{y_k^\mathsf{T} s_k} - \frac{y_k^\mathsf{T}(s_k - W_k y_k)}{(y_k^\mathsf{T} s_k)^2} s_k s_k^\mathsf{T}. \quad (10.11)$$

Par un calcul laborieux, mais mécanique, on vérifie que cette formule est équivalente à (10.10) et que M_{k+1} donné par (10.9) est bien l'inverse de W_{k+1} donné par (10.10) (il suffit de vérifier que $M_{k+1}W_{k+1} = I$).

Il reste à montrer que la matrice obtenue est bien dans $\mathcal{S}^n_{++}$ (le problème (10.8) a des points stationnaires en dehors de cet ensemble), si $y_k^\mathsf{T} s_k > 0$. Pour un vecteur $v \in \mathbb{R}^n$ arbitraire, la formule (10.9) donne

$$v^\mathsf{T} M_{k+1} v = v^\mathsf{T} M_k v - \frac{(s_k^\mathsf{T} M_k v)^2}{s_k^\mathsf{T} M_k s_k} + \frac{(y_k^\mathsf{T} v)^2}{y_k^\mathsf{T} s_k}.$$

Le dernier terme est positif. On voit qu'il en est de même de la somme des deux premiers termes, car d'après l'inégalité de Cauchy-Schwarz

$$(s_k^\mathsf{T} M_k v)^2 \leqslant \|M_k^{1/2} s_k\|_2^2 \, \|M_k^{1/2} v\|_2^2 = (s_k^\mathsf{T} M_k s_k)(v^\mathsf{T} M_k v).$$

Donc $v^\mathsf{T} M_{k+1} v \geqslant 0$ et ce produit ne peut être nul que si $v \perp y_k$ et $v \parallel s_k$, ce qui n'est vrai que si $v = 0$, car $y_k^\mathsf{T} s_k > 0$. □

Les formules (10.9) et (10.10) portent le nom de *formules de BFGS* directe et inverse. L'appellation BFGS vient des initiales des auteurs (Broyden, Fletcher, Goldfarb et Shanno) qui ont proposé cette formule dans des articles parus en 1970 [84, 194, 238, 487]. On notera les formules (10.9) et (10.10) de la manière suivante :

$$M_{k+1} = \mathrm{BFGS}(M_k, y_k, s_k) \quad \text{et} \quad W_{k+1} = \overline{\mathrm{BFGS}}(W_k, y_k, s_k).$$

Notons que la première de ces formules peut aussi s'écrire sous la forme de produits de matrices [80, 239] :

$$M_{k+1} = \left(I + v_k \bar{s}_k^\mathsf{T}\right) M_k \left(I + \bar{s}_k v_k^\mathsf{T}\right),$$

où $v_k := -M\bar{s}_k + \bar{y}_k$, $\bar{s}_k := s_k/(s_k^\mathsf{T} M_k s_k)^{1/2}$ et $\bar{y}_k := y_k/(y_k^\mathsf{T} s_k)^{1/2}$. Observons enfin que les corrections $M_{k+1} - M_k$ et $W_{k+1} - W_k$ apportées par la formule de BFGS sont des matrices de rang 2.

La proposition 10.2 a pour corollaire immédiat que si $s \neq 0$

$$\exists\, M \in \mathcal{S}^n_{++} : y = Ms \quad \Longleftrightarrow \quad y^\mathsf{T} s > 0. \tag{10.12}$$

Cette proposition a une extension naturelle au cas où l'on impose plus d'une équation de quasi-Newton, qui doivent toutefois être compatibles : $M \in \mathcal{S}^n_{++}$ doit vérifier $Y = MS$, où Y, $S \in \mathbb{R}^{n\times p}$ et S est *injective* (voir l'exercice 10.1). L'équivalence (10.12) devient alors

$$\exists\, M \in \mathcal{S}^n_{++} : Y = MS \quad \Longleftrightarrow \quad Y^\mathsf{T} S \in \mathcal{S}^n_{++}.$$

On utilise rarement une formule de mise à jour qui génère une matrice M vérifiant le système $Y = MS$ rassemblant plus d'une équation de quasi-Newton, car on ne sait pas comment satisfaire la condition $Y^\mathsf{T} S \succ 0$ qui assure la définie positivité de M. La situation est différente si l'on n'a qu'une seule équation de quasi-Newton à satisfaire, car nous verrons qu'il est aisé de vérifier la condition $y^\mathsf{T} s > 0$ apparaissant dans (10.12) (voir la section 10.2.2).

Propriétés algébriques ⊖

Voici une propriété de la formule de BFGS qui justifie l'utilisation de cette formule pour construire des préconditionneurs symétriques définis positifs de systèmes linéaires. Elle nous apprend que, si au cours de la minimisation d'une fonction quadratique strictement convexe sur $\mathbb{R}^n$ par l'algorithme du gradient conjugué, on met à jour une matrice par le formule de BFGS (resp. par la formule de BFGS inverse), en utilisant les couples (Au_i, u_i) formés à partir des directions conjuguées u_i, la matrice obtenue après n itérations est la hessienne de la fonction minimisée (resp. son inverse).

Proposition 10.3 *Soit A une matrice symétrique et $u_1, \ldots, u_p$ des directions non nulles, conjuguées par rapport à cette matrice (c'est-à-dire : $u_i^\mathsf{T} A u_j = 0$, pour $i \neq j$ et $u_i^\mathsf{T} A u_i > 0$). On se donne une matrice M_1 symétrique définie positive et on définit $M_{i+1} = \mathrm{BFGS}(M_i, Au_i, u_i)$, pour $i = 1, \ldots, p$. Alors,*
(i) $M_{k+1} u_i = Au_i$, pour $k = 1, \ldots, p$ et $i = 1, \ldots, k$,
(ii) si $p = n$, on a $M_{n+1} = A$.

Démonstration. La première propriété se démontre par récurrence. Elle est vérifiée pour $k = 1$: $M_2 u_1 = Au_1$ (c'est l'équation de quasi-Newton vérifiée par M_2). Supposons qu'elle le soit pour un $k = 1, \ldots, l-1$, avec $2 \leqslant l \leqslant p$, et démontrons la pour $k = l$. Soit $1 \leqslant i < l$. Par conjugaison et récurrence, $u_l^\mathsf{T} A u_i = 0$ et $u_l^\mathsf{T} M_l u_i = u_l^\mathsf{T} A u_i = 0$. Dès lors, la formule de BFGS (10.9) donne $M_{l+1} u_i = M_l u_i = Au_i$. Si $i = l$, on a $M_{l+1} u_i = Au_i$ (c'est l'équation de quasi-Newton vérifiée par M_{l+1}).

Si $p = n$, M_{n+1} prend la même valeur que A sur les n vecteurs linéairement indépendants $u_1, \ldots, u_n$. Donc $M_{n+1} = A$. □

Terminons cette section par deux formules qui nous seront utiles pour étudier la convergence de l'algorithme de BFGS, celles de la trace et du déterminant.

Proposition 10.4 *Si M_{k+1} et M_k sont reliés par le formule de BFGS (10.9) avec M_k définie positive et $y_k^\mathsf{T} s_k > 0$, on a*

$$\operatorname{tr} M_{k+1} = \operatorname{tr} M_k + \frac{\|y_k\|_2^2}{y_k^\mathsf{T} s_k} - \frac{\|M_k s_k\|_2^2}{s_k^\mathsf{T} M_k s_k} \quad \textit{et} \quad \det M_{k+1} = \det M_k \left(\frac{y_k^\mathsf{T} s_k}{s_k^\mathsf{T} M_k s_k} \right).$$

DÉMONSTRATION. La formule de la trace se déduit directement de (10.9). Pour celle du déterminant, on écrit

$$\det M_{k+1} = \det(M_k) \det \left(I + \frac{M_k^{-1} y_k y_k^\mathsf{T}}{y_k^\mathsf{T} s_k} - \frac{s_k s_k^\mathsf{T} M_k}{s_k^\mathsf{T} M_k s_k} \right).$$

Pour évaluer le dernier déterminant, on utilise le point (*iii*) de l'exercice B.16. □

Propriétés asymptotiques ▲

Supposons que l'on ait deux suites $\{y_k\}_{k\geqslant 1}$ et $\{s_k\}_{k\geqslant 1}$ de vecteurs de $\mathbb{R}^n$, vérifiant $y_k^\mathsf{T} s_k > 0$ pour tout $k \geqslant 1$, et une matrice d'ordre n symétrique définie positive M_1. On génère alors la suite $\{M_k\}_{k\geqslant 1}$ par la formule de BFGS : $M_{k+1} = \mathrm{BFGS}(M_k, y_k, s_k)$ pour tout $k \geqslant 1$. On s'intéresse ici aux propriétés que peuvent induire les vecteurs y_k et s_k sur la suite $\{M_k\}$. Ces propriétés seront utiles pour étudier le comportement asymptotique des suites générées par l'algorithme de BFGS.

On sait déjà, d'après la proposition 10.2, que les matrices M_k sont toutes symétriques définies positives.

Formule de mise à jour pour matrices creuses ▲

10.2.2 L'algorithme de BFGS

D'après la proposition 10.2, on aura un algorithme à directions de descente si dans (10.1), M_k est générée par la formule de BFGS à partir d'une matrice initiale M_1 définie positive et si à chaque itération on réalise l'inégalité $y_k^\mathsf{T} s_k > 0$. La formule de BFGS génère alors des matrices M_k définies positives. Il est tout à fait remarquable que l'inégalité $y_k^\mathsf{T} s_k > 0$ soit satisfaite lorsque la recherche linéaire détermine le pas $\alpha_k > 0$ par la règle de Wolfe (section 6.3.4 ; rappelons que l'on a choisit le produit scalaire euclidien $\langle u, v\rangle := u^\mathsf{T} v$). En effet, si l'on retranche $g_k^\mathsf{T} d_k$ dans les deux membres de l'inégalité (6.11b), on obtient

$$y_k^\mathsf{T} s_k \geqslant (\omega_2 - 1)\, g_k^\mathsf{T} s_k > 0,$$

car $\omega_2 < 1$ et $g_k^\mathsf{T} s_k = \alpha_k g_k^\mathsf{T} d_k < 0$ (d_k est une direction de descente). Pour minimiser une fonction non linéaire (non quadratique) au moyen de la formule de BFGS, on utilise donc *toujours* la recherche linéaire de Wolfe. Ceci conduit à l'algorithme parfaitement bien défini suivant.

Algorithme 10.5 (de BFGS)

0. On se donne deux constantes ω_1 et ω_2 pour la recherche linéaire de Wolfe : $0 < \omega_1 < \frac{1}{2}$ et $\omega_1 < \omega_2 < 1$.
   Choix d'un itéré initial $x_1 \in \mathbb{R}^n$ et d'une matrice initiale W_1 définie positive (approximation de l'*inverse* de la hessienne $\nabla^2 f(x_1)$).
   Initialisation : $k := 1$.
1. *Test d'arrêt* : si $\nabla f(x_k) = 0$, arrêt de l'algorithme.
2. *Calcul de la direction de descente* : $d_k = -W_k g_k$.
3. *Recherche linéaire de Wolfe* : trouver un pas $\alpha_k > 0$ tel que l'on ait (6.11a) et (6.11b).
4. $x_{k+1} := x_k + \alpha_k d_k$.
5. Mettre à jour la matrice W_k par la formule (10.10) dans laquelle on prend $s_k = x_{k+1} - x_k$ et $y_k = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)$.
6. Accroître k de 1 et aller en 1.

En pratique, on arrête l'algorithme à l'étape 1 lorsque $\nabla f(x_k)$ est suffisamment petit. On notera $M_k = W_k^{-1}$ l'inverse des matrices générées par l'algorithme ci-dessus, qui approchent donc la hessienne $\nabla^2 f$. On trouvera à la section 10.2.4 plus de détails sur la mise en œuvre de l'algorithme de BFGS. Analysons d'abord ses principales propriétés.

10.2.3 Propriétés de l'algorithme de BFGS

Convergence globale

> *My favorite results are his proof of the global convergence of the BFGS method for convex functions, and the introduction of the least change approach for derivative-free optimization.*
>
> J. Moré (2015), dans un hommage à M.J.D. Powell [401].

Un des plus beaux résultats de convergence en optimisation sans contrainte est le théorème 10.6 ci-dessous. Il donne des conditions assurant la convergence globale de l'algorithme de BFGS lorsque la fonction à minimiser est convexe. On notera qu'il n'est pas nécessaire de supposer la *forte* convexité du critère. La beauté du résultat tient en particulier au fait qu'il est rare de pouvoir démontrer la convergence d'un algorithme quasi-newtonien, avec si peu d'hypothèses sur les objets générés par celui-ci. On suppose seulement que l'algorithme génère une suite $\{x_k\}$ (ce qui signifie qu'il ne s'arrête pas à l'étape 1 parce que le gradient y est nul ; auquel cas, il n'y a rien à démontrer) et que la suite $f(x_k)$ est bornée inférieurement (il existe une constante C telle que pour tout indice k, $f(x_k) \geqslant C$). On ne fait aucune hypothèse sur la suite des matrices $\{M_k\}$.

Théorème 10.6 (convergence globale de BFGS) *Supposons que $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ soit convexe et $\mathcal{C}^{1,1}$ dans un voisinage convexe de $\{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leqslant f(x_1)\}$, où $x_1 \in \mathbb{R}^n$. On considère l'algorithme de BFGS démarrant en x_1 avec une matrice M_1 symétrique définie positive et on suppose que celui-ci génère une suite $\{x_k\}$ telle que $\{f(x_k)\}$ soit bornée inférieurement. Alors,* $\liminf_{k\to\infty} \|g_k\| = 0$.

Démonstration. On note $C_1, C_2, \ldots$ des constantes strictement positives. L'idée de la démonstration est de contrôler le comportement des matrices $\{M_k\}$ en obtenant une majoration de leur trace et une minoration de leur déterminant, ce qui permettra d'avoir une borne inférieure sur le pas α_k. On note

$$q_k := \frac{s_k^\mathsf{T} M_k s_k}{\|s_k\|_2^2} \quad \text{et} \quad \cos\theta_k := \frac{-g_k^\mathsf{T} d_k}{\|g_k\|_2 \|d_k\|_2} = \frac{s_k^\mathsf{T} M_k s_k}{\|M_k s_k\|_2 \|s_k\|_2}$$

le quotient de Rayleigh de M_k dans la direction s_k et le cosinus de l'angle entre d_k et l'opposé du gradient.

Première étape. On utilise la formule de la trace pour montrer que pour tout $k \geqslant 1$:

$$\operatorname{tr} M_{k+1} \leqslant C_1 k \quad \text{et} \quad \sum_{i=1}^{k} \frac{\|M_i s_i\|_2^2}{s_i^\mathsf{T} M_i s_i} = \sum_{i=1}^{k} \frac{q_i}{\cos^2\theta_i} \leqslant C_1 k. \tag{10.13}$$

En effet, comme $f \in \mathcal{C}^{1,1}$, on a $\|y_k\|_2^2/(y_k^\mathsf{T} s_k) \leqslant C_2$ (proposition 3.63) et donc la formule de la trace (proposition **??**) donne

$$\operatorname{tr} M_{k+1} \leqslant \operatorname{tr} M_k + C_2 - \frac{\|M_k s_k\|_2^2}{s_k^\mathsf{T} M_k s_k} \leqslant \operatorname{tr} M_1 + C_2 k - \sum_{i=1}^{k} \frac{\|M_i s_i\|_2^2}{s_i^\mathsf{T} M_i s_i}.$$

On en déduit la première estimation de (10.13) avec $C_1 := \operatorname{tr} M_1 + C_2$. D'autre part, comme M_{k+1} est définie positive, on a $\operatorname{tr} M_{k+1} \geqslant 0$ et l'inégalité précédente donne la seconde estimation de (10.13).

Deuxième étape. En utilisant la majoration de la trace (10.13) et une minoration du déterminant, on obtient une minoration de la plus petite valeur propre de M_{k+1}, donc une minoration du pas. On montre en fait que cela conduit à la borne inférieure suivante sur le pas moyen : pour tout $k \geqslant 1$,

$$\left(\prod_{i=1}^{k} \alpha_i\right)^{\frac{1}{k}} \geqslant C_3. \tag{10.14}$$

En effet, par la formule du déterminant (proposition **??**) et la règle de Wolfe (6.11b) :

$$\begin{aligned}\det M_{k+1} &= \frac{y_k^{\mathsf{T}} s_k}{s_k^{\mathsf{T}} M_k s_k} \det M_k \\ &\geqslant \frac{(1-\omega_2)}{\alpha_k} \det M_k \\ &\geqslant \frac{(1-\omega_2)^k}{\prod_{i=1}^k \alpha_i} \det M_1 \\ &\geqslant \frac{C_4^k}{\prod_{i=1}^k \alpha_i},\end{aligned}$$

avec $C_4 := (1-\omega_2)\min(1, \det M_1)$. D'autre part, en utilisant l'inégalité géométrico-arithmétique (3.62), (10.13) et le fait que $k^n \leqslant (e^n)^k$:

$$\det M_{k+1} \leqslant \left(\frac{1}{n} \operatorname{tr} M_{k+1}\right)^n \leqslant \left(\frac{C_1}{n} k\right)^n \leqslant C_5^k,$$

avec $C_5 := \max(1, C_1/n)^n e^n$. Les deux estimations ci-dessus conduisent à (10.14) avec $C_2 := C_4/C_5$.

Troisième étape. En exploitant la deuxième estimation de (10.13), on obtient une majoration du pas moyen pondéré. On se défera de la pondération dans le raisonnement par l'absurde de la quatrième étape. Pour tout $k \geqslant 1$:

$$\left(\prod_{i=1}^k \alpha_i \|g_i\|_2^2\right)^{\frac{1}{k}} \leqslant \frac{C_6}{k}. \tag{10.15}$$

En effet,

$$\sum_{i=1}^k \frac{\|M_i s_i\|_2^2}{s_i^{\mathsf{T}} M_i s_i} = \sum_{i=1}^k \frac{\alpha_i \|g_i\|_2^2}{-g_i^{\mathsf{T}} s_i} \leqslant C_1 k. \tag{10.16}$$

On utilise ensuite deux fois l'inégalité géométrico-arithmétique (3.62) et la règle de Wolfe (6.11a)

$$\begin{aligned}\prod_{i=1}^k \alpha_i \|g_i\|_2^2 &\leqslant C_1^k \prod_{i=1}^k (-g_i^{\mathsf{T}} s_i) \qquad [(10.16) \text{ et } (3.62)] \\ &\leqslant \left(\frac{C_1}{k} \sum_{i=1}^k (-g_i^{\mathsf{T}} s_i)\right)^k \qquad [(3.62)] \\ &\leqslant \left(\frac{C_1}{\omega_1 k} \sum_{i=1}^k (f(x_i) - f(x_{i+1}))\right)^k \qquad [(6.11a)] \\ &= \left(\frac{C_1}{\omega_1 k} (f(x_1) - f(x_{k+1}))\right)^k.\end{aligned}$$

On en déduit (10.15), avec $C_6 := C_1(f(x_1) - f_{\min})/\omega_1$, où $f_{\min} \in \mathbb{R}$ est un minorant de $\{f(x_k)\}$.

Quatrième étape. On conclut par un raisonnement par l'absurde. Supposons que le résultat ne soit pas vrai. Alors $\|g_k\| \geqslant C_7 > 0$ et (10.15) donne

$$\left(\prod_{i=1}^{k}\alpha_i\right)^{\frac{1}{k}} \leqslant \frac{C_6}{C_7^2 k},$$

qui est en contradiction avec (10.14). □

Observons que si l'on avait supposé f fortement convexe, on n'aurait pu utiliser de la recherche linéaire de Wolfe que ce qui est contenu dans la condition de Zoutendijk (6.21). En effet la formule du déterminant aurait donné pour une constante générique strictement positive C :

$$\det M_{k+1} \geqslant C\frac{\|s_k\|^2}{s_k^{\mathrm{T}} M_k s_k}\det M_k \geqslant \frac{C^k}{\prod_{i=1}^{k} q_i},$$

qui avec la formule de la trace aurait conduit à

$$\left(\prod_{i=1}^{k} q_i\right)^{\frac{1}{k}} \geqslant C.$$

Alors la seconde estimation de (10.13) et l'inégalité géométrico-arithmétique (3.62) auraient donné

$$\left(\prod_{i=1}^{k}\frac{q_i}{\cos^2\theta_i}\right)^{\frac{1}{k}} \leqslant \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k}\frac{q_i}{\cos^2\theta_i} \leqslant C.$$

Donc

$$C \leqslant \left(\prod_{i=1}^{k} q_i\right)^{\frac{1}{k}} \leqslant C\left(\prod_{i=1}^{k}\cos^2\theta_i\right)^{\frac{1}{k}} \leqslant \frac{C}{k}\sum_{i=1}^{k}\cos^2\theta_i.$$

On en aurait déduit que $\sum_{k\geqslant 0}\cos^2\theta_i = \infty$ et, avec (6.21), que $\liminf \|g_k\| = 0$. Lorsque f est seulement convexe, nous avons vu que la règle de Wolfe intervenait à plusieurs endroits dans la démonstration.

Corollaire 10.7 *Sous les hypothèses du théorème 10.6, si la fonction f est fortement convexe, alors la suite $\{x_k\}$ converge vers l'unique minimum de f.*

Démonstration. Si f est fortement convexe, il existe un unique point x_* minimisant f sur $\mathbb{R}^n$.

Montrons qu'il existe une sous-suite de $\{x_k\}$ qui converge vers x_*. La suite $\{x_k\}$ est bornée (elle est dans $\{x : f(x) \leqslant f(x_1)\}$ qui est borné). Dès lors, d'après le théorème, on peut trouver une sous-suite convergente $\{x_k\}_{k\in\mathcal{K}}$, telle que $g_k \to 0$. On en déduit que $x_k \to x_*$ lorsque $k \to \infty$ dans $\mathcal{K}$ (ça ne peut pas être un autre point du fait de la continuité du gradient et de l'unicité du point annulant le gradient).

On a alors que $f(x_k) \to f(x_*)$. En effet, la suite $\{f(x_k)\}$ est décroissante et bornée inférieurement. Donc elle converge et ça ne peut être que vers $f(x_*)$, car une sous-suite converge vers cette valeur.

Il reste à conclure. De toute sous-suite $\{x_k\}_{k\in\mathcal{K}'}$, on peut extraire une sous-suite convergente (elle est bornée), qui ne peut converger que vers x_* (car $f(x_k)$ converge vers $f(x_*)$). Alors, toute la suite $\{x_k\}$ converge vers x_*. □

Convergence locale

Terminaison quadratique

> *Indeed for many years the only intrusion of theory on my research was the point of view that, if an algorithm does not perform well when the objective function is quadratic, then it is unlikely that it will be efficient in general use. This rule of thumb and trying to make good use of available information were the main considerations that helped me to develop several successful algorithms for unconstrained calculations.*
>
> M.J.D. Powell [445 ; 1991].

L'algorithme de BFGS peut être interprété comme une extension de l'algorithme du gradient conjugué (GC) préconditionné. Si on l'utilise pour minimiser une fonction quadratique strictement convexe, donc de la forme

$$x \in \mathbb{R}^n \mapsto f(x) = \frac{1}{2} x^\mathsf{T} A x - b^\mathsf{T} x,$$

où la matrice A est d'ordre n symétrique définie positive et $b \in \mathbb{R}^n$, *en faisant de la recherche linéaire exacte*, alors l'algorithme génère les mêmes itérés que l'algorithme du GC préconditionné par la matrice $W_1 = M_1^{-1}$. Cette propriété est connue sous le nom de *terminaison quadratique*.

Proposition 10.8 (terminaison quadratique) *Si $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ est quadratique strictement convexe. Alors l'algorithme de BFGS avec recherche linéaire exacte est bien défini et génère les mêmes itérés que l'algorithme du gradient conjugué préconditionné par la matrice $W_1 = M_1^{-1}$. En particulier, il converge en au plus n itérations.*

Démonstration. On montre par récurrence que l'on a pour tout $k \geqslant 1$ tel que $g_k \neq 0$:

$$W_i g_k = W_1 g_k, \quad i = 1, \ldots, k-1, \tag{10.17}$$

$$d_k = d_k^{\mathrm{GC}} := \begin{cases} -W_1 g_1 & \text{si } k = 1 \\ -W_1 g_k + \frac{g_k^\mathsf{T} W_1 g_k}{g_{k-1}^\mathsf{T} W_1 g_{k-1}} d_{k-1} & \text{si } k \geqslant 2, \end{cases} \tag{10.18}$$

où d_k^{GC} est la direction du GC préconditionné par la matrice W_1.

Si $g_1 \neq 0$ et $k = 1$, les deux identités sont clairement vérifiées puisque la première direction de l'algorithme de BFGS est $d_1 = -W_1 g_1$.

Supposons à présent que les identités (10.17) et (10.18) aient lieu jusqu'à un indice $k \geqslant 1$ et montrons qu'elles ont également lieu pour l'indice $k+1$ si $g_{k+1} \neq 0$. Sous l'hypothèse de récurrence, les itérés $x_1, \ldots, x_{k+1}$ de l'algorithme de BFGS sont identiques à ceux générés par le GC préconditionné par W_1. Dès lors $s_i^\mathsf{T} g_{k+1} = 0$ pour $i = 1, \ldots, k$ (exercice 8.3) et, par la formule (10.10),

$$W_{i+1} g_{k+1} = \left(I - \frac{s_i y_i^\mathsf{T}}{y_i^\mathsf{T} s_i} \right) W_i g_{k+1}, \quad \text{pour } i = 1, \ldots, k.$$

On a aussi $g_i^T W_1 g_{k+1} = 0$ pour $i = 1, \ldots, k$ (exercice 8.3), et donc $y_i^T W_1 g_{k+1} = 0$ pour $i = 1, \ldots, k-1$. L'identité ci-dessus avec $i = 1, \ldots, k-1$ permet alors d'obtenir (10.17) par récurrence sur i. L'identité ci-dessus avec $i = k$ donne

$$d_{k+1} = -W_{k+1} g_{k+1} = -W_1 g_{k+1} + \frac{y_k^T W_1 g_{k+1}}{y_k^T d_k} d_k.$$

On en déduit (10.18) en notant que $y_k^T W_1 g_{k+1} = g_{k+1}^T W_1 g_{k+1}$ et $y_k^T d_k = -g_k^T d_k = g_k^T W_1 g_k$ (on utilise l'hypothèse de récurrence et $g_k^T d_{k-1} = 0$). □

10.2.4 Mise en œuvre de l'algorithme de BFGS

Formules de mise à jour directe ou inverse

A priori, il parait plus intéressant de mettre à jour W_k, l'inverse de M_k par (10.10), que M_k par (10.9), de manière à ne pas devoir résoudre le système linéaire $M_k d_k = -g_k$ pour déterminer la direction de descente d_k à l'étape 2 de l'algorithme. Dans cette approche, la direction $d_k = -W_k g_k$ est obtenue en $O(n^2)$ opérations, alors que la résolution d'un système linéaire en demande $O(n^3)$ en général. On notera aussi que la mise à jour de W_k par (10.10) peut se faire en $O(n^2)$, par la suite d'opérations suivantes :

$$\begin{aligned} \widetilde{W}_k &:= \left(I - \frac{s_k y_k^T}{y_k^T s_k}\right) W_k = W_k - \bar{s}_k (W_k \bar{y}_k)^T \\ W_{k+1} &:= \widetilde{W}_k \left(I - \frac{y_k s_k^T}{y_k^T s_k}\right) + \frac{s_k s_k^T}{y_k^T s_k} = \widetilde{W}_k - (\widetilde{W}_k \bar{y}_k)\bar{s}_k^T + \bar{s}_k \bar{s}_k^T, \end{aligned}$$

dans lesquelles on a noté $\bar{s}_k := s_k/(y_k^T s_k)^{1/2}$ et $\bar{y}_k := y_k/(y_k^T s_k)^{1/2}$. Évidemment, $\widetilde{W}_k$ et W_{k+1} peuvent être stockées dans W_k. Dans les problèmes avec contraintes, on doit mettre à jour la matrice directe M_k et cela se fait parfois par la formule suivante

$$M_{k+1} = M_k + u_k v_k^T + v_k u_k^T + v_k v_k^T, \tag{10.19}$$

qui est équivalente à (10.9) si on prend $\bar{s}_k := s_k/(s_k^T M_k s_k)^{1/2}$, $\bar{y}_k := y_k/(y_k^T s_k)^{1/2}$, $u_k := M_k \bar{s}_k$ et $v_k := \bar{y}_k - M_k \bar{s}_k$.

En pratique il est préférable d'utiliser (10.10) plutôt que (10.11). Cette dernière formule est en effet instable, du fait des erreurs d'arrondi qui y sont moins bien contrôlées et qui peuvent rendre W_{k+1} indéfinie. Cette affirmation relève de notre propre expérience avec ces formules, mais nous ne connaissons pas d'étude précise sur le sujet. On observe toutefois que par le second terme de (10.11), on *retranche* une matrice semi-définie positive, alors que dans (10.10) on fait la *somme* de deux matrices semi-définies positives. Dans la procédure de calcul proposée ci-dessus, dans laquelle on évite de devoir former la matrice $(I - \bar{s}_k \bar{y}_k^T)$ et de faire un produit de deux matrices (ce qui requiert $O(n^3)$ opérations), on ne bénéficie pas entièrement de cette bonne propriété, car on retrouve des différences de matrices pouvant entraîner de l'instabilité. De ce point de vue, on pourra aussi préférer la formule (10.19) pour la mise à jour de la matrice directe.

Certains auteurs [230, 239] préfèrent mettre à jour les facteurs de Cholesky L_k de $M_k = L_k L_k^\mathsf{T}$ de manière à contrôler la définie positivité de cette matrice qui peut être perdue du fait des erreurs d'arrondi (pour les problèmes difficiles seulement). Cette mise à jour des facteurs de Cholesky de M_k peut se faire en $O(n^2)$ opérations. Le calcul de la direction de descente d_k demande aussi $O(n^2)$ opérations (il y a deux systèmes linéaires triangulaires à résoudre), alors qu'il en faudrait $O(n^3)$ si M_k n'était pas connue par ses facteurs triangulaires.

D'autres auteurs enfin [240, 444, 490] utilisent la troisième approche qui consiste à mettre à jour des facteurs Z_k de $W_k = Z_k Z_k^\mathsf{T}$ (qui ne sont pas de Cholesky). Cela permet d'avoir un meilleur contrôle de la définie positivité de W_k. Cette approche jette un nouvel éclairage sur les liens avec l'algorithme du gradient conjugué (voir à ce sujet les propositions 10.3 et 10.8).

Choix de la matrice initiale

Le choix de la matrice symétrique définie positive initiale M_1 est crucial pour un bon fonctionnement de l'algorithme de BFGS. On conçoit en effet que prendre $M_1 = I$ peut avoir des effets désastreux, parce que la matrice identité peut être beaucoup trop grande ou trop petite, selon les cas, et que, $M_{k+1} - M_k$ étant une matrice de rang 2, la suite $\{M_k\}$ ne va pas évoluer rapidement (on tient d'ailleurs beaucoup à cette propriété de stabilité de la formule de BFGS).

En toute logique, il faudrait prendre comme matrice initiale M_1 une matrice symétrique définie positive approchant convenablement $\nabla^2 f(x_1)$. On dispose parfois d'une telle matrice. Par exemple, cela peut être une approximation définie positive de la diagonale de cette hessienne (on rappelle qu'en toute généralité, celle-ci est aussi coûteuse à évaluer que la hessienne complète, voir l'exercice **??**) ou une partie définie positive de $\nabla^2 f(x_1)$ (comme $J_1^\mathsf{T} J_1$ dans les problèmes de moindres-carrés lorsque la jacobienne $J_1 = r'(x_1)$ du résidu au point initial est calculable à peu de frais et est injective, voir la section 17.3).

Parfois, il est intéressant de prendre pour M_1, la matrice obtenue en fin de résolution par l'algorithme de BFGS d'un problème voisin. Dans ce dernier cas, on parle de *démarrage à chaud*.

Le plus souvent, cependant, on ne dispose d'aucune matrice « naturelle » M_1 et il faut *démarrer à froid*. On prend alors $M_1 = I$ ou $W_1 = I$. Ensuite $M_2 = \mathrm{BFGS}(\sigma_1 I, y_1, s_1)$ ou $W_2 = \overline{\mathrm{BFGS}}(\bar\sigma_1 I, y_1, s_1)$, avec

$$\sigma_1 := \frac{y_1^\mathsf{T} s_1}{\|s_1\|_2^2} \quad \text{et} \quad \bar\sigma_1 := \frac{y_1^\mathsf{T} s_1}{\|y_1\|_2^2}. \tag{10.20}$$

Pour $k \geqslant 2$, on prend comme d'habitude $M_{k+1} = \mathrm{BFGS}(M_k, y_k, s_k)$ ou $W_{k+1} = \overline{\mathrm{BFGS}}(W_k, y_k, s_k)$. Les facteurs scalaires σ_1 et $\bar\sigma_1$, connus sous le nom de *facteurs d'Oren-Luenberger*, sont déterminés par le souci d'avoir $\sigma_1 I$ et $\bar\sigma_1 I$ les plus proches possibles, dans des sens très variés, du sous-espace affine $\{M \in \mathcal{S}^n : y_1 = M s_1\}$ des matrices symétriques vérifiant l'équation de quasi-Newton (voir l'exercice 10.3). On notera que σ_1 et $\bar\sigma_1$ sont tous les deux strictement positifs (on suppose $y_1^\mathsf{T} s_1 > 0$). On notera également que, par l'inégalité de Cauchy-Schwarz, $\sigma_1 \leqslant (\bar\sigma_1)^{-1}$ sans que l'on ait nécessairement égalité, si bien que générer les matrices directes ou inverses avec les initialisations ci-dessus ne donnent pas le même algorithme. On pourrait d'ailleurs

aussi prendre $\sigma_1 = \|y_1\|_2^2/(y_1^\mathsf{T} s_1)$ et $\bar\sigma_1 = \|s_1\|_2^2/(y_1^\mathsf{T} s_1)$. On ne connaît pas de critère faisant l'unanimité permettant de faire le bon choix des facteurs σ_1 ou $\bar\sigma_1$; on utilise souvent (10.20).

Mise à l'échelle répétée

Nous avons dit que la suite $\{M_k\}$ était très stable. Hélas parfois trop ! Si l'initialisation n'est pas satisfaisante et que les itérés progressent rapidement, on aimerait que les matrices évoluent plus vite pour s'adapter à la hessienne courante. Il peut donc être intéressant de *catalyser* la mise à jour en multipliant M_k ou W_k par un facteur scalaire *avant* leur mise à jour, mais *après* leur utilisation. On prend donc $M_{k+1} = \mathrm{BFGS}(\sigma_k M_k, y_k, s_k)$ ou $W_{k+1} = \overline{\mathrm{BFGS}}(\bar\sigma_k W_k, y_k, s_k)$, avec des scalaires $\sigma_k > 0$ et $\bar\sigma_k > 0$ valant

$$\sigma_k := \frac{y_k^\mathsf{T} s_k}{s_k^\mathsf{T} M_k s_k} \quad \text{et} \quad \bar\sigma_k := \frac{y_k^\mathsf{T} s_k}{y_k^\mathsf{T} W_k y_k}. \tag{10.21}$$

Ceux-ci sont obtenus par un raisonnement analogue à celui conduisant à (10.20)

Ce qui peut ne pas fonctionner

L'algorithme de BFGS avec recherche linéaire en optimisation demande que le gradient soit calculé avec une bonne précision. Si ce n'est pas le cas, en particulier lorsque le gradient est estimé par différences finies, l'algorithme pourra s'interrompre prématurément parce que la direction générée ne sera pas une direction de descente. En effet, celle-ci s'écrit $d_k = -W_k g_k$, où g_k est le gradient *calculé* et W_k est une matrice définie positive dont on ne contrôle pas le conditionnement $\kappa_2(W_k)$. Comme, selon (6.4), l'inverse de ce dernier minore l'angle θ_k entre d_k et $-g_k$, on pourra avoir un angle θ_k arbitrairement proche de $\pi/2$. Si g_k n'est pas suffisamment précis, il se pourra que la direction d_k calculée par l'algorithme de BFGS ne soit pas de descente en x_k, entraînant l'échec de la recherche linéaire. Si la précision obtenue alors n'est pas suffisante, il n'y a qu'un seul remède : calculer le gradient avec plus de précision (éviter la discrétisation d'un gradient en dimension infinie, faire de la différentiation automatique ou manuelle, chasser les erreurs d'arrondi).

Mentionnons aussi, mais sans insister, que des exemples de non-convergence de l'algorithme de BFGS avec recherche linéaire ont été découverts [380 ; 2004], soit environ 35 ans après son introduction. Il y a peu de chance toutefois que cette non-convergence s'observe en pratique.

10.2.5 L'algorithme ℓ-BFGS

Si le problème est de grande taille, disons avec un nombre de variables n supérieur à 500 (ce seuil dépend en partie des performances des ordinateurs), les méthodes de quasi-Newton telles qu'on les a présentées ne sont plus adaptées, pour deux raisons au moins. D'abord parce qu'il peut être impossible de mettre en mémoire une matrice d'ordre n. Ensuite, même si le stockage d'une telle matrice est possible, sa mise à jour peut prendre beaucoup de temps (celle-ci requiert en effet de l'ordre de n^2 opérations) et son adaptation à la hessienne courante peut être lente (dans les formules de

mise à jour vues, la différence entre deux matrices successives est de faible rang, si bien qu'il faut normalement un nombre de mises à jour proportionnel à n pour que l'approximation courante devienne correcte et que l'algorithme devienne efficace).

Une belle découverte, très utile en pratique, a été de constater que l'on peut *adapter* beaucoup de méthodes de quasi-Newton à des problèmes de très grande taille en appliquant les principes suivants :

1. on ne forme l'approximation de la hessienne qu'en utilisant un nombre limité de couples (y_i, s_i), disons m, avec $m \ll n$ (typiquement $m \simeq 5 \ldots 10$) ;
2. on ne mémorise que ces couples, pas la matrice elle-même, et les mises à jour se font à partir d'une matrice initiale peu encombrante en mémoire (typiquement une matrice diagonale) ; la matrice approchant la hessienne (ou son inverse) est donc définie de manière implicite, sans représentation en mémoire ;
3. on calcule le produit de cette matrice (ou de son inverse) par un vecteur (comme cela est requis par la formule (10.1)) par un algorithme qui doit être efficace et peut se passer d'une représentation explicite de la matrice W_k.

Une technique de mise à jour reposant sur ces principes est dite *à mémoire limitée*. La sélection des bons couples (y_i, s_i) est un problème délicat qui n'a pas trouvé de réponse satisfaisante, si bien que l'on sélectionne en général les m plus récents, ceux sensés donner la meilleure information sur la hessienne courante. De même, le choix de la matrice initiale est encore aujourd'hui un sujet de recherche ; certains auteurs [370] choisissent la matrice identité multipliée par un des scalaires de (10.21) ; d'autres [226] utilisent des matrices diagonales, elles-mêmes mises à jour au cours des itérations. Enfin, nous verrons qu'une conséquence de la différentiation automatique en mode inverse (section 5.5.3) est que le produit de la matrice implicite par un vecteur pourra se faire de manièrre efficace si la forme quadratique associée à cette matrice s'évalue rapidement.

Soyons plus concret et décrivons la mise à jour par la formule de BFGS inverse (10.10) de l'approximation *à mémoire limitée* de l'inverse de la hessienne, qui suit les principes énoncés aux points 1-3 ci-dessus. L'algorithme correspondant est appelé l'algorithme ℓ-BFGS [416]. La matrice implicite (c.-à-d., non stockée) à l'itération k est toujours notée W_k. Au moment de la mise à jour, on suppose que x_k et x_{k+1} sont connus ; le premnier itéré est noté x_1. Comme mentionné ci-dessus, on utilise en général les couples les plus récents :

$$\{(y_{k-\bar{m}+i}, s_{k-\bar{m}+i}) : i = 1, \ldots, \bar{m}\}, \tag{10.22}$$

où

$$\bar{m} := \min(m, k).$$

Partant d'une matrice initiale W_k^0 facilement mémorisable et qu'il faut spécifier, la matrice implicite suivante W_{k+1} est obtenue par

$$\begin{aligned} W_k^i &:= \overline{\text{BFGS}}(W_k^{i-1}, y_{k-\bar{m}+i}, s_{k-\bar{m}+i}), \quad \text{pour } i = 1, \ldots, \bar{m} \\ W_{k+1} &= W_k^{\bar{m}}, \end{aligned}$$

où $\overline{\text{BFGS}}$ symbolise la fomule de BFGS inverse (10.10). Il s'agit ici d'une description formelle de W_{k+1}, car cette matrice n'est pas stockée.

Notre but à présent est de montrer que le produit de la matrice implicite W_{k+1}, représentée par la matrice W_k^0 et les couples (10.22), par un vecteur v peut se faire aisément. Dans (10.1), $v = g_{k+1}$, mais ce qui suit est valable pour un vecteur v arbitraire, ce qui pourra être utile pour les problèmes avec contraintes. On note

$$\begin{array}{ll} \text{pour } i = 1, \dots, \bar{m} : & \rho_i := (y_{k-\bar{m}+i}^\mathsf{T} s_{k-\bar{m}+i})^{-1} \quad \text{et} \quad V_i := I - \rho_i y_{k-\bar{m}+i} s_{k-\bar{m}+i}^\mathsf{T}, \\ \text{pour } i = 0, \dots, \bar{m} : & \text{la fonction } v \in \mathbb{R}^n \mapsto \varphi_i(v) := (v^\mathsf{T} W_k^i v)/2 \end{array}$$

et on définit par récurrence

$$q_{\bar{m}} = v \qquad \text{et} \qquad q_{i-1} = V_{k-\bar{m}+i} q_i \quad (\text{pour } i = \bar{m}, \dots, 1).$$

Alors, grâce à (10.10), on a par récurrence

$$\begin{aligned} \varphi_{\bar{m}}(v) &= \varphi_{\bar{m}}(q_{\bar{m}}) \\ &= \frac{1}{2} q_{\bar{m}}^\mathsf{T} V_k^\mathsf{T} W_k^{\bar{m}-1} V_k q_{\bar{m}} + \frac{\rho_k}{2} (s_k^\mathsf{T} q_{\bar{m}})^2 \\ &= \varphi_{\bar{m}-1}(q_{\bar{m}-1}) + \frac{\rho_k}{2} (s_k^\mathsf{T} q_{\bar{m}})^2 \\ &= \varphi_0(q_0) + \sum_{i=1}^{\bar{m}} \frac{\rho_{k-\bar{m}+i}}{2} (s_{k-\bar{m}+i}^\mathsf{T} q_i)^2. \end{aligned}$$

Cette valeur $\varphi_{\bar{m}}(v)$ se calcule donc par l'algorithme

$$\begin{array}{l} \varphi := 0; \\ q := v; \\ \texttt{for } (i := \bar{m};\ i \geqslant 1;\ i := i-1)\ \{ \\ \quad \alpha_i := s_{k-\bar{m}+i}^\mathsf{T} q; \\ \quad \varphi := \varphi + \frac{\rho_{k-\bar{m}+i}}{2} \alpha_i^2; \\ \quad q := q - \rho_{k-\bar{m}+i} \alpha_i y_{k-\bar{m}+i}; \\ \} \\ \varphi := \varphi + \frac{1}{2} q^\mathsf{T} W_k^0 q; \end{array} \tag{10.23}$$

Comme $W_{k+1}v$ est le gradient en v de $v \mapsto \varphi_{\bar{m}}(v)$, on peut calculer ce vecteur en exécutant le code adjoint de (10.23) (voir la section 5.5.3 et plus spécialement le code (5.32) et l'exercice 5.9). On note $\overline{\varphi}$, $\overline{q}$ et $\overline{\alpha} := (\overline{\alpha}_1, \dots, \overline{\alpha}_{\bar{m}})$ les variables adjointes de φ, q et $\alpha := (\alpha_1, \dots, \alpha_{\bar{m}})$. Ce code adjoint s'écrit alors

$$\begin{array}{l} \overline{\varphi} := 1; \\ \overline{q} := 0; \\ \overline{\alpha} := 0; \\ \overline{q} := W_k^0 q; \\ \texttt{for } (i := 1;\ i \leqslant \bar{m};\ i := i+1)\ \{ \\ \quad \overline{\alpha}_i := \overline{\alpha}_i - \rho_{k-\bar{m}+i} y_{k-\bar{m}+i}^\mathsf{T} \overline{q}; \\ \quad \overline{\alpha}_i := \overline{\alpha}_i + \rho_{k-\bar{m}+i} \alpha_i \overline{\varphi}; \\ \quad \overline{q} := \overline{q} + \overline{\alpha}_i s_{k-\bar{m}+i}; \\ \quad \overline{\alpha}_i := 0; \\ \} \\ \overline{v} := \overline{q}; \\ \overline{q} := 0; \\ \overline{\varphi} := 0; \end{array} \tag{10.24}$$

La valeur de $W_{k+1}v$ est obtenu à la sortie de l'algorithme (10.24) dans le vecteur $\overline{v}$. En combinant (10.23) et (10.24), en ne conservant que les instructions qui sont utiles au calcul de $W_{k+1}v$ et en plaçant $\overline{q}$ dans q et tous les $\overline{\alpha}_i$ dans β, on obtient l'algorithme suivant :

$$
\begin{array}{l}
q := v; \\
\texttt{for } (i := \bar{m};\ i \geqslant 1;\ i := i-1)\ \{ \\
\quad \alpha_i := s_{k-\bar{m}+i}^{\mathsf{T}} q; \\
\quad q := q - \rho_{k-\bar{m}+i}\alpha_i y_{k-\bar{m}+i}; \\
\} \\
q := W_k^0 q; \\
\texttt{for } (i := 1;\ i \leqslant \bar{m};\ i := i+1)\ \{ \\
\quad \beta := \rho_{k-\bar{m}+i}(\alpha_i - y_{k-\bar{m}+i}^{\mathsf{T}} q); \\
\quad q := q + \beta s_{k-\bar{m}+i}; \\
\}
\end{array}
\tag{10.25}
$$

La valeur de $W_{k+1}v$ est obtenu à la sortie de l'algorithme (10.25) dans le vecteur q. L'approche que nous avons utilisée pour obtenir l'algorithme de calcul (10.25) montre pourquoi celui est efficace : il est fondé sur l'algorithm compact (10.23) calculant rapidement $\frac{1}{2}v^{\mathsf{T}}W_{k+1}v$ et le mode inverse de différentiation automatique, que l'on sait ne pas dégrader l'efficacité de (10.23).

Le nombre d'opérations pour le calcul de la direction de ℓ-BFGS par (10.25) est approximativement $4mn$ additions et $4mn$ multiplications.

Pour conclure, résumons les instructions de l'algorithme ℓ-BFGS.

Algorithme 10.9 (ℓ-BFGS)

0. On se donne deux constantes ω_1 et ω_2 pour la recherche linéaire de Wolfe : $0 < \omega_1 < \frac{1}{2}$ et $\omega_1 < \omega_2 < 1$.
   Choix d'un itéré initial $x_1 \in \mathbb{R}^n$ et d'un nombre de mises à jour m.
   Initialisation : $k := 1$, $\bar{m} = 0$.
1. *Test d'arrêt* : si $\nabla f(x_k) = 0$, arrêt de l'algorithme.
2. *Calcul de la direction de descente* d_k : on détermine une matrice initiale W_k^0 et on calcule d_k par l'algorithme (10.25) (sauf si $\bar{m} = 0$, auquel cas on prend $d_k = -W_k^0 g_k$).
3. *Recherche linéaire de Wolfe* : trouver un pas $\alpha_k > 0$ tel que l'on ait (6.11a) et (6.11b).
4. $x_{k+1} := x_k + \alpha_k d_k$.
5. Si $k > m$, effacer (y_{k-m}, s_{k-m}) de la mémoire. Stocker (y_k, s_k).
6. Accroître k de 1 et aller en 1.

On résout aujourd'hui couramment des problèmes avec $n \simeq 10^6 \ldots 10^8$ par l'algorithme ℓ-BFGS, en particulier en météorologie [131, 132] ou océanographie.

Logiciels ▲

De nombreux codes d'optimisation non linéaire intègrent des techniques de quasi-Newton. Signalons deux codes d'optimisation pour problèmes sans contrainte de

grande taille, implémentant l'algorithme ℓ-BFGS : `Lbfgs` et `M1qn3`, tous deux largement diffusés (le dernier en météorologie et océanographie, problèmes ayant parfois jusqu'à 10^8 variables).

Notes ▲

L'algorithme de la sécante pour trouver un zéro d'une fonction non linéaire remonte au moins à Newton, probablement vers 1665 [542 ; I, p. 489-491]. [559]

Le théorème 10.6 et son corollaire 10.7 sont dus à Powell [441 ; 1976]. Ce résultat ne peut pas s'étendre aux fonctions non convexes : on a trouvé des contre-exemples lorsque l'algorithme est globalisé par une recherche linéaire exacte [443 ; 1984], par celle de Wolfe [137 ; 2002] ou par celle prenant le pas α_k donnant le minimum exact le long de la direction de recherche et assurant la condition d'Armijo (6.9) [380 ; 2004]. Ce point noir de l'algorithme n'empêche pas sont utilisation avec succès. Certains auteurs ont proposé des modifications de l'algorithme de manière à pouvoir en montrer la convergence sur des fonctions non convexes, mais cette manière de procédé n'a pas l'approbation de tous. Ainsi Li et Fukushima [365 ; 2001] ont obtenu un résultat de convergence globale et superlinéaire avec une modification du vecteur y_k en $y_k + r_k s_k$, où le scalaire $r_k \sim \|g_k\|$. Comme lot de consolation, mentionnons que l'algorithme de DFP, bien moins efficace que l'algorithme de BFGS, converge pour les problèmes avec 2 variables et une recherche linéaire prenant le premier minimum local [446 ; 2000].

Prise en compte de la parcimonie : technique originale due à Toint [519 ; 1977] ; difficultés de non-existence et de non-définie-positivité relevées par Sorensen [502 ; 1982] ; approche de Fletcher [198 ; 1995] utilisant la fonction ψ de Byrd et Nocedal.

L'algorithme ℓ-BFGS de la section 10.2.5 a été proposé par Nocedal [416]. La dérivation de l'algorithme (10.25) présentée, utilisant la différentiation automatique, est reprise de [228]. Dans les problèmes avec contraintes, c'est l'approximation de hessiennes directes dont on a besoin ; on peut en construire des approximations quasi-newtoniennes à mémoire limitée [92, 91]. Le choix du bon nombre m de mises à jour reste aujourd'hui un sujet intriguant. De manière surprenante, il n'est pas vrai que prendre m le plus grand possible améliore les performances de l'algorithme. Le nombre d'itérations pour atteindre un seuil d'optimalité donné peut facilement varier avec un facteur 3 lorsque m s'échelonne, disons de 5 à 50, avec une efficacité optimale pour des valeurs erratiques de m. Boggs et Byrd [60] ont proposé des techniques efficaces pour déterminer m de manière adaptative au cours des itérations. Lin, Harchaoui et Mairal [367 ; 2017] proposent un algorithme fondé sur la technique ℓ-BFGS, destiné à minimiser $f = f_0 + \psi$, où f_0 est convexe $\mathcal{C}^{1,1}$ et ψ est convexe non lisse (par exemple $\psi = \|\cdot\|_1$ ou $\psi = \mathcal{I}_C$), qui peut se voir comme une méthode ℓ-BFGS inexacte sur la régularisée de Moreau-Yosida de f (section 3.7.2).

Des algorithmes de BFGS et de ℓ-BFGS pour la minimisation d'une fonction réelle de variables complexes sont proposés dans [501].

Divers résultats ont aussi été obtenus pour minimiser une fonction non lisse avec l'algorithme de BFGS [364, 557, 275].

Exercices

10.1. *Formule de BFGS par blocs.* Soient Y, $S \in \mathbb{R}^{n\times p}$ avec S injective et $M \in \mathcal{S}^n_{++}$. On considère le problème

$$\begin{cases} \min_{\bar M}\ \psi(M^{-1/2}\bar M M^{-1/2}) \\ Y = \bar M S \\ \bar M \in \mathcal{S}^n_{++}, \end{cases}$$

où $\psi : \mathcal{S}^n_{++} \to \mathbb{R}$ est la fonction définie par (10.6). Montrez que ce problème a une solution si, et seulement si, $Y^\mathsf{T} S \in \mathcal{S}^n_{++}$. Montrez que, sous cette condition, la solution $\bar M$ du problème est unique et est donnée par l'une des formules suivantes :

$$\bar M = M - MS(S^\mathsf{T} MS)^{-1}S^\mathsf{T} M + Y(Y^\mathsf{T} S)^{-1}Y^\mathsf{T}$$

$$\begin{aligned} \bar W &= \Big(I - S(Y^\mathsf{T} S)^{-1}Y^\mathsf{T}\Big)W\Big(I - Y(Y^\mathsf{T} S)^{-1}S^\mathsf{T}\Big) + S(Y^\mathsf{T} S)^{-1}S^\mathsf{T} \\ &= W + (S - WY)(Y^\mathsf{T} S)^{-1}S^\mathsf{T} + S(Y^\mathsf{T} S)^{-1}(S - WY)^\mathsf{T} \\ &\quad - S(Y^\mathsf{T} S)^{-1}Y^\mathsf{T}(S - WY)(Y^\mathsf{T} S)^{-1}S^\mathsf{T}. \end{aligned}$$

où on a noté $W := M^{-1}$ et $\bar W := \bar M^{-1}$.

10.2. *Formule de mise à jour PSB.* Soient y_k et s_k deux vecteurs de $\mathbb{R}^n$ et M_k une matrice d'ordre n symétrique. On considère le problème en $M \in \mathbb{R}^{n\times n}$ suivant

$$\begin{cases} \min\ \|M - M_k\|_F \\ y_k = Ms_k \\ M = M^\mathsf{T}, \end{cases} \tag{10.26}$$

où $\|\cdot\|_F$ est la norme de Frobenius sur l'ensemble des matrices. Montrez que, si $s_k \neq 0$, le problème (10.26) a une solution unique M_{k+1} et que celle-ci s'écrit

$$M_{k+1} = M_k + \frac{(y_k - M_k s_k)s_k^\mathsf{T} + s_k(y_k - M_k s_k)^\mathsf{T}}{\|s_k\|_2^2} - \frac{(y_k - M_k s_k)^\mathsf{T} s_k}{\|s_k\|_2^4} s_k s_k^\mathsf{T}. \tag{10.27}$$

Si $s_k = 0$ et $y_k \neq 0$, le problème (10.26) n'a pas de solution. Si $s_k = y_k = 0$, le problème (10.26) a comme unique solution $M_{k+1} = M_k$.

Remarque. La formule (10.27) porte le nom de *formule PSB* (Powell-Symétrique-Broyden). En pratique, elle donne généralement de moins bons résultats que la formule de BFGS. On observera que le cas $s_k = 0$ et $y_k \neq 0$ ne peut pas se présenter en optimisation ; quant au cas $s_k = y_k = 0$, il est normalement signe que l'itéré courant est stationnaire.

10.3. *Initialisation de l'algorithme de BFGS.* Montrez que σ_1 et $\bar\sigma_1$ donnés dans (10.20) sont respectivement solutions des problèmes en $(\sigma, M) \in \mathbb{R}\times\mathbb{R}^{n\times n}$ et $(\bar\sigma, W) \in \mathbb{R}\times\mathbb{R}^{n\times n}$ suivants

$$\begin{cases} \min_{\sigma,M}\ \|\sigma I - M\|_F \\ y_1 = Ms_1 \\ M = M^\mathsf{T} \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} \min_{\bar\sigma,W}\ \|\bar\sigma I - W\|_F \\ Wy_1 = s_1 \\ W = W^\mathsf{T}. \end{cases}$$

10.4. *Propriétés de l'algorithme de BFGS.* On considère l'algorithme de BFGS pour minimiser une fonction non linéaire f. On note x_k le k-ième itéré, g_k le gradient de f en x_k, $\mathcal{G}_k := \mathrm{vect}\{g_1, \ldots, g_k\}$, $W_k = M_k^{-1}$ la matrice générée et $\perp_Q$ l'orthogonalité par rapport au produit scalaire associé à une matrice symétrique définie positive Q. Montrez que pour tout $k \geqslant 1$, on a

(*i*) $W_k v \in W_1(\mathcal{G}_k)$, pour tout $v \in \mathcal{G}_k$; en particulier, $W_k g_k \in W_1(\mathcal{G}_k)$;

(*ii*) $W_k v = W_1 v$, pour tout $v \perp_{W_1} \mathcal{G}_k$.

De plus, si $W_1 = \sigma I$, avec $\sigma > 0$, on a

(*iii*) $M_k v \in \mathcal{G}_k$, pour tout $v \in \mathcal{G}_k$;

(*iv*) $M_k v = \sigma v$, pour tout $v \perp_I \mathcal{G}_k$.

Remarque. Ce résultat montre que la direction de recherche est dans $W_1(\mathcal{G}_k)$.

Partie III

Méthodes de l'optimisation avec contraintes

11 Projection et activation ⊖

Dans ce chapitre, nous présentons quelques méthodes d'optimisation dans lequel le critère est non linéaire et les contraintes sont suffisamment simples. Elles s'inspirent directement des techniques de descente en optimisation sans contrainte, en utilisant la notion de direction de descente et en faisant décroître le critère à chaque itération. Elles ont aussi la caractéristique de maintenir la suite des itérés $\{x_k\}$ dans l'ensemble admissible X. Si l'approche est générale, elle ne trouvera son efficacité que si les contraintes sont affines, si bien que le problème devra pouvoir être mis sous la forme suivante :

$$\begin{cases} \min f(x) \\ Ax \leqslant b, \end{cases} \tag{11.1}$$

où $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ est une fonction régulière, A est une matrice $m \times n$ et $b \in \mathbb{R}^m$.

Une direction de descente de f en un point qui n'est pas dans l'ensemble admissible X est de peu d'utilité : si elle permet de faire décroître f, elle n'est d'aucune aide pour ramener les itérés dans l'ensemble admissible. Par conséquent, si on désire utiliser des directions de descente de f, on est forcé de générer des suites $\{x_k\}$ *admissibles*, c'est-à-dire contenues dans X. On est alors amené à introduire la notion de *direction de descente admissible* d_k. De petits pas le long de ces directions permettent de faire décroître f tout en restant dans X. Alors on peut par exemple définir la suite $\{x_k\}$ par $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$, avec α_k suffisamment petit pour que f décroisse et que x_{k+1} soit dans X.

Cette méthode est attrayante par sa simplicité, mais **elle n'est pas convergente**. On connaît en effet un contre-exemple, dû à Wolfe [548 ; 1972]. Nous n'allons pas le décrire en détail, mais il est instructif de comprendre ce qui s'y passe. Dans celui-ci (voir figure 11.1), on minimise sur l'orthant positif ($X = \{x \in \mathbb{R}^3 : x \geqslant 0\}$) une fonction convexe de 3 variables; on utilise la méthode ci-dessus, en prenant $d_k = -g_k$ comme direction de descente admissible; on prend le pas optimal si celui-ci laisse x_{k+1} dans X, sinon on prend le plus grand pas possible de manière à rester dans X. On constate que l'algorithme construit une suite $\{x_k\}$ oscillant entre deux faces de l'orthant positif et convergeant vers un point *non* stationnaire (!) situé sur l'intersection des deux faces. Que se passe-t-il ? Une façon d'interpréter ce résultat est de dire que les bornes ($x \geqslant 0$) de l'ensemble admissible forcent le pas à être trop petit et provoquent ainsi la « fausse » convergence de la suite. On a vu, en effet, au chapitre 6.3, qu'un des devoirs de la recherche linéaire est d'empêcher le pas d'être trop petit afin d'assurer la convergence des méthodes à directions de descente. La présence des contraintes d'inégalité empêche ici de satisfaire cette propriété.

On peut trouver plusieurs remèdes pour éviter cette fausse convergence. L'un d'eux consiste à poursuivre la recherche du pas au delà du *point d'activation* $x_k + \hat{\alpha}_k d_k$ du

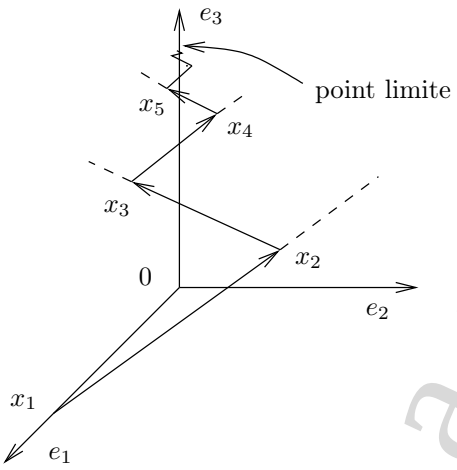


Fig. 11.1. Contre-exemple de Wolfe

chemin $\alpha \mapsto x_k + \alpha d_k$ sur le bord de X. Comme l'on veut que les itérés restent dans X, la recherche se poursuit alors, non pas le long de d_k, mais le long du chemin $\alpha \mapsto x_k + \alpha d_k$ projeté sur X. On parle de *méthodes de projection*. Cette approche sera examinée à la section 11.1. On comprend que pour que celle-ci soit efficace, il faut que la projection sur X soit peu coûteuse. C'est le cas notamment des ensembles X définis par des *contraintes de borne* :

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n : a \leqslant x \leqslant b\}, \quad a \text{ et } b \in \mathbb{R}^n. \tag{11.2}$$

Une autre approche consiste à bloquer certaines contraintes pendant quelques itérations (cas où X est donné par des contraintes d'inégalité affines), c'est-à-dire de considérer certaines contraintes d'inégalité comme des contraintes d'égalité. On parle alors de *méthodes d'activation de contraintes*, aussi appelées *méthodes de pivotage* dans les problèmes de complémentarité [127] (section 11.2). Ces méthodes sont surtout utilisées en *optimisation quadratique*, c'est-à-dire pour la minimisation de fonctions quadratiques en présence de contraintes affines :

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax \leqslant b\}, \quad A : m \times n, \quad b \in \mathbb{R}^m. \tag{11.3}$$

11.1 Méthode du chemin projeté

Dans cette section, nous étudions les méthodes dans lesquelles le chemin de recherche de l'itéré suivant est obtenu en projetant sur X le chemin affine $\alpha \mapsto x_k + \alpha d_k$:

$$x_k(\alpha) := \mathrm{P}_X(x_k + \alpha d_k), \tag{11.4}$$

où $d_k \in \mathbb{R}^n$, $\alpha > 0$ et P_X est un opérateur de projection sur X (voir figure 11.2). Par conséquent, $\alpha \mapsto x_k(\alpha)$ est un chemin de recherche admissible et en prenant

$$x_{k+1} = x_k(\alpha_k), \quad \alpha_k > 0, \tag{11.5}$$

on générera une suite $\{x_k\}$ admissible, c'est-à-dire avec $x_k \in X$.

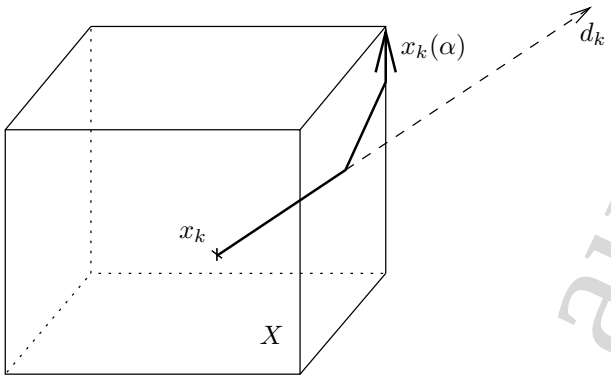


Fig. 11.2. Méthode du chemin projeté

11.1.1 Méthode du gradient projecté

Venons-en maintenant à l'étude d'un algorithme de résolution du problème (11.1), basé sur (11.4)–(11.5). On suppose que X est un convexe fermé non vide de $\mathbb{R}^n$.

La première question qui se pose est de savoir si l'on fait décroître f le long du chemin $x_k(\alpha)$ défini en (11.4). En général, ce n'est pas le cas, tout au moins si d_k est une direction de descente stricte quelconque de f (c.-à-d., une direction vérifiant $g_k^{\mathsf{T}} d_k < 0$, $g_k = \nabla f(x_k)$). On peut en effet construire aisément un exemple où l'on n'a pas

$$f(x_k(\alpha)) < f(x_k), \quad \text{pour } \alpha > 0 \text{ petit.} \tag{11.6}$$

La figure 11.3 illustre une telle situation. La direction d_k est de descente car elle forme avec $-g_k$ un angle plus petit que $\pi/2$ (on suppose que gradient et angle font ici référence au produit scalaire euclidien), ce qui n'est pas le cas du chemin projeté $\alpha \mapsto x_k(\alpha)$. Cependant, si l'on prend $d_k = -g_k$ et donc

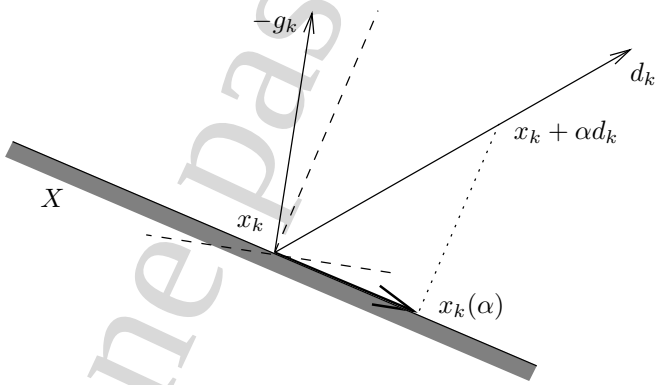


Fig. 11.3. Projection d'une direction de descente d_k quelconque

$$x_k(\alpha) := \mathrm{P}_X(x_k - \alpha g_k), \tag{11.7}$$

la condition (11.6) est vérifiée. Nous allons le voir.

La méthode utilisant le chemin (11.7) comme chemin de descente porte le nom de *méthode du gradient projecté*. Elle a été introduite par Goldstein [243 ; 1964] et Levitin et Polyak [363 ; 1966]. Cette méthode n'est pratiquement utilisable que lorsque la projection sur l'ensemble des contraintes est facile à réaliser, par exemple dans le cas de contraintes de borne (11.2). Les lemmes 11.1, 11.2 et 11.3 donnent quelques propriétés fondamentales de cette méthode.

Lemme 11.1 *Soit X un convexe fermé non vide de $\mathbb{R}^n$. Alors, le point $\bar{x} \in X$ est un point stationnaire du problème (11.1) si, et seulement si,*

$$\bar{x} = \mathrm{P}_X(\bar{x} - \alpha \nabla f(\bar{x})), \tag{11.8}$$

pour un (ou tout) $\alpha > 0$.

Démonstration. D'après la proposition 4.7, lorsque X est convexe, la stationnarité de f en $\bar{x}$ s'exprime par

$$\langle \nabla f(\bar{x}), y - \bar{x} \rangle \geqslant 0, \quad \forall y \in X.$$

Pour $\alpha > 0$, cette condition est équivalente à

$$\langle \bar{x} - (\bar{x} - \alpha \nabla f(\bar{x})), y - \bar{x} \rangle \geqslant 0, \quad \forall y \in X.$$

Comme $\bar{x} \in X$, la caractérisation (2.27a) implique que cette condition est équivalente à (11.8). □

En conséquence de ce lemme, l'itéré courant x_k de l'algorithme (11.5) est un point stationnaire du problème (11.1) si, et seulement si, $x_{k+1} = x_k$.

Lemme 11.2 *On suppose que X est un convexe fermé non vide de $\mathbb{R}^n$ et pour $x_k \in X$, on considère le chemin $\alpha \mapsto x_k(\alpha)$ défini en (11.7). Alors, pour tout $\alpha \in \mathbb{R}$, on a*

$$\alpha \langle g_k, x_k(\alpha) - x_k \rangle \leqslant -\|x_k(\alpha) - x_k\|^2. \tag{11.9}$$

Démonstration. Comme $x_k \in X$ et que $x_k(\alpha)$ est la projection de $x_k - \alpha g_k$ sur X, la caractérisation (2.27a) donne

$$\langle x_k - x_k(\alpha), x_k(\alpha) - x_k + \alpha g_k \rangle \geqslant 0.$$

On en déduit (11.9). □

Ce résultat montre que

$$s_k(\alpha) := x_k(\alpha) - x_k$$

est une direction de descente de f en x_k, quel que soit $\alpha > 0$: l'angle entre $-g_k$ et $s_k(\alpha)$ reste toujours inférieur à $\pi/2$.

Lemme 11.3 *On suppose que X est un convexe fermé non vide de $\mathbb{R}^n$, que f est de classe C^1 et que sa dérivée est lipschitzienne, de module L. Soit $x_k \in X$. Alors, si $0 < \sigma < 1$ et $0 \leqslant \alpha \leqslant 2(1-\sigma)/L$, on a*

$$f(x_k(\alpha)) \leqslant f(x_k) + \sigma \langle g_k, x_k(\alpha) - x_k \rangle. \tag{11.10}$$

Démonstration. On a

$$\begin{aligned} f(x_k(\alpha)) - f(x_k) &= \int_0^1 f'(x_k + t s_k(\alpha)) \cdot s_k(\alpha)\, dt \\ &\leqslant \langle g_k, s_k(\alpha) \rangle + \frac{L}{2} \|s_k(\alpha)\|^2. \end{aligned}$$

En utilisant (11.9), on trouve

$$f(x_k(\alpha)) - f(x_k) \leqslant \left(1 - \frac{L\alpha}{2}\right) \langle g_k, s_k(\alpha) \rangle.$$

En remarquant que, d'après (11.9), $\langle g_k, s_k(\alpha) \rangle$ est négatif lorsque α est positif, on en déduit (11.10) lorsque $0 \leqslant \alpha \leqslant 2(1-\sigma)/L$. □

Dès lors, lorsque x_k n'est pas stationnaire, les inégalités (11.9) et (11.10) montrent que l'on fait décroître f en se déplaçant le long du chemin $\alpha \mapsto x_k(\alpha)$ ($\alpha > 0$ petit).

Les deux résultats suivants donnent des méthodes de détermination du pas α qui assurent la convergence de la méthode du gradient projecté : pas petit (théorème 11.4) et pas d'Armijo (théorème 11.5). Ce sont des extensions naturelles de résultats connus pour les problèmes sans contraintes.

Théorème 11.4 *Soit X un convexe fermé non vide de $\mathbb{R}^n$. Supposons que f soit bornée inférieurement sur X, que f soit de classe C^1 et que sa dérivée soit lipschitzienne de module L. Alors l'algorithme du gradient projecté, avec un pas α_k pris dans un compact de $]0, 2/L[$ génère une suite de points $\{x_k\}$ telle que*

$$\|x_{k+1} - x_k\| \to 0.$$

De plus, tous les points d'adhérence de $\{x_k\}$ sont stationnaires.

Démonstration. Si α_k est dans un compact de $]0, 2/L[$, on peut trouver $\sigma \in]0, 1[$ tel que

$$\alpha_k \in \left[\sigma, \frac{2(1-\sigma)}{L}\right].$$

Alors, d'après les lemmes 11.2 et 11.3, on a

$$\begin{aligned} f(x_{k+1}) &\leqslant f(x_k) - \sigma\frac{\|x_{k+1}-x_k\|^2}{\alpha_k} \\ &\leqslant f(x_k) - \frac{\sigma L}{2(1-\sigma)}\|x_{k+1}-x_k\|^2. \end{aligned}$$

Comme f est bornée inférieurement sur X et que $f(x_k)$ décroît, $f(x_{k+1})-f(x_k)\to 0$. On en déduit que $\|x_{k+1}-x_k\|\to 0$.

Si $\bar{x}$ est un point d'adhérence de $\{x_k\}$, on peut trouver une sous-suite d'indices $\mathcal{K}$ telle que $x_k\to\bar{x}$, pour $k\to\infty$ dans $\mathcal{K}$. Comme $\|x_{k+1}-x_k\|\to 0$, on a aussi $x_{k+1}\to\bar{x}$, pour $k\to\infty$ dans $\mathcal{K}$. On peut également supposer que $\alpha_k\to\bar{\alpha}$, pour $k\to\infty$ dans $\mathcal{K}$ (au besoin on extrait une nouvelle sous-suite de $\mathcal{K}$). En passant à la limite dans

$$x_{k+1} = \mathrm{P}_X(x_k - \alpha_k\nabla f(x_k))$$

(on se rappelle que P_X est continu, proposition 2.25), on a

$$\bar{x} = \mathrm{P}_X(\bar{x} - \bar{\alpha}\nabla f(\bar{x})).$$

Comme $\bar{\alpha}>0$, le lemme 11.3 montre que $\bar{x}$ est stationnaire. □

En général la constante de Lipschitz de f' n'est pas connue et il n'est pas réaliste (et il est souvent inefficace) de choisir le pas comme dans le théorème 11.4. Il est préférable de déterminer α_k selon la règle suivante qui est une extension de la règle d'Armijo utilisée en optimisation sans contrainte (voir section 6.3.3).

On se donne deux constantes $\sigma\in]0,1[$ et $\beta\in]0,1[$ ainsi qu'une estimation $\alpha_k^0>0$ du pas à l'itération k (il est important que $\{\alpha_k^0\}$ et $\{1/\alpha_k^0\}$ forment des suites bornées). On prend $\alpha_k=\beta^{j_k}\alpha_k^0$, j_k étant le plus petit entier tel qu'avec ce α_k, on ait

$$f(x_k(\alpha_k)) \leqslant f(x_k) + \sigma\langle g_k, x_k(\alpha_k)-x_k\rangle. \tag{11.11}$$

Lorsque f est régulière, on peut toujours trouver un tel pas α_k. En effet, d'après le lemme 11.3, cette inégalité est vérifiée lorsque α_k est plus petit que $2(1-\sigma)/L$ (où L est la constante de Lipschitz de f). Ceci montre que par la règle ci-dessus, on a

$$\alpha_k \geqslant \min\left(\alpha_k^0, \frac{2(1-\sigma)\beta}{L}\right). \tag{11.12}$$

On prend ensuite $x_{k+1}=x_k(\alpha_k)$.

Le théorème suivant montre que cette manière de procéder est satisfaisante.

Théorème 11.5 ([42]) *Soit X un convexe fermé non vide de $\mathbb{R}^n$. Supposons que f soit bornée inférieurement sur X, que f soit de classe C^1, avec une dérivée lipschitzienne. Alors, l'algorithme du gradient projeté, avec un pas α_k déterminé par l'extension de la règle d'Armijo (11.11), génère une suite $\{x_k\}$ telle que*

$$\|x_{k+1}-x_k\|\to 0. \tag{11.13}$$

De plus, tous les points d'adhérence de $\{x_k\}$ sont stationnaires.

DÉMONSTRATION. D'après (11.11), le lemme 11.2 et le fait que $\alpha_k \leqslant \alpha_k^0 \leqslant C$, on a

$$f(x_{k+1}) \leqslant f(x_k) - \frac{\sigma}{C}\|x_{k+1} - x_k\|^2.$$

Comme $f(x_k)$ converge, on en déduit (11.13). Si $\bar{x}$ est un point d'adhérence de $\{x_k\}$, on peut trouver une sous-suite d'indices $\mathcal{K}$ telle que

$$x_k \to \bar{x}, \quad \bar{\alpha}_k \to \bar{\alpha}, \quad \text{pour } k \to \infty \text{ dans } \mathcal{K}.$$

D'après (11.12) et le fait que $\{1/\alpha_k^0\}$ est bornée, on a $\bar{\alpha} > 0$. On s'y prend ensuite comme à la fin de la preuve de le théorème 11.4. □

Étant une extension de la méthode de la plus forte pente, la méthode du gradient projeté n'a pas une bonne vitesse de convergence. On peut toutefois utiliser les idées développées ci-dessus pour définir une méthode de Newton projetée : voir Bertsekas [44 ; 1982]. On peut aussi préconditionner la méthode en utilisant des produits scalaires différents pour la définition du gradient de f et pour la projection sur X : voir Gafni et Bertsekas [211 ; 1984].

11.1.2 Identification des contraintes actives ▲

Une propriété intéressante de la méthode du gradient projeté est sa faculté d'identifier les contraintes actives en la solution en un nombre fini d'itérations. Cette propriété est utilisée dans certains algorithmes comme *procédure anti-zigzag*, permettant donc d'éviter la non-stabilisation des contraintes actives au cours des itérations (phénomène freinant ou empêchant la convergence effective).

Voir Bertsekas [42 ; 1976] pour les contraintes de borne, Gafni et Bertsekas [211 ; 1984], Dunn [170 ; 1987], Calamai et Moré [93 ; 1987], Burke et Moré [87 ; 1988], Bonnans [64 ; 1989], Moré et Toraldo [402 ; 1989], Al-Kkayyal and Kyparisis [4 ; 1990], De Angelis et Toraldo [13 ; 1993], Wright [551 ; 1993], Burke et Moré [88 ; 1994].

11.2 Méthodes d'activation de contraintes ▲

La méthode que nous décrivons dans cette section est fondée sur une idée assez générale. Toutefois, d'un point de vue pratique, elle ne pourra être utilisée avec efficacité qu'en optimisation quadratique. Ces restrictions apparaîtront au cours de l'exposé.

11.2.1 Motivation et schéma des méthodes

Pour construire une suite minimisante $\{x_k\}$ admissible, c'est-à-dire contenue dans X, on peut s'appuyer sur la notion de direction de descente admissible.

Définition 11.6 Soit $x \in X$. On dit que d est une *direction admissible* en x pour X si $x + \alpha d \in X$ pour tout $\alpha > 0$ suffisamment petit (de manière plus précise : il existe $\bar{\alpha} > 0$ tel que pour $0 \leqslant \alpha \leqslant \bar{\alpha}$ on ait $x + \alpha d \in X$). On dit que d est une *direction de descente admissible* en x pour le problème (11.1), s'il existe $\bar{\alpha} > 0$ tel que pour $0 \leqslant \alpha \leqslant \bar{\alpha}$:

$$x + \alpha d \in X \quad \text{et} \quad f(x + \alpha d) \leqslant f(x). \tag{11.14}$$

Il s'agit donc d'une direction de descente (non stricte) de f telle qu'avec un petit déplacement dans cette direction, on reste dans X. □

On ne peut pas toujours trouver une direction vérifiant ces conditions, mais si X est convexe et x_k n'est pas stationnaire, une telle direction existe toujours. En effet, du fait de la convexité de X, les directions de la forme $d_k = y_k - x_k$, où $y_k \in X$ et $y_k \neq x_k$ sont des directions admissibles pour X. Alors, s'il n'existait pas de direction de descente admissible en x_k, cela voudrait dire que, pour $y_k \in X$ fixé, il existerait une suite de $\alpha^i > 0$, $\alpha^i \to 0$, telle que $f(x_k + \alpha^i(y_k - x_k)) > f(x_k)$. En passant à la limite, on trouverait

$$\langle g_k, y_k - x_k \rangle \geqslant 0, \quad \forall y_k \in X.$$

Ceci impliquerait la stationnarité de x_k (proposition 4.7). Nous supposerons donc que X **est convexe** pour pouvoir trouver à chaque étape une direction de descente admissible.

Nous allons utiliser des directions admissibles dans une approche fondé sur la notion d'*activation de contraintes* (en anglais, *Active Set Methods*). L'idée est de bloquer — on dit aussi *activer* — certaines contraintes définissant X, c'est-à-dire que des contraintes d'inégalité seront considérées comme contraintes d'égalité pendant un certain nombre d'itérations (on évite ainsi l'oscillation qui se produit dans le contre-exemple de Wolfe). Ceci n'est concevable que si les contraintes sont affines, sinon la réalisation de $c_i(x_k) = 0$ est trop coûteuse. Pour simplifier l'exposé, nous supposerons qu'il n'y a pas de contraintes d'égalité.

Le problème (P) à résoudre dans cette section est donc

$$(P) \quad \begin{cases} \min f(x) \\ Ax \leqslant b, \end{cases} \tag{11.15}$$

où A est une matrice $m \times n$ et $b \in \mathbb{R}^m$. L'ensemble admissible est convexe (clair). Les équations d'optimalité s'écrivent en $(\bar{x}, \bar{\lambda})$ (les contraintes étant affines, elles sont qualifiées; on peut donc trouver un multiplicateur $\bar{\lambda}$) :

$$\begin{cases} \nabla f(\bar{x}) + A^{\mathsf{T}}\bar{\lambda} = 0, \\ A\bar{x} \leqslant b, \\ \bar{\lambda} \geqslant 0, \\ \bar{\lambda}^{\mathsf{T}}(A\bar{x} - b) = 0. \end{cases} \tag{11.16}$$

On note $A_{(j)}$, la j-ième ligne de A. Si $J \subseteq [1:m]$ est un ensemble d'indices, on note A_J la matrice $|J| \times n$, obtenue en extrayant de A ses lignes $j \in J$. On définit $b_{(j)}$ et b_J de manière analogue. Enfin, l'ensemble actif en x_k, $I^0(x_k)$, se notera ici simplement

$$I_k = \{j : 1 \leqslant j \leqslant m,\ A_{(j)}x_k = b_{(j)}\}.$$

Soit T_k une partie de I_k qu'on appelle *ensemble de travail*. On considère alors le problème

$$(\mathrm{P}_{T_k}) \quad \begin{cases} \min f(x) \\ A_{T_k} x = b_{T_k}, \end{cases} \tag{11.17}$$

dans lequel x est contraint à appartenir à l'*espace actif*

$$E_{T_k} = \{x \in \mathbb{R}^n : A_{T_k} x = b_{T_k}\}.$$

Ce problème est en général beaucoup plus facile à résoudre que le problème (11.15). Ses équations d'optimalité du premier ordre s'écrivent : $\exists \lambda_k \in \mathbb{R}^m$ tel que

$$\begin{cases} \nabla f(x_k) + A_{T_k}^{\mathsf{T}} (\lambda_k)_{T_k} = 0 \\ A_{T_k} x_k = b_{T_k}. \end{cases} \tag{11.18}$$

On a le résultat instructif suivant.

Proposition 11.7 *Soient $\bar{x}$ une solution du problème (P) et x_k une solution du problème (P_{T_k}), dans lequel $T_k = I^0(\bar{x})$.*
(i) Si f est convexe sur E_{T_k} et $x_k \in X$, alors x_k est solution de (P).
(ii) Si f est strictement convexe sur E_{T_k}, alors $x_k = \bar{x}$.

Démonstration. Montrons que

$$f(x_k) = f(\bar{x}).$$

D'une part, $f(x_k) \leqslant f(\bar{x})$, car $\bar{x}$ est solution du problème (P_{T_k}) auquel on ajoute la contrainte d'appartenance à X. D'autre part, si $d_k = x_k - \bar{x}$, la convexité de f sur E_{T_k} permet d'écrire

$$f(\bar{x}) + f'(\bar{x}) \cdot d_k \leqslant f(x_k).$$

Alors, si $f(x_k) < f(\bar{x})$, on aurait $f'(\bar{x}) \cdot d_k < 0$ et d_k serait une direction de descente stricte de f en $\bar{x}$:

$$f(\bar{x} + \alpha d_k) < f(\bar{x}), \quad \text{pour } \alpha > 0 \text{ petit.}$$

Mais comme $d_k \in \mathcal{N}(A_{I^0(\bar{x})})$, on a

$$\bar{x} + \alpha d_k \in X, \quad \text{pour } \alpha > 0 \text{ petit.}$$

Ces deux dernières conclusions contrediraient l'optimalité de $\bar{x}$. Donc $f(x_k) = f(\bar{x})$.

Les conditions (i) et (ii) de l'énoncé se déduisent immédiatement de ce résultat. □

Ce résultat montre que pour minimiser une fonction f strictement convexe sur X, il y a deux choses à faire : identifier $I^0(\bar{x})$, c'est-à-dire trouver les indices des contraintes actives en la solution, et minimiser f sur l'espace actif correspondant.

Donc, si f est strictement convexe et le problème (P) a une solution, on pourrait s'y prendre de la manière suivante. On calcule la solution de (P_{T_k}) pour toutes les combinaisons possibles d'ensemble actif (en nombre fini) — on écarte les problèmes sans solution. Parmi ces solutions, on ne retient que celles qui sont dans X. Parmi

ces dernières, celle qui donne la plus petite valeur de f est la solution de (11.15). Cependant, *cette manière de procéder est à proscrire*, du fait du nombre exponentiel de problèmes (P_{T_k}) à résoudre (il y en a 2^m si on résout aussi ceux qui ont plus de n contraintes d'égalité, ce qui n'est pas inutile car la matrice extraite A_{T_k} peut être de rang inférieur à n).

Les méthodes d'activation de contraintes gardent de cette démarche l'idée de résoudre un nombre fini (et restreint) de problèmes (P_{T_k}), en les sélectionnant de manière qu'on espère appropriée. À chaque itération, on dispose d'un ensemble de travail $T_k \subseteq I_k$ servant à identifier $I^0(\bar{x})$. Celui-ci est mis à jour après une phase de minimisation (éventuellement partielle) de f sur l'espace actif E_{T_k} correspondant. Voici précisément comment ces algorithmes s'y prennent.

Schéma 11.8 (activation de contraintes)

1. Initialisation : choisir $x_1 \in X$ $(Ax_1 \leqslant b)$ et $T_1 \subseteq I_1$;
2. Pour $k = 1, 2, \ldots$ faire :
   - 2.1. Si x_k est un point stationnaire de (P_{T_k}) et $(\lambda_k)_{T_k}$ est un multiplicateur associé, alors :
     - 2.1.1. Si $(\lambda_k)_{T_k} \geqslant 0$, x_k est un point stationnaire de (P) et on s'arrête;
     - 2.1.2. Sinon on désactive des contraintes correspondant à des $(\lambda_k)_{(j)} < 0$, $j \in T_k$ (mise à jour de T_k); On prend $x_{k+1} := x_k$; On passe à l'itération suivante;
   - 2.2. Trouver une direction de descente admissible d_k pour (P_{T_k}) en x_k;
   - 2.3. Par une règle de recherche linéaire « convenable », trouver un pas $\alpha_k \geqslant 0$ tel que $x_{k+1} := x_k + \alpha_k d_k \in X$;
   - 2.4. Choisir T_{k+1} tel que $T_k \subseteq T_{k+1} \subseteq I_{k+1}$; Si $\alpha_k = 0$ en 2.3, alors il faut que pour un indice $l \in I_k \setminus T_k$ d'une contrainte sur laquelle on bute en x_k dans la direction d_k, on ait $l \in T_{k+1}$.

Cet algorithme demande quelques explications, notamment en ce qui concerne les affirmations qui y sont faites. Nous allons les donner.

Avant cela, remarquons que tout n'est pas spécifié dans cet algorithme : à l'étape 2.1.2, on ne dit pas si on désactive une ou toutes les contraintes à multiplicateur strictement négatif; à l'étape 2.2, on ne précise pas comment on doit déterminer la direction d_k; à l'étape 2.3, la règle de recherche linéaire n'est pas très explicite; enfin, à l'étape 2.4, un certain choix est laissé à l'utilisateur quant à la détermination de T_{k+1}. Il ne s'agit donc que d'un schéma d'algorithme qu'on adaptera à chaque situation. Remarquons également qu'on ne désactive des contraintes qu'à l'étape 2.1.2, lorsque x_k est solution de (P_{T_k}), et qu'on n'active des contraintes qu'à l'étape 2.4.

L'affirmation de l'étape 2.1.1 est justifiée parce que si x_k est point stationnaire de (P_{T_k}), on a (11.18). On voit alors qu'en prenant $\bar{x} = x_k$ et $\bar{\lambda} \in \mathbb{R}^m$ avec

$$\bar{\lambda}_{(i)} = \begin{cases} (\lambda_k)_{(i)} & \text{si } i \in T_k \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases}$$

le couple $(\bar{x}, \bar{\lambda})$ vérifie (11.16). Pour avoir un minimum de (P), il suffirait que x_k soit un minimum de (P_{T_k}) avec $\nabla^2 f(x_k)$ défini positif sur E_{T_k} et que les composantes de $(\lambda_k)_{T_k}$ soient strictement positives (utiliser directement le théorème **??** et la remarque **??**). Ce n'est pas ce que l'algorithme teste; il ne pourra donc trouver que des points stationnaires.

À l'étape 2.1.2, l'intérêt de désactiver des contraintes correspondant à des multiplicateurs strictement négatifs est de pouvoir, *en général*, faire décroître f à l'itération suivante. En effet, supposons que l'on désactive les contraintes d'indices $j_1 \in T_k$, ..., $j_p \in T_k$, correspondant à des multiplicateurs $(\lambda_k)_{(j_1)}$, ..., $(\lambda_k)_{(j_p)}$ strictement négatifs. Supposons également que A_{T_k} soit surjective; elle a donc un inverse à droite que l'on note $A_{T_k}^-$. Alors, en prenant des coefficients positifs α_1, ..., α_p, non tous nuls, la direction

$$d = -\sum_{i=1}^{p} \alpha_i A_{T_k}^- e_{T_k}^{j_i}$$

(e^j est le j-ième vecteur de base de $\mathbb{R}^m$ et $e_{T_k}^j$ est le vecteur extrait) vérifie

$$A_{T_k} d = -\sum_{i=1}^{p} \alpha_i e_{T_k}^{j_i}. \tag{11.19}$$

En utilisant l'équation d'optimalité de x_k, on a

$$f'(x_k) \cdot d = -(\lambda_k)_{T_k}^{\mathsf{T}} A_{T_k} d = \sum_{i=1}^{p} \alpha_i (\lambda_k)_{(j_i)} < 0.$$

Ceci montre que d est une direction de descente de f en $x_k = x_{k+1}$. On déduit aussi de (11.19) que $A_{(j)} d = 0$, pour $j \in T_k \setminus \{j_1, \ldots, j_p\} = T_{k+1}$ et donc que d est admissible pour $(\mathrm{P}_{T_{k+1}})$. Mais bien que l'on ait $A_{(j_i)} d = -\alpha_i \leqslant 0$, pour $i = 1, \ldots, p$, il se peut que d ne soit pas admissible pour (P), parce qu'il peut y avoir un indice $j \in I_k \setminus T_k$ pour lequel $A_{(j)} d > 0$. On aurait alors un pas nul à l'étape 2.3 de l'itération suivante avec un danger de *cyclage* (on retourne périodiquement au même ensemble de travail sans bouger en x). Comme notre discussion l'indique, ceci ne se produira pas si $\mathcal{R}(A_{T_k}^{\mathsf{T}}) = \mathcal{R}(A_{I_k}^{\mathsf{T}})$ et si A_{T_k} est surjective. En particulier, si A_{I_k} est surjective, il suffira de prendre $T_k = I_k$. On est donc conduit à la définition suivante.

Définition 11.9 On dit que les contraintes $Ax \leqslant b$ sont *non dégénérées* si $A_{I^0(x)}$ est surjective pour tout x vérifiant $Ax \leqslant b$. □

Comme à l'étape 2.3, x_k n'est pas stationnaire pour (P_{T_k}), on peut trouver une direction de descente admissible pour ce problème.

Il sera utile de calculer le *pas d'activation* $\hat{\alpha}_k$, c'est-à-dire le pas α maximal laissant $x_k + \alpha d_k$ dans X. On doit avoir $\hat{\alpha}_k$ maximal tel que

$$A_{(j)}(x_k + \hat{\alpha}_k d_k) \leqslant b_{(j)}, \quad \forall j.$$

Comme $Ax_k \leqslant b$, il suffit de considérer les indices j tels que $A_{(j)} d_k > 0$. On voit que

$$\hat{\alpha}_k = \min_{j:A_{(j)}d_k>0} \frac{b_{(j)} - A_{(j)}x_k}{A_{(j)}d_k}. \tag{11.20}$$

Par convention, $\hat{\alpha}_k = +\infty$ si $A_{(j)}d_k \leqslant 0$ pour tout j.

L'algorithme d'activation de contraintes s'utilise avec plus ou moins de succès pour la minimisation de fonctions régulières *quelconques* en présence de contraintes linéaires, avec une légère modification toutefois. Lorsque la fonction n'est pas quadratique, calculer une solution exacte de (P_{T_k}) est une tâche longue et coûteuse. On se contente alors de tester à l'étape 2.1 si x_k est « presque » stationnaire et si c'est le cas, on désactive des contraintes correspondant à des multiplicateurs négatifs.

Comme on le comprend, la nécessité de devoir désactiver des contraintes afin d'identifier l'espace actif au point optimal – ce qui ne peut se faire en toute sécurité qu'en des points stationnaires d'un problème (P_{T_k}) – fait que la méthode d'activation de contraintes convient préférentiellement à la minimisation de fonctions quadratiques :

$$f(x) = \frac{1}{2}x^{\mathsf{T}}Qx + q^{\mathsf{T}}x, \tag{11.21}$$

où Q est une matrice symétrique d'ordre n et $q \in \mathbb{R}^n$. Dans la suite nous allons voir comment préciser l'algorithme pour qu'il soit convergent dans les deux cas suivants :

- Q est définie positive (optimisation quadratique strictement convexe),
- Q est semi-définie positive (optimisation quadratique convexe).

Le second cas inclut le premier, mais l'introduction progressive des solutions algorithmiques aidera à la compréhension des méthodes. Lorsque Q est indéfinie le problème peut avoir de nombreuses solutions locales et la recherche d'un minimum local est plus difficile; quant à la recherche du minimum global, c'est un problème très difficile (NP-complet, dans la terminologie de la théorie de la complexité).

11.2.2 Algorithme de Rosen

Notes

La méthode du gradient projeté a été à l'origine proposée par Goldstein [243 ; 1964] ainsi que Levitin et Polyak [363 ; 1966] pour minimiser une fonction différentiable sur un convexe fermé non vide de $\mathbb{R}^n$. Le théorème 11.4 est repris de ces articles. Le théorème 11.5 est repris de Bertsekas [42 ; 1976].

Pour l'algorithme du gradient projeté, voir Calamai et Moré [93 ; 9187].

Exercices

11.1. *Projection sur un pavé.* Pour $l \in (\mathbb{R} \cup \{-\infty\})^n$ et $u \in (\mathbb{R} \cup \{+\infty\})^n$ tels que $l \leqslant u$, on définit le pavé $[l, u] := \{x \in \mathbb{R}^n : l \leqslant x \leqslant u\}$. Le projeté $\bar{x} = \mathrm{P}_{[l,u]}(x)$ de $x \in \mathbb{R}^n$ sur $[l, u]$, pour le produit scalaire euclidien, est donnée par

$$\bar{x}_i = \begin{cases} l_i & \text{si} \quad x_i < l_i \\ x_i & \text{si} \quad l_i \leqslant x_i \leqslant u_i \\ u_i & \text{si} \quad u_i < x_i. \end{cases}$$

En particulier, le projeté orthogonal de $x \in \mathbb{R}^n$ sur l'orthant positif $\mathbb{R}^n_+$ est $x^+ := \max(0, x)$ (le maximum est pris composante par composante).

11.2. *Gradient projeté.* Soient X une partie *convexe* d'un espace euclidien $\mathbb{E}$ et $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R}$ une fonction dérivable en $x \in X$. Le *gradient projeté* de f en x est la projection orthogonale du gradient $\nabla f(x)$ de f en x sur $-\operatorname{T}_x X$. On le note

$$g^{\mathrm{P}}(x) := \operatorname{P}_{-\operatorname{T}_x X} \nabla f(x).$$

1) On a aussi
$$g^{\mathrm{P}}(x) := -\operatorname{P}_{\operatorname{T}_x X}(-\nabla f(x)).$$
2) La condition d'optimalité du premier ordre $\nabla f(x) \in (\operatorname{T}_x X)^+$ (théorème 4.6) est équivalente à l'équation $g^{\mathrm{P}}(x) = 0$.
3) S'il est non nul, l'opposé du gradient projeté est une direction de descente de f en x, car on a
$$\langle \nabla f(x), -g^{\mathrm{P}}(x) \rangle \leqslant -\|g^{\mathrm{P}}(x)\|^2.$$
4) On simplifie les notations en introduisant $g := \nabla f(x)$ et $g^{\mathrm{P}} := g^{\mathrm{P}}(x)$. Alors, quel que soit $\alpha \geqslant 0$, on a
$$\operatorname{P}_X(x - \alpha g) = x - \alpha g^{\mathrm{P}} \qquad \Longleftrightarrow \qquad x - \alpha g^{\mathrm{P}} \in X, \tag{11.22}$$
autrement dit, la projection du chemin émanant de x et porté par l'opposé du gradient se confond avec le chemin émanant de x et porté par l'opposé du gradient projeté, tant que ce dernier chemin est dans X. Par ailleurs, lorsque X est polyédrique, les propriétés dans (11.22) ont lieu pour tout $\alpha \geqslant 0$ petit.

Supposons maintenant que $\mathbb{E} = \mathbb{R}^n$, que l'on munit du produit scalaire euclidien. Pour $l \in (\mathbb{R} \cup \{-\infty\})^n$ et $u \in (\mathbb{R} \cup \{+\infty\})^n$ tels que $l < u$, on définit le pavé $[l, u] := \{x \in \mathbb{R}^n : l \leqslant x \leqslant u\}$ et on considère un point $x \in [l, u]$.

5) $\operatorname{T}_x[l, u] = \{d \in \mathbb{R}^n : d_i \geqslant 0 \text{ si } x_i = l_i,\ \ d_i \leqslant 0 \text{ si } x_i = u_i\}$.
6) Pour tout $i \in [1 : n]$, on a
$$[g^{\mathrm{P}}(x)]_i = \begin{cases} \min(0, \frac{\partial f}{\partial x_i}(x)) & \text{si } l_i = x_i \\ \frac{\partial f}{\partial x_i}(x) & \text{si } l_i < x_i < u_i \\ \max(0, \frac{\partial f}{\partial x_i}(x)) & \text{si } \quad x_i = u_i. \end{cases}$$
7) Si x minimise f sur $[l, u]$, alors
$$\frac{\partial f}{\partial x_i}(x) \begin{cases} \geqslant 0 & \text{si } l_i = x_i \\ = 0 & \text{si } l_i < x_i < u_i \\ \leqslant 0 & \text{si } \quad x_i = u_i. \end{cases}$$

11.3. *Projection sur l'intersection d'un pavé et d'une contrainte affine.*

11.4. *Projection sur* $\mathbb{R}^n_{\leqslant}$.

12 Pénalisation

Cette théorie et ces phénomènes nous montrent comment on peut amener autrui à modifier ses comportements sans recourir à l'autorité, ni même à quelque stratégie persuasive, mais par des moyens détournés.

J.-L. Beauvois et R.-V. Joule (1987). Petit traité de manipulation à l'usage des honnêtes gens [34].

12.1 Vue d'ensemble

La pénalisation est un concept simple qui permet de transformer un problème d'optimisation avec contraintes en *un* problème ou en *une suite* de problèmes d'optimisation sans contrainte ou avec des contraintes simples. C'est un concept qui a une utilité à la fois théorique et numérique. Ce que le qualificatif « simple » signifie dépendra du contexte, des questions que l'on se pose, de la disponibilité d'algorithmes de résolution.

En analyse, l'approche par pénalisation est parfois utilisée pour étudier un problème d'optimisation dont certaines contraintes sont difficiles à prendre en compte, alors que le problème pénalisant ces contraintes difficiles a des propriétés (l'existence de solution par exemple) mieux comprises ou plus simples à mettre en évidence. Si l'on a de la chance ou si la pénalisation est bien choisie, des *passages à la limite* parfois délicats permettent d'obtenir des propriétés du problème original. Par exemple, on peut obtenir des conditions d'optimalité d'un problème avec contraintes, à partir des conditions d'optimalité des problèmes pénalisés ([192, 86], proposition 12.10). D'autre part, comme nous allons le souligner ci-dessous, la pénalisation est un outil permettant d'étudier les problèmes d'optimisation avec et sans contrainte dans un même formalisme.

D'un point de vue numérique, cette transformation en problèmes sans contrainte (ou avec contraintes simples) permet d'utiliser des algorithmes d'optimisation sans contrainte (ou avec ces contraintes simples) pour obtenir la solution de problèmes dont l'ensemble admissible peut avoir une structure complexe. Cela semble merveilleux, inespéré, de voir que l'on puisse ainsi utiliser des algorithmes qui ne cherchent qu'à minimiser une fonction pour trouver des points qui, en plus d'être optimaux, sont admissibles. Cette approche est de ce fait très souvent utilisée. Elle permet d'obtenir une solution de qualité suffisante rapidement sans avoir à entrer dans l'algorithmique

sophistiquée de l'optimisation avec contraintes. Ce n'est cependant pas une technique universelle, car elle a ses propres inconvénients : non-différentiabilité, nécessité de minimiser une *suite* de fonctions, parfois de plus en plus mal conditionnées, paramétrage délicat. C'est cette approche qui est suivie, avec un raffinement remarquable, dans les méthodes de points intérieurs (chapitres 16, 16 et **??**), conduisant ainsi à des algorithmes polynomiaux pour de grandes familles de problèmes d'optimisation.

La pénalisation peut intervenir dans un contexte très général. On désigne par $\mathbb{E}$ un ensemble arbitraire, par X une partie de $\mathbb{E}$ et par $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R}$ une fonction. On considère le problème de minimiser f sur X. L'ensemble admissible X pourra être l'intersection de deux ensembles :

$$X := X_r \cap X_s.$$

L'ensemble X_r est celui défini par des contraintes qui seront *relaxées* ou *relâchées* par la pénalisation. Théoriquement, elles ne seront vérifiées que lorsqu'un paramètre de pénalisation atteindra sa limite ; d'une point de vue numérique, elles ne seront vérifiées qu'à la convergence des algorithmes. L'ensemble X_s est celui des contraintes *simples* ou *strictes*, qui seront maintenues sans être relaxées par la pénalisation. Formalisons cela. Le problème considéré s'écrit donc

$$(P_X) \qquad \inf_{x \in X r \cap X_s} f(x)$$

et les différentes techniques de pénalisation que nous verrons consistent souvent à transformer ce problème par un ou des problème(s) de la forme

$$(P_r) \qquad \inf_{x \in X_s} \Theta_r(x),$$

où $\Theta_r(x)$ est obtenu en ajoutant à $f(x)$ le terme $r\, p(x)$:

$$\Theta_r := f + r\, p. \tag{12.1}$$

Ici, r est un scalaire strictement positif, appelé *facteur de pénalisation*, et $p : \mathbb{E} \to \mathbb{R}$ est une fonction, dénommée *fonction pénalisante*. La locution *fonction de pénalisation* sera réservée à la fonction que l'on minimise dans le problème de pénalisation, qui est Θ_r dans (P_r). Le but de cette fonction pénalisante est de pénaliser la violation des contraintes (on parle alors de *pénalisation extérieure*, section 12.2) ou l'abord de la frontière de l'ensemble admissible (on parle dans ce cas de *pénalisation intérieure*, section 12.3). Parfois, au lieu de pénaliser le critère f, on pénalise le lagrangien du problème (c'est le cas de l'approche du lagrangien augmenté, section 12.4) ; cette technique a des avantages, mais aussi des inconvénients. Numériquement, l'intérêt de (P_r) est de pouvoir être résolu par une méthode d'optimisation sans contrainte (lorsque $X_s = \mathbb{E}$) ou avec contraintes simples ; celles définissant X_s.

La transformation du problème avec contraintes (P_X) en problème(s) (P_r) sans contrainte ou avec contraintes simples soulève deux questions : Est-ce possible ? Quel en est le prix ? La première question renvoie à celle de savoir si en résolvant (P_r) on résout (P_X) et, de manière plus précise, à celle de la détermination du lien entre les ensembles de solutions de (P_X) et (P_r) et du lien entre les valeurs optimales. La seconde question concerne l'efficacité numérique d'une telle transformation. La

réponse à ces deux questions va dépendre du choix de la fonction pénalisante p et du facteur de pénalisation r.

Par exemple, on pourrait choisir la fonction pénalisante p égale à la fonction indicatrice de X_r, $p = \mathcal{I}_{X_r}$, c'est-à-dire

$$p(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \in X_r \\ +\infty & \text{si } x \notin X_r. \end{cases}$$

Il est clair que dans ce cas, les problèmes (P_X) et (P_r) sont identiques : ils ont les mêmes ensembles de solutions et la même valeur optimale. Cette fonction pénalisante est parfois utilisée dans la théorie, car elle permet de traiter en même temps les problèmes avec ou sans contrainte (voir chapitre 13). Ce choix de p n'est cependant pas très utile numériquement car les méthodes classiques d'optimisation ne peuvent pas être utilisées sur des fonctions qui prennent la valeur $+\infty$ dans des régions visitées par les itérés (dans quelle direction se déplacer pour faire décroître Θ_r si l'itéré courant n'est pas dans X_r ?). Nous allons donc, dans ce chapitre, introduire diverses fonctions pénalisantes p, autres que l'indicatrice de X_r, et en étudier les propriétés théoriques et algorithmiques.

La première question posée ci-dessus conduit à la notion de pénalisation exacte, à laquelle on fera souvent allusion dans ce chapitre.

Définition 12.1 (pénalisation exacte) On dit qu'une fonction de pénalisation Θ_r associée au problème (P_X) est *exacte* si toute « solution » de (P_X) est « solution » de (P_r) ; on dit qu'elle est *inexacte* dans le cas contraire, c'est-à-dire qu'il y a des « solutions » de (P_X) qui ne sont pas « solution » de (P_r). □

Dans cette définition, le terme « solution » est pris dans un sens ambigu et il faudra chaque fois préciser si l'on veut parler de point stationnaire, de minimum local ou de minimum global.

La structure du problème (P_r), dont le critère est la somme pondérée de deux fonctions, permet d'énoncer d'emblée une propriété très générale sur le comportement de chaque terme *en un minimum global* $\bar{x}_r$ de (P_r), lorsque le facteur de pénalisation r varie. Intuitivement, si r augmente, on attache moins d'importance à f et plus d'importance à p, si bien qu'il semble normal que $f(\bar{x}_r)$ croisse et que $p(\bar{x}_r)$ décroisse. La proposition suivante énonce cela de façon rigoureuse. Le résultat est très général puisqu'il ne requiert aucune hypothèse sur l'ensemble X_s, ni a fortiori d'hypothèse de convexité ou de différentiabilité ; seule la structure du critère Θ_r intervient.

Proposition 12.2 (monotonie en pénalisation) *Soient X_s un ensemble non vide, f et $p : X_s \to \mathbb{R}$ deux fonctions, $r \in \mathbb{R}$ et $\Theta_r := f + r\,p$. Si $r_1 < r_2$ sont deux réels et si $\bar{x}_{r_i} \in \arg\min\{\Theta_{r_i}(x) : x \in X_s\}$ $(i = 1, 2)$, alors*

1) $p(\bar{x}_{r_1}) \geqslant p(\bar{x}_{r_2})$,
2) $f(\bar{x}_{r_1}) \leqslant f(\bar{x}_{r_2})$ *si* $r_1 \geqslant 0$,
3) $\Theta_{r_1}(\bar{x}_{r_1}) \leqslant \Theta_{r_2}(\bar{x}_{r_2})$ *si* $p(\bar{x}_{r_2}) \geqslant 0$.

Démonstration. 1) En exprimant que $\bar{x}_{r_i}$ minimise Θ_{r_i} sur X_s, on obtient :

$$\begin{aligned} f(\bar{x}_{r_1}) + r_1 p(\bar{x}_{r_1}) &\leqslant f(\bar{x}_{r_2}) + r_1 p(\bar{x}_{r_2}) \\ f(\bar{x}_{r_2}) + r_2 p(\bar{x}_{r_2}) &\leqslant f(\bar{x}_{r_1}) + r_2 p(\bar{x}_{r_1}). \end{aligned}$$

En sommant, on trouve $(r_2 - r_1)p(\bar{x}_{r_2}) \leqslant (r_2 - r_1)p(\bar{x}_{r_1})$. Alors $r_2 > r_1$ implique alors que $p(\bar{x}_{r_2}) \leqslant p(\bar{x}_{r_1})$.

2) En tenant compte du point 1 et du fait que $r_1 \geqslant 0$, la première inégalité exposée ci-dessus permet d'écrire

$$f(\bar{x}_{r_1}) + r_1 p(\bar{x}_{r_1}) \leqslant f(\bar{x}_{r_2}) + r_1 p(\bar{x}_{r_1}),$$

si bien que $f(\bar{x}_{r_1}) \leqslant f(\bar{x}_{r_2})$.

3) On a $\Theta_{r_1}(\bar{x}_{r_1}) \leqslant \Theta_{r_1}(\bar{x}_{r_2})$ par l'optimalité de $\bar{x}_{r_1}$; puis $\Theta_{r_1}(\bar{x}_{r_2}) \leqslant \Theta_{r_2}(\bar{x}_{r_2})$ par la positivité de $p(\bar{x}_{r_2})$. □

Le même raisonnement montre que l'on a une croissance ou décroissance *stricte* des suites si $\bar{x}_r$ est l'*unique* minimum de (P_r) et si $\bar{x}_r$ change avec r.

Un second résultat général, ne dépendant principalement que de la structure de Θ_r, concerne les points d'adhérence des minimiseurs $\bar{x}_r$ des fonctions de pénalisation Θ_r lorsque $r \downarrow 0$. Dans ce cas, la fonction pénalisante p agit de moins en moins et il est naturel de se demander si les minimiseurs $\bar{x}_r$ de Θ_r ne convergeraient pas vers un minimiseur de f sur X_s, donc sans tenir compte de la contrainte d'appartenance à X_r, à savoir un élément de $S := \arg\min\{f(x) : x \in X_s\}$. La proposition suivante donne des conditions pour qu'il en soit ainsi. Puisque'il est question de convergence des $\bar{x}_r$, on a besoin cette fois d'une topologie sur $\mathbb{E}$.

Proposition 12.3 (point d'adhérence lorsque $r \downarrow 0$) *Soit $\mathbb{E}$ un espace topologique. Supposons que X_s soit fermé dans $\mathbb{E}$, que f et $p : X_s \to \mathbb{R}$ soient s.c.i., que $S := \arg\min\{f(x) : x \in X_s\}$ soit non vide et que, pour une suite de $r \downarrow 0$, (P_r) ait au moins une solution, notée $\bar{x}_r$. Alors tout point d'adhérence de $\{\bar{x}_r\}_{r\downarrow 0}$ est solution de*

$$\inf_{x \in S} p(x).$$

Démonstration. Soient $\hat{x} \in S \neq \varnothing$ et $\bar{x}$ un point d'adhérence de $\{\bar{x}_r\}_{r\downarrow 0}$ (pour une sous-suite de $r \downarrow 0$). Il suffit de montrer que $\bar{x} \in S$ et que $p(\bar{x}) \leqslant p(\hat{x})$.

[*Montrons que $\bar{x} \in S$*] Pour cela, on observe que $\bar{x} \in X_s$, parce que X_s est fermé, que $\bar{x}_r \in X_s$ et que $\bar{x}_r \to \bar{x}$. Il reste à montrer que, pour un point $x \in X_s$ arbitraire, on a $f(\bar{x}) \leqslant f(x)$. L'optimalité de $\bar{x}_r$ permet d'écrire

$$\forall\, x \in X_s : \quad f(\bar{x}_r) + r p(\bar{x}_r) \leqslant f(x) + r p(x). \tag{12.2}$$

On passe à la limite inférieure lorsque $r \downarrow 0$ dans cette inégalité :

$$\begin{aligned} f(\bar{x}) &\leqslant \liminf_{r\downarrow 0} f(\bar{x}_r) && [f \text{ est s.c.i. et } \bar{x}_r \to \bar{x}] \\ &\leqslant \liminf_{r\downarrow 0} f(\bar{x}_r) + \liminf_{r\downarrow 0} rp(\bar{x}_r) && [(\text{A.11}),\ p \text{ est s.c.i. et } p(\bar{x}) \in \mathbb{R}] \\ &\leqslant \liminf_{r\downarrow 0} \big(f(\bar{x}_r) + rp(\bar{x}_r)\big) && [(\text{A.2a})] \\ &\leqslant \liminf_{r\downarrow 0} \big(f(x) + rp(x)\big) && [(12.2)] \\ &= f(x). \end{aligned}$$

[*Montrons que* $p(\bar{x}) \leqslant p(\hat{x})$] Observons d'abord que $f(\bar{x}_r) \in \mathbb{R}$ (car f est à valeurs réelles sur X_s et $\bar{x} \in S \subseteq X_s$). Ensuite, comme $\hat{x} \in S$, on a $f(\hat{x}) \leqslant f(\bar{x}_r)$, si bien que (12.2) en $x = \hat{x} \in X_s$, $f(\bar{x}_r) \in \mathbb{R}$ et $r > 0$ conduisent à

$$p(\bar{x}_r) \leqslant p(\hat{x}).$$

En prenant la limite inférieure lorsque $r \downarrow 0$, on trouve que $p(\bar{x}) \leqslant p(\hat{x})$. □

Nous serons souvent amenés à considérer le problème d'optimisation sous contraintes fonctionnelles suivant :

$$(P_{EI,X}) \quad \begin{cases} \min\ f(x) \\ c_i(x) = 0, & i \in E \\ c_i(x) \leqslant 0, & i \in I \\ x \in X_s, \end{cases} \tag{12.3}$$

où f et les c_i sont des fonctions définies sur un espace euclidien $\mathbb{E}$ (produit scalaire noté $\langle \cdot, \cdot \rangle$) à valeurs dans $\mathbb{R}$, (E, I) forme une partition de $[1\,{:}\,m]$ et X_s est un fermé de $\mathbb{E}$. Le nombre de contraintes d'égalité et d'inégalité se note m_E et m_I, et leur somme $m = m_E + m_I$. Le lagrangien de ce problème est l'application $\ell : \mathbb{E} \times \mathbb{R}^m \mapsto \mathbb{R}$ définie en $(x, \lambda) \in \mathbb{E} \times \mathbb{R}^m$ par

$$\ell(x, \lambda) := f(x) + \lambda^{\mathsf{T}} c(x).$$

Si $v \in \mathbb{R}^m$, on note $v^{\#} \in \mathbb{R}^m$ le vecteur défini par

$$(v^{\#})_i = \begin{cases} v_i & \text{si } i \in E \\ v_i^+ & \text{si } i \in I. \end{cases} \tag{12.4}$$

Les contraintes de (P_{EI,X_s}) s'écrivent alors simplement $c(x)^{\#} = 0$ (attention : l'application $x \mapsto c(x)^{\#}$ n'est pas différentiable en général ; on n'a donc fait que remplacer la difficulté liée à la présence de contraintes d'inégalité par une autre !). Nous renvoyons le lecteur à la section 4.4 pour d'autres notations.

12.2 Pénalisation extérieure

12.2.1 Définition et exemples

Commençons l'exposé par un exemple, qui résume assez bien le fonctionnement de la pénalisation extérieure.

Exemple 12.4 On considère le problème à une variable et une contrainte suivant

$$\begin{cases} \inf\ 1 - x - \frac{1}{3}x^3 \\ x \leqslant 0, \end{cases} \tag{12.5}$$

auquel on associe la fonction de pénalisation suivante

$$\Theta_r(x) = 1 - x - \frac{1}{3}x^3 + r(x^+)^2.$$

où $x^+ := \max(0, x)$. Cette pénalisation est dite *quadratique*, à cause de l'exposant 2 sur x^+ (section 12.2.4). L'effet de cette pénalisation peut s'observer à la figure 12.1, dont l'abscisse est $c(x) = x$. On voit que le terme $r(x^+)^2$ ne joue un rôle qu'à l'extérieur

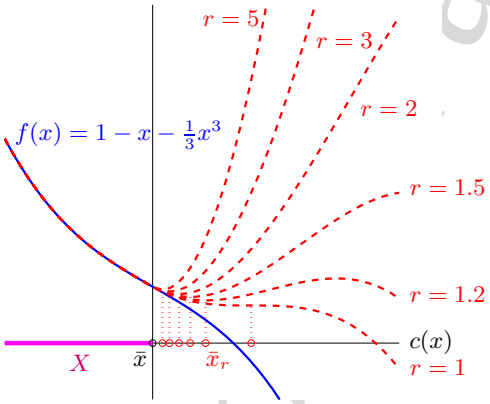


Fig. 12.1. Pénalisation quadratique du problème (12.5), avec $r = 1$, 1.2, 1.5, 2, 3 et 5.

de l'ensemble admissible $\mathbb{R}_-$. C'est la raison pour laquelle on qualifie cette pénalisation d'*extérieure*. D'autre part, on observe que le minimiseur *local* de Θ_r (il n'existe ici que si $r > 1$) est extérieur à l'ensemble admissible. Plus r est grand, plus le minimiseur se rapproche de la solution du problème, qui est ici $\bar{x} = 0$, et la suite de ces minimiseurs converge vers cette solution lorsque r tend vers l'infini. Cependant, plus r est grand, plus le minimum local est accentué (la dérivée seconde de Θ_r si elle existait serait élevée), ce qui pourra être une source de difficultés numériques. □

Dans la section 12.2.2, nous montrerons de manière rigoureuse que ce que nous venons d'observer sur cet exemple simple se produit pour une grande classe de fonctions de pénalisation. Cet exemple est en effet représentatif d'une technique de pénalisation appelée *pénalisation extérieure*, que l'on peut formaliser. Dans celle-ci, la fonction de pénalisation est de la forme $\Theta_r = f + r\,p$, avec une fonction pénalisante p vérifiant les propriétés suivantes :

$$p \text{ est s.c.i. sur } \mathbb{E}, \tag{12.6a}$$

$$\forall x \in \mathbb{E} :\ p(x) \geqslant 0, \tag{12.6b}$$

$$p(x) = 0 \iff x \in X. \tag{12.6c}$$

Observons que ces conditions impliquent que X est un ensemble de sous-niveau de la fonciton s.c.i. p, si bien qu'il est nécessairement fermé. Le qualificatif « *extérieur* » vient de la propriété (12.6c), qui exprime que Θ_r ne modifie f qu'à l'extérieur de l'ensemble admissible.

Le tableau 12.1 donne des exemples de fonctions pénalisantes satisfaisant (12.6),

Contraintes définissant X	Fonction pénalisante	Nom de la pénalisation	Références
$c(x) = 0$	$p(x) = \|c(x)\|_2^2$	quadratique	[129, 130]
$c(x) \leqslant 0$	$p(x) = \|c(x)^+\|_2^2$	quadratique	[2]

Tableau 12.1. Exemples de pénalisation extérieure.

si l'on suppose que c a une propriété de continuité adéquate, conduisant à ce que l'on appelle la *pénalisation quadratique* (section 12.2.4). Pour $u \in \mathbb{R}^p$, on y a noté u^+ le vecteur de $\mathbb{R}^p$ dont la i-ième composante vaut $\max(u_i, 0)$. La norme ℓ_2 y est notée $\|\cdot\|_2$. Les fonctions pénalisantes p du tableau 12.1 font de $\Theta_r = f + r\,p$ une fonction de pénalisation inexacte, puisque l'on trouve pour toute solution $\bar{x}$ de (P_X) :

$$\nabla \Theta_r(\bar{x}) = \nabla f(\bar{x})$$

et que rien n'impose, dans les conditions d'optimalité, que ce vecteur soit nul. Donc $\bar{x}$ n'est généralement pas solution de (P_r).

12.2.2 Propriétés

Nous étudions dans cette section les propriétés asymptotiques des solutions (minima globaux) $\bar{x}_r$ de (P_r), lorsque r tend vers l'infini. La proposition 12.5 énonce des conditions pour que les points d'adhérence de $\{\bar{x}_r\}$ soient solutions du problème original (P_X). La proposition 12.6 montre que, si l'une des fonctions de pénalisation Θ_r est coercive, l'existence d'une suite bornée $\{\bar{x}_r\}$ de minimiseurs est assurée; comme cette suite a alors des points d'adhérence, le résultat de la proposition précédente 12.5 s'y applique.

Proposition 12.5 (optimalité asymptotique) *Soient X un fermé non vide, f une fonction semi-continue inférieurement et $p : \mathbb{E} \to \mathbb{R}$ une fonction vérifiant (12.6). Alors, tout point d'adhérence de la suite $\{\bar{x}_r\}_{r\uparrow\infty}$ est solution de (P_X).*

Démonstration. Soit $\bar{x}$ un point d'adhérence de $\{\bar{x}_r\}_{r\uparrow\infty}$ et $x_{r_i} \to \bar{x}$ pour une sous-suite de facteurs de pénalisation $\{r_i\}_{i\geqslant 0} \to \infty$. Observons que, pour i fixé,

$$\forall\, x \in X : \quad \Theta_{r_i}(\bar{x}_{r_i}) \leqslant \Theta_{r_i}(x) = f(x), \tag{12.7}$$

où la première inégalité provient de l'optimalité de $\bar{x}_{r_i}$ et la seconde de l'admissibilité de x et de (12.6c).

Montrons d'abord que $\bar{x} \in X$ ou encore, par (12.6c), que $p(\bar{x}) = 0$. Comme f est s.c.i., on peut trouver un indice i_0 tel que

$$\forall\, i \geqslant i_0 : \quad f(\bar{x}) - 1 \leqslant f(\bar{x}_{r_i}).$$

En ajoutant $r_i p(\bar{x}_{r_i})$ aux deux membres de cette inégalité et en utilisant (12.7), on obtient

$$\forall\, x \in X \text{ et } i \geqslant i_0 : \quad f(\bar{x}) + r_i p(\bar{x}_{r_i}) - 1 \leqslant \Theta_{r_i}(\bar{x}_{r_i}) \leqslant f(x).$$

Dès lors,

$$\forall\, x \in X \text{ et } i \geqslant i_0 : \quad p(x_{r_i}) \leqslant \frac{f(x) - f(\bar{x}) + 1}{r_i}.$$

En fixant $x \in X$ et en prenant la limite inférieure quand $i \to \infty$, on trouve par (12.6a) et (12.6b) que $0 \leqslant p(\bar{x}) \leqslant \liminf_{i\to\infty} p(x_{r_i}) \leqslant 0$. Donc $p(\bar{x}) = 0$.

Montrons maintenant l'optimalité de $\bar{x}$. En minorant $\Theta_{r_i}(\bar{x}_{r_i})$ par $f(\bar{x}_{r_i})$ dans (12.7), on obtient

$$\forall\, x \in X : \quad f(\bar{x}_{r_i}) \leqslant f(x).$$

Comme f est s.c.i., en prenant la limite inférieure, on a $f(\bar{x}) \leqslant \liminf f(x_{r_i}) \leqslant f(x)$. COmme x est arbitraire dans X et $\bar{x} \in X$, $\bar{x}$ minimise f sur X. □

La proposition suivante suppose la coercivité de Θ_{r_0} pour un certain $r_0 \geqslant 0$, ce qui permet d'assurer l'existence de minimiseurs globaux des Θ_k lorsque $r \geqslant r_0$, ainsi que

Proposition 12.6 (existence d'une suite de minimiseurs) *Soient X un fermé non vide, f une fonction semi-continue inférieurement et $p : \mathbb{E} \to \mathbb{R}$ une fonction vérifiant (12.6). Supposons aussi qu'il existe un $r_0 \geqslant 0$ tel que Θ_{r_0} soit coercive. Alors,*

1) *$\forall r \geqslant r_0$, (P_r) a au moins une solution, que l'on note $\bar{x}_r$,*
2) *la suite $\{\bar{x}_r\}_{r\uparrow\infty}$ est bornée,*
3) *tout point d'adhérence de la suite $\{\bar{x}_r\}_{r\uparrow\infty}$ est solution de (P_X).*

Démonstration. 1) On voit que, pour $r \geqslant r_0$, Θ_r est s.c.i. sur $\mathbb{E}$ (exercice A.3) et est coercive. Par conséquent, (P_r) a au moins une solution $\bar{x}_r$ (corollaire 1.4).

2) Pour $x \in X$ et $r \geqslant r_0$, on a

$$\Theta_{r_0}(\bar{x}_r) \leqslant \Theta_r(\bar{x}_r) \leqslant \Theta_r(x) = f(x). \tag{12.8}$$

La première inégalité vient du fait que $(r - r_0)p(\bar{x}_r) \geqslant 0$ et la seconde de l'optimalité de $\bar{x}_r$. En fixant x dans X, cela montre que $\{\Theta_{r_0}(\bar{x}_r)\}_{r\uparrow\infty}$ est bornée et par la coercivité de Θ_{r_0}, on en déduit que $\{\bar{x}_r\}_{r\uparrow\infty}$ est bornée.

3) C'est une conséquence de la proposition 12.5. □

Les résultats précédents ont une valeur indicative sur le comportement des minima *globaux* de Θ_r. Malheureusement, le même résultat ne tient plus pour les minima locaux. Par exemple, si

$$c(x) = 2x^3 - 3x^2 + 5 = (x+1)(2x^2 - 5x + 5), \tag{12.9}$$

le problème

$$\begin{cases} \inf\ 0 \\ c(x) = 0 \end{cases} \tag{12.10}$$

consiste à chercher l'unique racine réelle $\bar{x} = -1$ de c. Mais le problème pénalisé

$$\inf\ r|c(x)|^2$$

a un minimum local en $\bar{x}_r = 1$ quel que soit $r > 0$. On n'a donc pas la convergence de ces minima locaux vers $\bar{x} = -1$. La proposition 12.10 ci-dessous donne les propriétés des points d'adhérence de la suite des points stationnaires approchés de Θ_r lorsque $r \to +\infty$. Elle est donc complémentaire de la proposition précédente qui ne s'intéresse qu'aux minima globaux.

Une autre limitation du théorème est de supposer que Θ_{r_0} est bornée inférieurement sur $\mathbb{E}$. Si ce n'est pas le cas, il se peut que (P_X) ait une solution mais que (P_r) n'en ait pas. C'est le cas pour le problème suivant

$$\begin{cases} \inf\ x^3 \\ x \geqslant 0 \end{cases}$$

Alors $\Theta_r(x) = x^3 + r(x^-)^2$ n'est pas bornée inférieurement. Dans de pareils cas, on peut rajouter un terme de pénalisation plus fort à l'infini ou introduire des bornes sur les variables.

Remarque 12.7 Pour que la suite de minimiseurs $\{\bar{x}_r\}$ s'approche d'une solution de (P_X), il faut faire croître le facteur de pénalisation r (proposition 12.5). Dans ces conditions, la proposition 12.2 nous apprend que la suite $\{f(\bar{x}_r)\}$ croît. Si la croissance de cette suite est stricte, les points $\bar{x}_r$ ne peuvent être qu'extérieurs à X, sinon les points d'adhérence de $\{\bar{x}_r\}$ ne pourraient pas être solutions de (P_X). En effet, on aurait alors des points de X aussi proches que l'on veut d'une solution $\bar{x}$ en lesquels f prendrait une valeur strictement inférieure à $f(\bar{x})$, ce qui contredirait l'optimalité de $\bar{x}$.

Nous verrons à la remarque 12.11, une autre manière d'aboutir à la même conclusion, après avoir montré comment construire une suite convergeant vers un multiplicateur optimal. □

La propriété suivante montre que la pénalisation extérieure permet d'avoir une borne inférieure du coût optimal de (P_X). Ceci peut être utile pour certaines méthodes de résolution de problèmes d'optimisation avec variables entières, du type *branch-and-bound*. En première analyse, le résultat est un peu magique, car en minimisant la fonction Θ_r qui majore f, on obtient une valeur optimale plus petite que celle de f sur X. La magie s'estompe si l'on se rappelle que (i) la pénalisation n'opère qu'en dehors de l'ensemble admissible, là où le critère peut prendre des valeurs plus basses que $\mathrm{val}(P_X)$ et (ii) la valeur optimale de (P_r) est obtenue par minimisation sur l'espace $\mathbb{E}$ tout entier, alors que celle de (P_X) est le résultat d'une minimisation sur X seulement. La figure 12.1 illustre ces remarques.

Proposition 12.8 (minorant de la valeur optimale)
1) *Si* $p(\cdot) \geqslant 0$, *la suite* $\{\mathrm{val}(P_r)\}$ *croît avec* r.
2) *Si* $p(\cdot) \geqslant 0$ *et* $p(X) = \{0\}$, *la suite* $\{\mathrm{val}(P_r)\}$ *est majorée par* $\mathrm{val}(P)$.

Démonstration. 0) Comme au point 3 de la proposition 12.2 (mais ici, on ne suppose pas l'existence de minimiseurs des Θ_r), lorsque $r_1 < r_2$, on a pour tout $x \in \mathbb{E}$:

$$\mathrm{val}(P_{r_1}) \leqslant f(x) + r_1 p(x) \leqslant f(x) + r_2 p(x), \tag{12.11}$$

parce que $r_1 < r_2$ et $p(\cdot) \geqslant 0$.

1) En prenant l'infimum en $x \in \mathbb{E}$ à droite, on obtient $\mathrm{val}(P_{r_1}) \leqslant \mathrm{val}(P_{r_2})$, si bien que $\{\mathrm{val}(P_r)\}$ croît avec r.

2) Si à droite dans (12.11), on prend l'infimum en $x \in X$, on obtient $\mathrm{val}(P_{r_1}) \leqslant \mathrm{val}(P)$, parce que $p(X) = 0$. □

12.2.3 Schéma algorithmique

La proposition 12.5 conduit au schéma algorithmique suivant, qui approche des solutions de (P_X) par des solutions approchées (à ε près) des problèmes pénalisés (P_r), avec $\varepsilon \downarrow 0$ et $r \uparrow \infty$.

Algorithme 12.9 (pénalisation extérieure) Une itération passe de l'itéré courant $(x_k, \varepsilon_k, r_k) \in \mathbb{E} \times \mathbb{R}_{++} \times \mathbb{R}$ à l'itéré suivant $(x_{k+1}, \varepsilon_{k+1}, r_{k+1})$ par les étapes suivantes.

1. *Test d'arrêt.* Arrêt si x_k est satisfaisant.
2. *Nouveaux paramètres.* Choisir $\varepsilon_{k+1} < \varepsilon_k$ (plus de précision) et $r_{k+1} > r_k$ (plus de pénalisation).
3. *Nouvel itéré.* Trouver un minimiseur *approché* (à ε_{k+1} près) x_{k+1} de $\Theta_{r_{k+1}}$ en démarrant les itérations en x_k.

Le schéma algorithmique décrit ci-dessus est simple mais peu précis. Il pose quelques problèmes de mise en œuvre qui méritent d'être discutés.

1. Voici deux critères d'arrêt qui peuvent être utilisés au point 1.
   - Pour une fonction pénalisante p vérifiant $p(X) = \{0\}$, $\bar{x}$ est solution de (P_X), si $\bar{x}$ est admissible et minimise Θ_r. En effet, dans ce cas, en plus d'être admissible, $\bar{x}$ vérifie

$$\begin{array}{rcll} f(\bar{x}) & = & \Theta_r(\bar{x}) & [p(X) = \{0\}] \\ & \leqslant & \Theta_r(x), \quad \forall\, x \in \mathbb{E} & [\text{optimalité de } \bar{x}] \\ & = & f(x), \quad \forall\, x \in X & [p(X) = \{0\}], \end{array}$$

     si bien que $\bar{x}$ minimise f sur X. On peut donc considérer que si x_k minimise Θ_{r_k} avec suffisamment de précision (i.e., avec un $\varepsilon_k > 0$ suffisamment petit) et si x_k

est presque admissible (la vérification de cette propriété peut faire intervenir les fonctions décrivant X), alors x_k est satisfaisant.

- On peut aussi se contenter de l'optimalité au premier ordre, en ne vérifiant que la satisfaction approchée des conditions d'optimalité de KKT (4.32). Il faut alors disposer d'un multiplicateur optimal approché, ce qui est possible pour certaines fonctions pénalisantes (pour la pénalisation quadratique, voir la proposition 12.10).

2. Si l'on veut que les solutions approchées de (P_r) convergent vers une solution de (P_X), il faut nécessairement que $\varepsilon_k \downarrow 0$ et $r_k \uparrow \infty$ (proposition 12.10).
3. À l'étape 3, il n'est pas aisé de donner un critère d'arrêt pour la minimisation de $\Theta_{r_{k+1}}$ qui soit entièrement satisfaisant. Si l'on ne s'intéresse qu'aux points stationnaires, on pourra par exemple décider d'arrêter cette étape si

$$\|\nabla\Theta_{r_{k+1}}(x_{k+1})\| \leqslant \varepsilon_{k+1}.$$

   On aimerait en effet ne pas passer trop de temps dans la minimisation de Θ_r si son minimiseur est éloigné de la solution du problème original, parce que r n'est pas assez grand. Nous verrons que, dans l'approche par points intérieurs en optimisation linéaire (chapitre 16), cette question est traitée avec beaucoup plus de précision qu'ici.
4. La manière avec laquelle l'algorithme 12.9 procède, celle de minimiser (approximativement) une suite de fonctions de pénalisation avec des facteurs de pénalisation r croissants, a un aspect étrange. Pourquoi, en effet, ne pas prendre directement r très grand et ne minimiser qu'une seule fonction Θ_r ?

   Une première raison est que l'on ne sait pas ce qu'est une valeur de r très grande (cela dépend du problème traité), ce qui donne du sens à cette détermination progressive d'un bon facteur de pénalisation.

   Mais il y a une autre raison, plus importante que la première, qui provient du mauvais conditionnement du problème de minimisation de Θ_r pour de grandes valeurs de r (remarque 12.11.2) et des erreurs numériques. Ainsi, si l'on commence à minimiser Θ_r avec une grande valeur de r à partir d'un itéré initial arbitraire, il n'est numériquement pas possible de trouver son minimum, parce que les itérés générés vont surtout se concentrer sur la décroissance de la fonction pénalisante p en ne voyant plus f, dont la contribution à Θ_r est alors marginale. Pour remédier à cette situation, il faut suivre le *chemin des minimiseurs* $r \mapsto \bar{x}_r$ (le tracé progressif rouge à la figure 12.2). Les chances de trouver un point minimisant Θ_r seront d'autant plus grandes que l'itéré initial n'est pas trop éloigné du chemin des minimiseurs et que le minimiseur de Θ_r n'est pas trop éloigné de cet itéré initial. Ces conditions sont remplies dans l'algorithme 12.9 si $r_{k+1} > r_k$ n'est pas pris beaucoup plus grand que r_k, car on y suppose que l'itéré initial x_{r_k} de minimisation de $\Theta_{r_{k+1}}$ est proche de celui minimisant Θ_{r_k}, donc proche du chemin des minimiseurs. □

Les considérations précédentes montrent que l'algorithme 12.9 est conceptuellement simple mais coûteux (il demande beaucoup de temps de calcul), puisqu'il faut nécessairement résoudre une *suite* de problèmes d'optimisation *non linéaires*, avec l'intérêt de ne jamais devoir prendre en charge explicitement les contraitnes de (P_X).

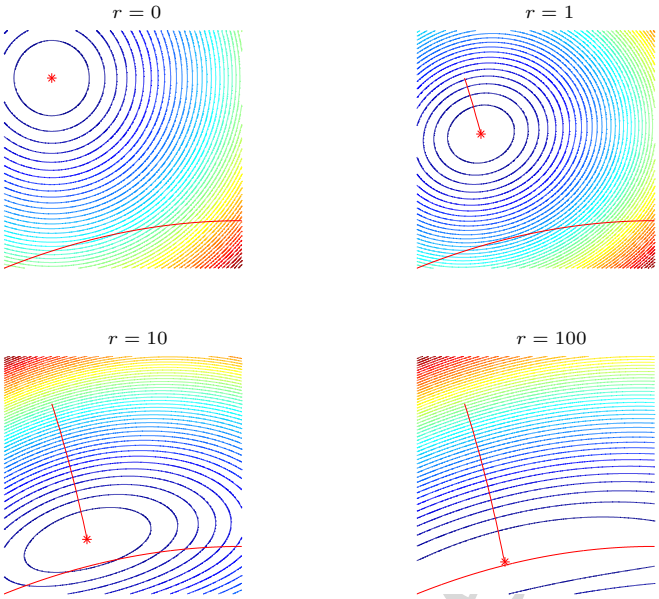


Fig. 12.2. Tracé progressif du *chemin des minimiseurs* dans la pénalisation quadratique du problème $\inf\{\|x - x_0\|_2^2 : c(x) = 0\}$, où $x_0 = (0.2, 0.8)$ et $c(x) = x_2 + 0.2(x_1 - 1)^2 - 0.2$. Celui-ci converge vers la solution du problème et l'on pourra trouver cette solution en suivant ce chemin. Les courbes de niveaux des fonctions de pénalisation, pour des facteurs de pénalisation r pris dans $\{0, 1, 10, 100\}$, montrent la détérioration du conditionnement avec l'augmentation de r (rapprochement progressif de celles-ci sur celles de $\|c(\cdot)\|_2$).

12.2.4 Pénalisation quadratique

On considère à présent le cas plus concret de la résolution numérique par pénalisation quadratique du problème (P_{EI}), un problème introduit à la section 4.4 et rappelé en (12.3). On parle de *pénalisation quadratique*, lorsque le problème pénalisé associée à (P_{EI}) est le suivant

$$\inf_{x \in \mathbb{E}} \left(\Theta_r(x) := f(x) + \frac{r}{2} \|c(x)^\#\|^2 \right), \tag{12.12}$$

où $v^\# \in \mathbb{R}^m$ est défini en (12.4). Lorsque c est continue, il s'agit d'une pénalisation extérieure, puisque la fonction pénalisante $x \mapsto p(x) := \frac{r}{2}\|c(x)^\#\|^2$ vérifie les conditions (12.6) ; dès lors les résultats obtenus à la section 12.2.2 s'appliquent. Lorsque f et c sont différentiable en $x \in \mathbb{E}$, on a

$$\nabla \Theta_r(x) = \nabla f(x) + \sum_{i \in E \cup I} r[c(x)]_i^\# \, \nabla c_i(x). \tag{12.13}$$

On trouvera à l'exercice 12.1 quelques informations supplémentaires sur cette fonction de pénalisation.

Bien qu'étant une méthode entièrement primale, le schéma algorithmique 12.9 utilisant la pénalisation quadratique permet d'obtenir une estimation des multiplicateurs optimaux associés aux contraintes d'égalité ou d'inégalité de (P_{EI}). Cette

estimation peut être précieuse, en particulier, pour estimer l'erreur commise sur les conditions d'optimalité du premier ordre (4.32) et ainsi mesurer la proximité d'un point stationnaire de (P_{EI}). C'est aussi un myen de montrer l'existence de multiplicateur optimaux.

Proposition 12.10 (approximation d'un multiplicateur optimal) *On suppose que les fonctions f et c définissant (P_{EI,X_s}) sont continûment différentiables et que pour une suite de $r \to \infty$, Θ_r a un point stationnaire approché $\bar{x}_r$, dans le sens où*

$$\|\nabla \Theta_r(\bar{x}_r)\| \leqslant \varepsilon_r,$$

avec $\varepsilon_r \to 0$ quand $r \to +\infty$. On suppose aussi que $\bar{x}_r \to \bar{x}$ lorsque $r \to +\infty$, que $\bar{x}$ est un point admissible de (P_{EI}) et que les conditions (QC-MF) ont lieu en $\bar{x}$, Alors

1) *$\{r\, c(\bar{x}_r)^{\#}\}_{r\to\infty}$ est bornée,*
2) *tout point d'adhérence $\bar{\lambda}$ de $\{r\, c(\bar{x}_r)^{\#}\}$ est tel que $(\bar{x}, \bar{\lambda})$ vérifie les conditions d'optimalité (4.32) de (P_{EI,X_s}).*

Démonstration. La différentiabilité supposée de f et c implique celle de Θ_r. Alors, en tenant compte de (12.13), on voit que l'optimalité approchée de $\bar{x}_r$ implique que

$$\nabla f(\bar{x}_r) + \sum_{i\in E\cup I} r[c(\bar{x}_r)]_i^{\#}\, \nabla c_i(\bar{x}_r) \to 0, \quad \text{lorsque } r \to \infty. \tag{12.14}$$

1) Notons $\lambda_r := r[c(\bar{x}_r)]^{\#}$ et montrons par l'absurde que la suite $\{\lambda_r\}_{r\to\infty}$ est bornée. S'il n'en était pas ainsi, on pourrait trouver une sous-suite de $r \to \infty$ telle que

$$\|\lambda_r\| \to \infty \qquad \text{et} \qquad \frac{\lambda_r}{\|\lambda_r\|} \to \mu \neq 0. \tag{12.15}$$

Après division par $\|\lambda_r\|$, la limite (12.14) donne

$$\sum_{i\in E\cup I} \mu_i\, \nabla c_i(\bar{x}) = 0. \tag{12.16}$$

Par la définition de λ_r, on voit que $\mu_I \geqslant 0$. Par ailleurs, la convergence de $\bar{x}_r \to \bar{x}$ et la définition de λ_r montrent que $\mu_{I\setminus I^0(\bar{x})} = 0$. Alors, l'identité (12.16) et (QC-MF) (définition 4.39) impliquent que $\mu = 0$, ce qui est en contradiction avec (12.15).

2) Soit $\bar{\lambda}$ un point d'adhérence de $\{\lambda_r\}$. En passant à la limite dans (12.14), on voit que le gradient du lagrangien s'annule :

$$\nabla f(\bar{x}) + \sum_{i\in E\cup I} \bar{\lambda}_i\, \nabla c_i(\bar{x}) = 0.$$

Par ailleurs, la définition de λ_r montre que $\bar{\lambda}_I \geqslant 0$ et que $\bar{\lambda}_{I\setminus I^0(\bar{x})} = 0$. Le couple $(\bar{x}, \bar{\lambda})$ vérifie donc les conditioins d'optimalité du premier ordre de (P_{EI}). □

Remarques 12.11 1. Accessoirement, la convergence d'une sous-suite convergente de $\{rc(\bar{x}_r)^\#\}$ vers un multiplicateur optimal $\bar{\lambda}$ montre que, pour les contraintes d'inégalité c_i associées à des multiplicateurs $\bar{\lambda}_i > 0$, on a $rc_i(\bar{x}_r) > 0$ pour r grand. Ceci veut dire que ces contraintes d'inégalité ne sont pas vérifiées pour r grand. Autrement dit, $\bar{x}_r$ converge vers $\bar{x}$ par l'*extérieur* de l'ensemble défini par ces contraintes.

2. La pénalisation quadratique permet de mettre en évidence l'influence du facteur de pénalisation r sur le *conditionnement du problème* (P_r). Nous entendons par là le conditionnement de la hessienne de Θ_r lorsque celle-ci existe. La formule (12.13) montre que la fonction de pénalisation quadratique Θ_r est différentiable, mais n'est pas nécessairement deux fois différentiable si $I \neq \varnothing$. Pour mettre en évidence par calcul la détérioration du conditionnement du problème (P_r) avec r, considérons alors le cas où il n'y a que des contratintes d'égalité ($I = \varnothing$ et on note $c_E = c$). Alors

$$\begin{aligned} \Theta_r(x) &= f(x) + \frac{r}{2}\|c(x)\|^2, \\ \nabla\Theta_r(x) &= \nabla f(x) + r\, c'(x)^\mathsf{T} c(x), \\ \nabla^2\Theta_r(x) &= \nabla^2 f(x) + \sum_{i=1}^{m} r\, c_i(x)\nabla^2 c_i(x) + r\, c'(x)^\mathsf{T} c'(x). \end{aligned}$$

Intéressons-nous à la hesienne $\nabla^2\Theta_r(\bar{x}_r)$ en un point stationnaire $\bar{x}_r$ de Θ_r. Sous les hypothèses de la proposition 12.10, les points d'ahérence des facteurs $r\, c_i(\bar{x}_r)$ de la hessienne $\nabla^2 c_i(\bar{x}_r)$ sont des multiplicateurs optimaux, si bien que les deux premiers termes $\nabla^2 f(\bar{x}_r) + \sum_{i=1}^m r\, c_i(\bar{x}_r)\nabla^2 c_i(\bar{x}_r)$ de la hessienne $\nabla^2\Theta_r(\bar{x}_r)$ ont comme point d'adhérence des hessiennes du lagrangien en une solution, si bien que ces termes n'induisent pas un conditionnement problématique. À l'inverse le dernier terme a en général un conditionnement qui explose avec r. En effet, la forme quadratique associée à $r\, c'(\bar{x}_r)^\mathsf{T} c'(\bar{x}_r)$, à savoir $v \mapsto r\|c'(\bar{x}_r)v\|^2$, est nulle dans le noyau de $c'(\bar{x}_r)$, alors que sa courbure explose dans l'espace orthogonal (si celui-ci n'est pas de dimension nulle). □

L'application de la pénalisation quadratique à l'optimisation quadratique est examinée à la section **??**.

12.3 Pénalisation intérieure ▲ ⊖

Dans certains problèmes, le fait que les itérés $\bar{x}_r$ générés par pénalisation extérieure ne soient pas admissibles peut être un inconvénient, par exemple, parce que f n'est pas définie à l'extérieur de X. On peut introduire des méthodes de pénalisation dans lesquelles les itérés $\bar{x}_r$ restent dans X. On parle alors de *pénalisation intérieure*. L'idée est d'utiliser un terme de pénalisation p qui tend vers l'infini lorsque x s'approche de la frontière ∂X de X.

Au problème simple (12.5), on pourra par exemple associé la fonction de pénalisation intérieure, dite logarithmique, suivante

$$\Theta_r(x) = 1 - x - \frac{1}{3}x^3 - r\log(-x).$$

L'effet de cette pénalisation peut s'observer à la figure 12.3.

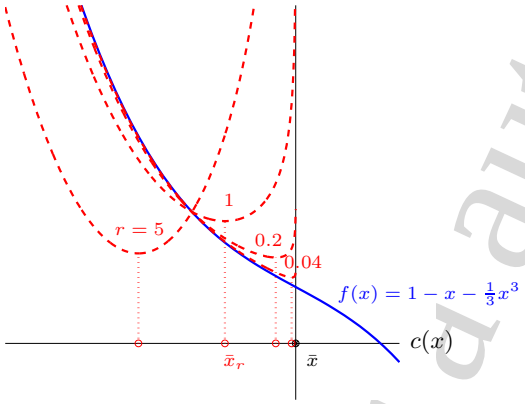


Fig. 12.3. Pénalisation logarithmique de l'exemple (12.5) pour $r = 5,\ 1,\ 0.25,\ 0.05$

On comprend que, dans cette section, il est nécessaire de supposer que l'intérieur X° de X est non vide :

$$X^\circ \neq \varnothing.$$

Cette hypothèse exclut d'emblée la possibilité de prendre en compte directement des contraintes d'égalité. Des artifices permettent toutefois de traiter de telles contraintes.

Les fonctions pénalisantes p considérées dans cette section satisfont les conditions suivantes :

$$p \text{ est continue sur } X^\circ \tag{12.17a}$$

$$p \geqslant 0, \text{ sur } X^\circ \tag{12.17b}$$

$$p(x) \to +\infty, \quad \text{quand } x \in X^\circ \text{ converge vers un point de } \partial X. \tag{12.17c}$$

On considère alors le problème de pénalisation

$$(P_r) \quad \inf_{x \in X^\circ} \Theta_r(x),$$

où $\Theta_r(x) = f(x) + r\,p(x)$. La condition (12.17c) crée une « barrière » au bord de l'ensemble admissible, si bien que Θ_r porte parfois le nom de *fonction barrière*.

Le tableau 12.2 donne deux exemples de fonctions p satisfaisant (12.17) lorsque l'ensemble admissible s'écrit $X = \{x \in \mathbb{E} : c(x) \leqslant 0\}$, avec $c : \mathbb{E} \to \mathbb{R}^m$. On suppose que $\{x \in \mathbb{E} : c(x) < 0\}$ n'est pas vide. La fonction de *pénalisation intérieure inverse* est due à Carroll [95 ; 1961]. La fonction de *pénalisation logarithmique* est due à l'économétricien norvégien R. Frisch [208 ; 1955]. Cette pénalisation a connu un renouveau avec les *algorithmes de points intérieurs*, que nous étudierons plus en détail au chapitre 16 dans le cadre de l'optimisation linéaire.

Le théorème suivant étudie la suite $\{\bar{x}_r\}$ des solutions des problèmes pénalisés. Contrairement à la pénalisation extérieure, il faut ici faire tendre r vers 0 (et non vers $+\infty$), ce qui a pour effet de diminuer l'influence de la fonction pénalisante, dont le

Contraintes définissant X	Fonction pénalisante	Nom de la pénalisation	Références
$c(x) \leqslant 0$	$p(x) = \sum_{i=1}^{m} \frac{1}{-c_i(x)}$	inverse	[95, 191]
$c(x) \leqslant 0$	$p(x) = -\sum_{i=1}^{m} \log(-c_i(x))$	logarithmique	[208]

Tableau 12.2. Exemples de pénalisation intérieure.

rôle est de repousser les points vers l'intérieur de X, et donc de permettre à $\bar{x}_r$ de se rapprocher de la frontière de l'ensemble admissible, si cela est nécessaire.

Théorème 12.12 (convergence de la pénalisation intérieure) *Supposons que f soit continue sur $\mathbb{E}$ et que l'ensemble admissible X, non vide, vérifie*

$$X = \overline{X^\circ}.$$

On suppose également que soit X est borné, soit $f(x) \to \infty$ quand $\|x\| \to \infty$. Alors, si la fonction pénalisante p vérifie (12.17), on a

1) *$\forall r > 0$, (P_r) a au moins une solution $\bar{x}_r$,*
2) *la suite $\{\bar{x}_r\}_{r\downarrow 0}$ est bornée,*
3) *tout point d'adhérence de $\{\bar{x}_r\}_{r\downarrow 0}$ est solution de (P_X).*

Algorithme 12.13 (pénalisation intérieure) Une itération passe de l'itéré courant $(x_k, \varepsilon_k, r_k) \in \mathbb{E}\times\mathbb{R}_{++}\times\mathbb{R}$ à l'itéré suivant $(x_{k+1}, \varepsilon_{k+1}, r_{k+1})$ par les étapes suivantes.

1. *Test d'arrêt.* Arrêt si x_k est satisfaisant.
2. *Nouveaux paramètres.* Choisir $\varepsilon_{k+1} < \varepsilon_k$ (plus de précision) et $r_{k+1} \in]0, r_k[$ (moins de pénalisation).
3. *Nouvel itéré.* Trouver un minimiseur *approché* (à ε_{k+1} près) x_{k+1} de $\Theta_{r_{k+1}}$ en démarrant les itérations en x_k.

12.4 Le lagrangien augmenté

Since you ask me to mention a gratifying paper, let me pick "A method for nonlinear constraints in minimization problems", because it is regarded as one of the sources of the "augmented Lagrangian method", which is now of fundamental importance in mathematical programming. I have been very fortunate to have played a part in discoveries of this kind.

M.J.D. Powell [447 ; 2003]

Le fait de devoir faire tendre r vers sa valeur limite ($+\infty$ ou 0 suivant le type de pénalisation, extérieure ou intérieure) dans les fonctions de pénalisation précédentes, pour retrouver la solution du problème original, induit, on l'a vu, un mauvais conditionnement des problèmes pénalisés. Il est raisonnable de penser que cet effet numériquement indésirable (si la pénalisation est utilisée comme outil théorique, on se fiche complètement de cette question) sera moins critique si l'on peut construire des fonctions de pénalisation qui, pour une valeur finie du paramètre de pénalisation, ont un minimum en la solution du problème original. C'est ce que l'on a appelé une pénalisation exacte.

Si une fonction de pénalisation Θ_r est exacte et différentiable en une solution $\bar{x}$, on doit avoir $\nabla\Theta_r(\bar{x}) = 0$. C'est bien ce qui manque aux fonctions de la table 12.1, puisqu'elles satisfont $\nabla\Theta_r(\bar{x}) = \nabla f(\bar{x})$, qui n'est pas nul en général. Cela se voit aussi à la figure 12.1 dans laquelle la pente $\Theta_r'(0) = f'(0)$ est non nulle et indépendante de r. Dès lors, avant d'ajouter un terme quadratique à f, il semble judicieux de lui ajouter un terme linéaire de telle sorte que la pénalisation agisse sur une fonction ayant une pente nulle en $\bar{x}$. C'est ce que suggère la figure 12.4, dans laquelle on a

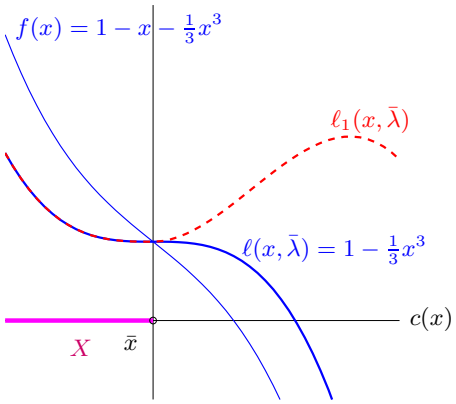


Fig. 12.4. Pénalisation quadratique du lagrangien du problème (12.5)

ajouté la fonction linéaire $x \to x$ au critère $x \mapsto 1 - x - \frac{1}{3}x^3$ de l'exemple 12.4. On voit que la pénalisation quadratique de la fonction résultante admet $\bar{x}$ comme minimiseur local, ici quel que soit le facteur de pénalisation $r > 0$; la fonction de pénalisation obtenue est donc exacte. Que prendre comme terme linéaire ? On peut raisonner de deux manières différentes, qui sont d'ailleurs reliées entre elles. Le plus simple est de dire que l'on connait une fonction dont la pente est nulle en la solution : c'est le lagrangien $\ell(\cdot, \bar{\lambda})$ avec multiplicateur optimal $\bar{\lambda}$, comme nous l'apprennent les conditions d'optimalité (4.32). C'est donc le terme $\bar{\lambda}^\mathsf{T} c(x)$ qu'il faut ajouter à $f(x)$ avant de faire agir la pénalisation. On remarquera que le terme est linéaire en $c(x)$, pas en x (c'est la même chose pour le problème 12.5). On peut aussi raisonner en utilisant l'analyse de sensibilité de la section 4.6.1. La fonction valeur v admet comme dérivée première (sous les hypothèses fortes de la proposition 4.49): $v'(0) = \bar{\lambda}$. Si l'on

veut modifier le problème pour que cette dérivée soit nulle, il faut ajouter $\bar{\lambda}^{\mathsf{T}} c(x)$ au critère, ce qui revient à faire la transformation $f(\cdot) \curvearrowright \ell(\cdot, \bar{\lambda})$ opérée ci-dessus.

12.4.1 Conditions d'exactitude du lagrangien

Le lagrangien du problème (P_{EI,X_s}) est une fonction de pénalisation exacte si les données du problème sont convexes et si le multiplicateur utilisé est optimal. C'est en substance ce qu'affirme le résultat suivant.

Proposition 12.14 (exactitude du lagrangien d'un problème convexe) *Supposons que f et les $\{c_i\}_{i\in I}$ soient convexes et que c_E soit affine. On suppose également que f et c sont différentiables en une solution $\bar{x}$ du problème et qu'il existe un multiplicateur $\bar{\lambda}$ tel que les conditions d'optimalité (KKT) aient lieu. Alors $x \mapsto \ell(x, \bar{\lambda})$ a un minimum en $\bar{x}$.*

Démonstration. Avec les hypothèses de convexité et la positivité de $\bar{\lambda}_I$, l'application $x \in \mathbb{E} \mapsto \ell(x, \bar{\lambda})$ est convexe. Selon les hypothèses, cette fonction est différentiable en $\bar{x}$ et, d'après les conditions d'optimalité (KKT), on a $\nabla_x \ell(\bar{x}, \bar{\lambda}) = 0$. On en déduit que $\ell(\cdot, \bar{\lambda})$ a un minimum (global) en $\bar{x}$. □

Si l'on connaissait un multiplicateur optimal $\bar{\lambda}$, $\ell(\cdot, \bar{\lambda})$ serait une fonction de pénalisation, n'ayant peut-être pas la forme de Θ_r dans (12.1), mais qui pourrait être minimisée pour trouver une solution de (P_{EI,X_s}). Mais $\bar{\lambda}$ est une solution duale, qui doit aussi être trouvée. On appelle *relaxation lagrangienne*, la technique qui recherche une solution de (P_{EI,X_s}) en minimisant $\ell(\cdot, \lambda)$ pour une suite de multiplicateurs λ que l'on fait converger vers un multiplicateur optimal. Il reste à préciser comment on met à jour les multiplicateurs et à étendre cette approche aux problèmes non convexes. C'est ce à quoi nous nous attacherons dans cette section 12.4.

12.4.2 Le lagrangien augmenté de (P_E)

Si le problème n'est pas convexe, le lagrangien n'est plus nécessairement une fonction de pénalisation exacte. Il peut aussi ne pas être borné inférieurement. C'est le cas dans l'exemple (12.5), pour lequel le multiplicateur optimal vaut $\bar{\lambda} = 1$ (d'après la proposition 4.49, c'est $f'(0)$) : $x \mapsto \ell(x, \bar{\lambda}) = 1 + \frac{1}{3}x^3$ n'est pas bornée inférieurement. On comprend qu'en l'absence de convexité, il n'y a plus de sens à minimiser le lagrangien pour obtenir une solution de (P_{EI,X_s}). Le lagrangien augmenté peut être vu comme un moyen de remédier à cet inconvénient.

Commençons par le cas où il n'y a que des contraintes d'égalité, en considérant le problème (P_E) de la page 489. Les conditions d'optimalité du premier et second ordre du théorème 4.17 et de la proposition **??** nous disent que, si l'on restreint h à être voisin de 0 et à appartenir à l'espace tangent aux contraintes en $\bar{x}$, l'application $h \mapsto \ell(\bar{x} + h, \bar{\lambda})$ est convexe et minimale en $h = 0$. Par contre, les conditions d'optimalité ne disent rien sur les valeurs prises par $\ell(\cdot, \bar{\lambda})$ dans l'espace complémentaire au plan tangent. Comme $\nabla_x \ell(\bar{x}, \bar{\lambda}) = 0$, on comprend que l'on pourra convexifier $\ell(\cdot, \bar{\lambda})$ *autour de* $\bar{x}$, et créer ainsi localement une cuvette minimisée en $\bar{x}$, en lui ajoutant un terme positif

qui croît transversalement à la contrainte, mais qui est sans effet longitudinalement. Un terme ayant cette propriété est $\|c(x)\|_2^2$. Il semble donc naturel de considérer la fonction

$$\boxed{\ell_r(x,\mu) = f(x) + \mu^\mathsf{T} c(x) + \frac{r}{2}\|c(x)\|_2^2.} \tag{12.18}$$

Cette fonction, définie pour $(x,\mu) \in \mathbb{E} \times \mathbb{R}^m$, est le *lagrangien augmenté* associé au problème (P_E)[1]. Le facteur de pénalisation $r > 0$ est un paramètre qu'il faudra ajuster, tout comme le multiplicateur μ qui devra tendre vers un multiplicateur optimal.

Examinons la structure du lagrangien augmenté. On vient de le construire comme un lagrangien que l'on a pénalisé par un terme semblable à ceux utilisés en pénalisation extérieure (voir le tableau 12.1). Contrairement aux fonctions de pénalisation de cette section, le lagrangien augmenté sera une fonction de pénalisation exacte lorsque $\mu = \bar{\lambda}$ et r est assez grand (mais fini !), mais cette propriété ne sera que locale (notion qui sera clarifiée ci-dessous). En ajoutant le terme $\bar{\lambda}^\mathsf{T} c(x)$ à la fonction de pénalisation inexacte $x \mapsto f(x) + \frac{r}{2}\|c(x)\|_2^2$, on a forcé son exactitude en corrigeant la pente de cette fonction en $\bar{x}$. En ajoutant le terme $\frac{r}{2}\|c(x)\|_2^2$ au lagrangien, on peut à présent traiter des problèmes non convexes.

L'étude de l'exactitude du lagrangien augmenté (12.18) passe par le lemme B.3 de Finsler. Celui-ci décrit en quelque sorte la version linéarisée (ou « quadratisée ») du mécanisme en jeu dans le lagrangien augmenté (et c'est comme cela que nous l'utiliserons) : M est définie positive dans le noyau de $A^\mathsf{T}A$, mais on n'a pas d'information sur M dans l'espace complémentaire $\mathcal{R}(A^\mathsf{T}A)$ (comparez avec ce que l'on sait sur le lagrangien dans le voisinage d'une solution). En ajoutant un multiple de $A^\mathsf{T}A$ à M, on peut rendre la matrice résultante définie positive. On observera que la matrice ajoutée $rA^\mathsf{T}A$ n'a pas d'effet dans $\mathcal{N}(A)$, puisque $u^\mathsf{T}A^\mathsf{T}Au = 0$ pour tout $u \in \mathcal{N}(A)$.

Théorème 12.15 (exactitude du lagrangien augmenté de (P_E)) *On suppose que f et c sont deux fois dérivables en un minimum local $\bar{x}$ de (P_E). On suppose également qu'il existe un multiplicateur $\bar{\lambda}$ tel que $\nabla_x \ell(\bar{x},\bar{\lambda}) = 0$ et tel que la condition suffisante d'optimalité du second ordre (4.27) ait lieu. Alors, il existe un réel $\bar{r}$ tel que pour tout $r \geqslant \bar{r}$, le lagrangien augmenté (12.18) a un minimum local strict en $\bar{x}$.*

Démonstration. On a $\nabla_x \ell_r(x,\bar{\lambda}) = \nabla_x \ell(x,\bar{\lambda}) + rA(x)^\mathsf{T} c(x)$, avec $A(x) := c'(x)$. Dès lors $\nabla_x \ell_r(\bar{x},\bar{\lambda}) = 0$. D'autre part, $\nabla^2_{xx}\ell_r(\bar{x},\bar{\lambda}) = \nabla^2_{xx}\ell(\bar{x},\bar{\lambda}) + rA(\bar{x})^\mathsf{T}A(\bar{x})$. D'après la condition du second ordre (4.27), $\nabla^2_{xx}\ell(\bar{x},\bar{\lambda})$ est définie positive dans le noyau de $A(\bar{x})$. Alors, le lemme B.3 de Finsler nous apprend que $\nabla^2_{xx}\ell_r(\bar{x},\bar{\lambda})$ est définie positive lorsque r est assez grand. On en déduit que, pour r assez grand, $\ell_r(\cdot,\bar{\lambda})$ a un minimum local strict en $\bar{x}$ (proposition 4.11). □

[1] Ce type de pénalisation porte le nom de lagrangien *modifié* dans la littérature russe.

12.4.3 Le lagrangien augmenté de (P_{EI})

Le lagrangien augmenté associé au problème (P_{EI,X_s}) s'introduit de manière naturelle en utilisant la dualité ; nous le ferons au chapitre 13. Nous allons l'introduire ici par une approche plus intuitive, qui s'appuie sur la formule (12.18) et qui apportera des informations qualitatives intéressantes.

Une idée pourrait être de suivre la structure de (12.18) en ajoutant au lagrangien le terme pénalisant les contraintes utilisé dans (12.12), ce qui donnerait la fonction

$$x \mapsto f(x) + \mu^{\mathsf{T}} c(x) + \frac{r}{2} \|c(x)^{\#}\|_2^2.$$

Celle-ci a l'inconvénient de ne pas toujours être deux fois différentiable en une solution (car $t \mapsto (t^+)^2$) ne l'est pas), quel que soit la régularité de f et c. On préfère donc adopter la démarche suivante, due à Rockafellar [465 ; 1973].

Dans un premier temps, on écrit (P_{EI,X_s}) sous une forme équivalente, en introduisant des *variables d'écart* $s \in \mathbb{R}^{m_I}$:

$$\begin{cases} \inf_{(x,s)} \ f(x) \\ c_E(x) = 0 \\ c_I(x) + s = 0 \\ s \geqslant 0. \end{cases}$$

Ensuite, ce problème est *approché* en utilisant le lagrangien augmenté associé à ses contraintes d'égalité (formule (12.18)) avec un facteur de pénalisation $r > 0$:

$$\inf_x \inf_{s \geqslant 0} \left(f(x) + \mu_E^{\mathsf{T}} c_E(x) + \frac{r}{2} \|c_E(x)\|_2^2 + \mu_I^{\mathsf{T}} (c_I(x)+s) + \frac{r}{2} \|c_I(x)+s\|_2^2 \right).$$

Le lagrangien augmenté du problème (P_{EI,X_s}) est la fonction de (x, μ) définie comme la valeur minimale du problème d'optimisation en $s \geqslant 0$ ci-dessus :

$$\begin{aligned} \ell_r(x,\mu) := \inf_{s \geqslant 0} \Big(& f(x) + \mu_E^{\mathsf{T}} c_E(x) + \frac{r}{2} \|c_E(x)\|_2^2 \\ & + \mu_I^{\mathsf{T}} (c_I(x)+s) + \frac{r}{2} \|c_I(x)+s\|_2^2 \Big). \end{aligned} \tag{12.19}$$

La minimisation en s peut être menée explicitement puisque le problème est quadratique en s avec une hessiene diagonale et que l'on n'a que des contraintes de borne sur s. Plus précisément, comme le critère du problème ci-dessus s'écrit

$$\frac{r}{2} \left\| s + c_I(x) + \frac{\mu_I}{r} \right\|_2^2 + \text{« des termes indépendants de } s \text{ »},$$

il s'agit de projeter $-c_I(x) - \mu_I/r$ sur l'orthant positif. On trouve donc

$$s = \max\left(-c_I(x) - \frac{\mu_I}{r}, 0 \right),$$

si bien que

$$c_I(x) + s = \max\left(-\frac{\mu_I}{r}, c_I(x) \right). \tag{12.20}$$

En remplaçant $c_I(x) + s$ par cette valeur dans le critère du problème d'optimisation ci-dessus on obtient le *lagrangien augmenté* associé aux contraintes $c_E(x) = 0$ et

$c_I(x) \leqslant 0$ du problème (P_{EI,X_s}). C'est la fonction $\ell_r : \mathbb{E} \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$, définie pour $(x, \mu) \in \mathbb{E} \times \mathbb{R}^m$ et $r > 0$ par

$$\boxed{\ell_r(x, \mu) = f(x) + \mu^{\mathsf{T}} \tilde{c}_{\mu,r}(x) + \frac{r}{2} \|\tilde{c}_{\mu,r}(x)\|_2^2,} \tag{12.21}$$

où, pour $\lambda \in \mathbb{R}^{m_I}$ et $r > 0$, $\tilde{c}_{\mu,r} : \mathbb{E} \to \mathbb{R}^m$ est définie par

$$(\tilde{c}_{\mu,r}(x))_i = \begin{cases} c_i(x) & \text{si } i \in E \\ \max\left(\frac{-\mu_i}{r}, c_i(x)\right) & \text{si } i \in I. \end{cases} \tag{12.22}$$

Ce lagrangien augmenté a donc une structure tout à fait semblable au lagrangien augmenté associé au problème avec contraintes d'égalité (P_E), pourvu que l'on fasse intervenir la modification non différentiable de c définie par $\tilde{c}_{\mu,r}$ ci-dessus. On notera d'ailleurs que

$$\tilde{c}_{\mu,r}(x) = 0 \qquad \Longleftrightarrow \qquad \begin{cases} c_E(x) = 0 \\ 0 \leqslant \mu_I \perp c_I(x) \leqslant 0, \end{cases}$$

où la notation $0 \leqslant u \perp v \leqslant 0$ signifie $u \geqslant 0$, $v \leqslant 0$ et $u^{\mathsf{T}} v = 0$. La nullité des composantes I de $\tilde{c}_{\mu,r}(x)$ exprime donc à la fois les conditions de signes sur la contrainte et son multiplicateur, ainsi que la complémentarité.

Les deux relations de monotonie du lemme ci-dessous nous seront utiles. La seconde provient de l'expression suivante des termes associés aux contraintes d'inégalité dans la lagrangien augmenté :

$$\mu_I^{\mathsf{T}}(\tilde{c}_{\mu,r}(x))_I + \frac{r}{2}\|(\tilde{c}_{\mu,r}(x))_I\|_2^2 = \frac{1}{2r} \sum_{i \in I} \left[\max(0, \mu_i + r c_i(x))^2 - \mu_i^2\right]. \tag{12.23}$$

Lemme 12.16 1) $\forall\, (x, \mu) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m,\ \ r \in \mathbb{R}_{++} \to \ell_r(x, \mu)$ *est croissante.*
2) $\forall\, r > 0,\ \ \forall\, \mu_I \in \mathbb{R}^{m_I},\ \ v_I \in \mathbb{R}^{m_I} \to \mu_I^{\mathsf{T}} \max\left(\frac{-\mu_I}{r}, v_I\right) + \frac{r}{2} \left\|\max\left(\frac{-\mu_I}{r}, v_I\right)\right\|^2$ *est croissante (pour l'ordre* $v_I \leqslant v_I' \Leftrightarrow v_i \leqslant v_i'$ *pour tout* $i \in I$*).*

Démonstration. 1) C'est une conséquence de la technique utilisée ci-dessus pour construire le lagrangien augmenté (12.21) : l'argument de l'infimum dans (12.19) croît lorsque r augmente.

2) On utilise l'expression de droite dans (12.23), dont la croissance en $c_I(x)$ est claire, quel que soit le signe de μ_I. □

Malgré l'opérateur max dans (12.22), le lagrangien augmenté est différentiable en (x, λ). Pour le voir, le plus simple est d'utiliser l'expression à droite dans (12.23) pour les termes associés aux contraintes d'inégalité. Comme la dérivée de $(t^+)^2$ est $2t^+$ et que $(a + b)^+ - a = \max(-a, b)$, on obtient

$$\nabla_x \ell_r(x, \mu) = \nabla f(x) + c'(x)^{\mathsf{T}}(\mu + r\tilde{c}_{\mu,r}(x)) \tag{12.24}$$

$$\nabla_\mu \ell_r(x, \mu) = \tilde{c}_{\mu,r}(x). \tag{12.25}$$

L'opérateur max dans (12.22) ne permet pas, en général, d'avoir la différentiabilité seconde de $\ell_r(\cdot, \mu)$: c'est le talon d'Achille de ce lagrangien augmenté. Il a été à la

source de nombreux développements. En fait, pour x proche d'une solution $\bar{x}$ de (P_{EI,X_s}) et $\mu = \bar{\lambda}$ (un multiplicateur optimal), on a en utilisant la complémentarité $\bar{\lambda}_I^T c_I(\bar{x}) = 0$ et la positivité de $\bar{\lambda}_I$:

$$\ell_r(x,\bar{\lambda}) = \ell(x,\bar{\lambda}) + \frac{r}{2}\sum_{i\in E\cup I^{0+}(\bar{x})} c_i(x)^2 + \frac{r}{2}\sum_{i\in I^{00}(\bar{x})} (c_i(x)^+)^2. \tag{12.26}$$

La présence de l'opérateur $(\cdot)^+$ dans (12.26) montre que $\ell_r(\cdot,\bar{\lambda})$ peut ne pas être plus d'une fois différentiable en $\bar{x}$. En cas de complémentarité stricte, $I^{00}(\bar{x}) = \varnothing$ et la dernière somme disparaît, si bien que le lagrangien augmenté peut s'écrire (toujours pour x proche de $\bar{x}$):

$$\ell_r(x,\bar{\lambda}) = \ell(x,\bar{\lambda}) + \frac{r}{2}\sum_{i\in E\cup I^{0}(\bar{x})} c_i(x)^2.$$

Localement, les contraintes d'égalité et les contraintes d'inégalité actives sont alors traitées de la même manière et $\ell_r(\cdot,\bar{\lambda})$ est régulière en $\bar{x}$ (pourvu que f et c le soient). Nous résumons ces propriétés de différentiabilité dans la proposition suivante.

Proposition 12.17 (différentiabilité du lagrangien augmenté)
1) *Le lagrangien augmenté ℓ_r, défini en (12.21), est différentiable en μ et son gradient est donné par (12.25).*
2) *Si f et c sont différentiables en x, alors ℓ_r est différentiable en x et son gradient est donné par (12.24).*
3) *Si $(\bar{x},\bar{\lambda})$ est un point stationnaire de (P_{EI,X_s}) vérifiant la complémentarité stricte et si $(f, c_{E\cup I^0(\bar{x})})$ est p fois dérivable ($p \in \mathbb{N}$) dans un voisinage de $\bar{x}$, alors le lagrangien augmenté est p fois dérivable dans un voisinage (éventuellement plus petit) de $\bar{x}$.*

Le résultat suivant est l'analogue du théorème 12.15 pour le lagrangien augmenté (12.21). Il donne des conditions pour que ce lagrangien augmenté soit exact en $\bar{x}$. La condition suffisante d'optimalité semi-forte (4.61) qui y est utilisée est plus forte que la condition faible (4.58), mais plus faible que la condition forte (4.62). Le résultat n'a pas lieu si on ne suppose que la condition faible (4.58).

On a vu au théorème 12.15 que l'exactitude du lagrangien augmenté de (P_E) était fondée sur le lemme de Finsler. Le lecteur perspicace remarquera que la technique utilisée dans la démonstration du théorème ci-dessous est calquée sur celle mise en œuvre en annexe pour démontrer le lemme B.3 de Finsler.

Théorème 12.18 (exactitude du lagrangien augmenté de (P_{EI,X_s})) *On suppose que f et $c_{E\cup I^0(\bar{x})}$ sont deux fois dérivables en un minimum local $\bar{x}$ de (P_{EI,X_s}). On suppose également que les conditions de (KKT) ont lieu et que la condition suffisante d'optimalité du second ordre semi-forte (4.61) a lieu pour un certain multiplicateur optimal $\bar{\lambda}$. Alors, il existe un réel $\bar{r} > 0$ et un voisinage V*

de $\bar{x}$ tels que pour tout $r \geqslant \bar{r}$, le lagrangien augmenté (12.21), avec $\mu = \bar{\lambda}$, a un minimum strict en $\bar{x}$ sur V.

DÉMONSTRATION. Il suffit de montrer qu'il existe un $\bar{r} > 0$ et un voisinage V de $\bar{x}$ dans $\mathbb{E}$ tel que

$$\ell_{\bar{r}}(\bar{x}, \bar{\lambda}) < \ell_{\bar{r}}(x, \bar{\lambda}), \quad \text{pour tout } x \in V \setminus \{\bar{x}\}.$$

En effet, si cette affirmation est vraie pour $\bar{r}$, elle le sera pour tout $r \geqslant \bar{r}$, avec le même voisinage V. Ceci est dû au fait que $\ell_r(\bar{x}, \bar{\lambda}) = f(\bar{x})$ est indépendant de r et que, d'après le point (i) du lemme 12.16, $r \mapsto \ell_r(x, \bar{\lambda})$ croît avec r.

On démontre cette affirmation par l'absurde en supposant qu'il existe une suite de réels $r_k \to \infty$ et une suite de points $x_k \to \bar{x}$, tels que pour $k \geqslant 1$: $x_k \neq \bar{x}$ et

$$\ell_{r_k}(x_k, \bar{\lambda}) \leqslant \ell_{r_k}(\bar{x}, \bar{\lambda}). \tag{12.27}$$

En extrayant une sous-suite au besoin, on peut supposer que pour $k \to \infty$:

$$\frac{x_k - \bar{x}}{\|x_k - \bar{x}\|} \to d, \quad \text{avec } \|d\| = 1.$$

En posant $t_k := \|x_k - \bar{x}\|$, on obtient alors

$$x_k = \bar{x} + t_k d + o(t_k).$$

Notre but à présent est de montrer que d est une direction critique. Ceci s'obtient en faisant un développement limité des fonctions intervenant dans le membre de gauche de (12.27), exprimé par la formule (12.26) : développement au deuxième ordre du lagrangien et au premier ordre des contraintes dans les deux sommes de (12.26). Pour simplifier les notations, on introduit $\bar{L} := \nabla^2_{xx}\ell(\bar{x}, \bar{\lambda})$. De la régularité de f et c et de l'optimalité de $(\bar{x}, \bar{\lambda})$, on déduit

$$\begin{aligned} \ell(x_k, \bar{\lambda}) &= \ell(\bar{x}, \bar{\lambda}) + \frac{t_k^2}{2} d^{\mathsf{T}} \bar{L} d + o(t_k^2), \\ c_i(x_k) &= t_k\, c_i'(\bar{x}) \cdot d + o(t_k), \quad \text{pour } i \in E \cup I^0(\bar{x}). \end{aligned}$$

On injecte ces estimations dans (12.27), en utilisant (12.26) et $\ell_{r_k}(\bar{x}, \bar{\lambda}) = \ell(\bar{x}, \bar{\lambda})$:

$$\begin{aligned} \frac{t_k^2}{2} d^{\mathsf{T}} \bar{L} d + o(t_k^2) + \frac{r_k}{2} \sum_{i \in E \cup I^{0+}(\bar{x})} \left(t_k c_i'(\bar{x}) \cdot d + o(t_k)\right)^2 \\ + \frac{r_k}{2} \sum_{i \in I^{00}(\bar{x})} \left([t_k c_i'(\bar{x}) \cdot d + o(t_k)]^+ \right)^2 \leqslant 0. \end{aligned} \tag{12.28}$$

La limite dans (12.28) quand $k \to \infty$, après avoir divisé par $t_k^2 r_k$, conduit à

$$\begin{aligned} c_i'(\bar{x}) \cdot d &= 0, \quad \text{si } i \in E \cup I^{0+}(\bar{x}) \\ c_i'(\bar{x}) \cdot d &\leqslant 0, \quad \text{si } i \in I^{00}(\bar{x}). \end{aligned}$$

Dès lors, d est une direction critique non nulle.

D'autre part, (12.28) implique également

$$\frac{t_k^2}{2}\, d^\mathsf{T} \bar{L} d + o(t_k^2) \leqslant 0.$$

En prenant la limite après avoir divisé par t_k^2, on obtient $d^\mathsf{T} \bar{L} d \leqslant 0$. Cette inégalité est en contradiction avec (4.61), puisque $d \in C(\bar{x}) \setminus \{0\}$. □

12.4.4 Méthode du lagrangien augmenté

Le concept de lagrangien augmenté a été introduit dans un but algorithmique. Il est toujours utilisé aujourd'hui pour résoudre de grands problèmes, surtout lorsque les techniques d'algèbre linéaire requises dans les algorithmes newtoniens comme la *programmation quadratique successive* (voir chapitre 14) ne peuvent pas être utilisées, du fait de la dimension des problèmes. On utilise aussi le lagrangien augmenté pour résoudre des problèmes structurés, comme ceux de l'optimisation quadratique convexe [146, 109 ; 2005-2016].

L'algorithme classique associé au lagrangien augmenté est connu sous le nom de *méthode des multiplicateurs*. Cette méthode s'apparente à la relaxation lagrangienne, dans le sens où l'on y minimise (avec plus ou moins de précision) le lagrangien augmenté pour une suite de multiplicateurs λ_k, que l'on cherche à faire converger vers un multiplicateur optimal, et de facteurs de pénalisation r_k que l'on adapte pour qu'ils soient « suffisamment grands ». L'algorithme est piloté par la recherche du multiplicateur optimal, d'où son nom.

D'un point de vue numérique, l'intérêt principal du lagrangien augmenté, par rapport aux méthodes de pénalisation extérieure et intérieure des sections 12.2 et 12.3, est de ne pas devoir faire tendre le facteur de pénalisation vers une limite qui rend la pénalisation indéfinie ($r \to +\infty$ en pénalisation extérieure) ou inopérante ($r \downarrow 0$ en pénalisation intérieure). Grâce à cette propriété, le lagrangien augmenté conserve un conditionnement raisonnable ; ses courbes de niveau ne s'allongent pas trop. Son inconvénient majeur est de devoir mettre à jour un multiplicateur, en plus du facteur de pénalisation. Heureusement, on dispose d'une formule de mise à jour naturelle, que nous introduirons ici comme une heuristique, mais à laquelle nous donnerons davantage de sens après que les notions de fonction duale et de méthode proximale auront été introduites (voir chapitre 13).

Le théorème 12.18 nous apprend que si l'on connaît un multiplicateur optimal $\bar{\lambda}$ et si l'on prend r assez grand, on a quelques chances de trouver une solution de (P_{EI,X_s}) en minimisant le lagrangien augmenté $\ell_r(.,\bar{\lambda})$. On ne connaît en général aucune de ces deux informations, si bien que c'est algorithmiquement qu'elles doivent être recherchées.

Supposons que l'on dispose au début de l'itération k, d'un facteur de pénalisation $r_k > 0$ et d'un multiplicateur approché $\lambda_k \in \mathbb{R}^m$. La mise à jour de se dernier se fera par une formule qui fait suite aux considérations suivantes (cette formule est vue ici comme une heuristique). Le théorème 12.18 suggère de minimiser $\ell_{r_k}(\cdot, \lambda_k)$. Supposons que ce problème ait une solution, que l'on note x_k. Par optimalité, $\nabla_x \ell_{r_k}(x_k, \lambda_k) = 0$, qui par (12.24) s'écrit

$$\nabla f(x_k) + \sum_{i \in E \cup I} \Big(\lambda_k + r_k \tilde{c}_{\lambda_k, r_k}(x_k)\Big)_i \nabla c_i(x_k) = 0,$$

où $\tilde{c}_{\lambda_k, r_k}$ est défini en (12.22). Comme, pour résoudre (P_{EI,X_s}), on cherche à annuler le gradient du lagrangien de ce problème, les facteurs de $\nabla c_i(x_k)$ ci-dessus semblent être de bons candidats pour être la nouvelle approximation du multiplicateur optimal. On prend donc

$$\lambda_{k+1} = \lambda_k + r_k \tilde{c}_{\lambda_k, r_k}(x_k).$$

Dans certains cas, comme dans le schéma algorithmique 12.19 ci-dessous, on remplace r_k par un « pas » $\alpha_k > 0$. Donnons une autre expression de $\lambda_k + \alpha_k \tilde{c}_{\lambda_k, \alpha_k}(x_k)$, qui nous informera sur le signe de ses composantes correspondant aux inégalités. Pour $i \in I$ et en laissant tomber l'indice d'itération k, on a $\lambda_i + \alpha \tilde{c}_{\lambda,\alpha}(x)_i = \lambda_i + \alpha \max(-\lambda_i/\alpha, c_i(x)) = \max(0, \lambda_i + \alpha c_i(x))$. On en déduit que

$$\lambda_k + \alpha_k \tilde{c}_{\lambda_k, \alpha_k}(x_k) = (\lambda_k + \alpha_k c(x_k))^{\#}.$$

Les composantes d'indice $i \in I$ de λ_{k+1} sont donc positives.

On manque d'arguments solides pour trouver une règle de mise à jour du facteur de pénalisation r_k qui soit entièrement satisfaisante (le cas des fonctions quadratiques convexes est une exception [146, 109 ; 2005-2016]). On se contente en général d'augmenter r_k si $\tilde{c}_{\lambda_k, r_k}$ ne décroît pas suffisamment vite vers zéro. Cela paraît raisonnable, étant donné que r_k apparaît en facteur de la norme des contraintes dans la lagrangien augmenté (sous la forme (12.19)) et que c'est effectivement son rôle lorsque λ_k reste constant (on est alors proche de la pénalisation extérieure). Mais il ne faut pas oublier que λ_k joue un rôle tout aussi important que r_k pour forcer l'admissibilité des itérés. D'ailleurs dès que r_k est supérieur à un certain seuil, le bon réglage de λ_k devrait suffire pour obtenir l'admissibilité.

Nous donnons ci-dessous un schéma algorithmique inspiré de celui utilisé dans LANCELOT, un code d'optimisation généraliste qui est fondé sur le lagrangien augmenté [123 ; 1992]. Fletcher [197 ; 1987, page 292] propose un algorithme semblable.

Algorithme 12.19 (méthode des multiplicateurs) Une itération passe de l'itéré courant $(\lambda_k, r_k) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}_{++}$, vérifiant $(\lambda_k)_I \geqslant 0$, à l'itéré suivant $(\lambda_{k+1}, r_{k+1}) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}_{++}$, vérifiant $(\lambda_{k+1})_I \geqslant 0$, par les étapes suivantes.

1. *Nouvel itéré primal.* Avec ℓ_{r_k} défini en (12.21), calculer

$$x_k \in \arg\min \ell_{r_k}(\cdot, \lambda_k).$$

2. *Test de convergence.* Arrêt si $\tilde{c}_{\lambda_k, r_k}(x_k) \simeq 0$, où $\tilde{c}_{\mu,r}$ est défini en (12.22).
3. *Nouveau multiplicateur.* Choisir un pas $\alpha_k > 0$ et prendre

$$\lambda_{k+1} = \lambda_k + \alpha_k \tilde{c}_{\lambda_k, \alpha_k}(x_k) = (\lambda_k + \alpha_k c(x_k))^{\#}.$$

3. *Mise à jour du paramètre de pénalisation* r_k si nécessaire.

Ce schéma algorithmique mérite quelques éclaircissements.

- À l'étape 1, il est rare que l'on minimise complètement le lagrangien augmenté ; de toute façon, un test d'arrêt pour la minimisation de ce problème non linéaire doit être introduit, si le roblème original est lui-même non linéaire. Une possibilité est d'utiliser le principe général selon lequel il ne faut pas être plus exigeant dans la minimisation *interne* (l'étape 1), que ce que l'algorithme a obtenu par la boucle *externe* (ensemble des étapes 1 à 4). Autrement dit, on peut utiliser un test qui compare les normes des quantités qui doivent tendre vers zéro dans les problèmes interne ($\nabla_x \ell_{r_k}(x_k, \lambda_k)$, voir (12.24)) et externe ($\tilde{c}_{\lambda_k, r_k}(x_k)$, voir (12.25)) ; l'algorithme se contente d'un x_k vérifiant

$$\|\nabla_x \ell_{r_k}(x_k, \lambda_k)\| \leqslant \sigma \|\tilde{c}_{\lambda_k, r_k}(x_k)\|, \tag{12.29}$$

  où $\sigma > 0$ est une constante « bien choisie ». À notre connaissance, on n'a pas réussi jusqu'à présent (2020) à démontrer la convergence de l'algorithme avec un critère d'arrêt des itérations internes aussi simple que celui-là, même pour les problèmes convexes, sans pour autant avoir d'argument écartant l'opportunité d'un tel critère. Pour diverses contributions sur ce sujet, on pourra consulter [45, 122, 278, 121, 47, 162, 496, 497, 164, 165, 498, 163, 301, 161, 11, 173, 190, 174 ; 1982-2013].

- Le test d'arrêt de l'étape 2 est fondé sur le fait que l'on a bien optimalité au premier ordre si $\tilde{c}_{\lambda_k, r_k}(x_k) = 0$. En effet, l'optimalité à l'étape 1 et (12.24) impliquent que $\nabla_x \ell(x_k, \lambda_k) = 0$. Par ailleurs, $\tilde{c}_{\lambda_k, r_k}(x_k) = 0$ implique que

$$c_E(x_k) = 0 \qquad \text{et} \qquad \min\left(\frac{(\lambda_k)_I}{r_k}, -c_I(x_k)\right) = 0.$$

  Cette dernière relation est équivalente aux relations de *complémentarité* $0 \leqslant (\lambda_k)_I \perp -c_I(x_k) \geqslant 0$, qui avec $c_E(x_k) = 0$, montrent que les autres conditions du système d'optimalité (4.32) de KKT sont vérifiées.

- À l'étape 3, on prend souvent le pas $\alpha_k = r_k$ comme le suggère la discussion qui précède.

- La seconde partie de la formule de mise à jour de λ_k à l'étape 3 montre que $(\lambda_{k+1})_I \geqslant 0$, si bien que l'algorithme se retrouve au début de l'itération suivante dans les mêmes conditions qu'à l'itération courante.

- La mise-à-jour du facteur de pénalisation r_k à l'étape 4 est une opération délicate, car on manque souvent de connaissance pour en détermniner une valeur correcte, si bien que les concepteurs de solveur utilisent des heuristiques variées. Par exemple, dans [11 ; 2007], r_k n'est mis à jour que lorsqu'au cours de l'itération précédente, une amélioration suffisante de l'admissibiité ou de la complémentarité n'est pas observée. Mentionnons le cas particulier de l'optimisation quadratique convexe, qui est bien mieux compris, pour lequel l'algorithme peut régler la valeur de r_k en fonction de la vitesse de convergence prescrite [146, 109].

Algorithme du lagrangien augmenté pour résoudre un problème convexe non réalisable. Lorsque le problème est convexe, l'algorithme du lagrangien augmenté est identique à l'algorithme proximal sur la fonction duale (proposition 13.33), si bien

que son comportement sur des problèmes non réalisables peut se déduire de celui de l'algorithme proximal ; il est décrit dans [85, 456, 504 ; 1977-1987]. On montre que l'algorithme a un comportement maîtrisé :

- il trouve la plus petite translation $\bar{s}$, au sens de la norme ℓ_2, randant le problème réalisable,
- il minimise l'objectif sur les contraintes translatées par ce $\bar{s}$.

On peut être plus précis lorsque le problème est quadratique convexe [203 ; 1982, remarque 5.6] et [144 ; 2006] (pour les contraintes d'égalité seulement) et [109 ; 2016] (pour les contraintes d'inégalité) et montrer un résultat de convergence linéaire globale.

12.4.5 Méthode du lagrangien augmenté à directions alternées ▲

L'algorithme du *lagrangien augmenté à directions alternées*, souvent référencé par son sigle anglo-saxon ADMM abrégeant *Alternating Direction Method of Multipliers*, s'est montré sur le devant de la scène ces dernières années, du fait de son intérêt dans la résolution des *problèmes à données massives* (apprentissage approfondi, acquisition comprimée[2], traitement d'images, *etc*) [279, 74]. Dans ces problèmes aux milliards de variables, on ne cherche pas une solution précise, hors d'atteinte, mais l'accent est mis sur l'obtention *rapide* d'une solution *approchée*. L'algorithme ADMM convient à cette situation. Cet algorithme a été introduit dans les années 1970 pour résoudre certains types d'équations aux dérivées partielles [236, 210]. Il s'agit d'une méthode de lagrangien augmenté, dans laquelle la minimisation de ce dernier, à multiplicateur fixé, se fait de manière très approchée par un unique cycle de Gauss-Seidel (section 7.3.3). L'évocation de ce couple de mathématiciens suggère que le problème puisse être décrit par (au moins) deux groupes de variables, notées $x \in \mathbb{E}$ et $y \in \mathbb{F}$, des groupes parfois introduits artificiellement (par duplication de variables par exemple, voir la section **??**) de manière à pouvoir appliquer la méthode et bénéficier de ses caractéristiques.

L'algorithme ADMM est en réalité adapté à la résolution de problèmes qui peuvent s'écrire de la manière suivante :

$$\begin{cases} \inf_{(x,y)} f(x) + g(y) \\ Ax + By = c, \end{cases} \tag{12.30}$$

où $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ et $g : \mathbb{F} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ sont des fonctions définies sur des espaces vectoriels $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ pouvant prendre la valeur $+\infty$ (c'est-à-dire pouvant prendre en compte implicitement des contraintes supplémentaires), $A \in \mathcal{L}(\mathbb{E}, \mathbb{G})$ et $B \in \mathcal{L}(\mathbb{F}, \mathbb{G})$ sont des applications linéaires à valeurs dans un espace euclidien $\mathbb{G}$, et $c \in \mathbb{G}$. Le lagrangien augmenté associé est la fonction $\ell_r : \mathbb{E} \times \mathbb{F} \times \mathbb{G} \to \overline{\mathbb{R}}$ définie en $(x, y, \lambda) \in \mathbb{E} \times \mathbb{F} \times \mathbb{G}$ par

$$\ell_r(x, y, \lambda) = f(x) + g(y) + \langle \lambda, Ax + By - c \rangle + \frac{r}{2} \|Ax + By - c\|^2,$$

où $r > 0$ est le facteur d'augmentation, $\langle \cdot, \cdot \rangle$ est le produit scalaire de $\mathbb{G}$ et $\| \cdot \|$ est la norme associée à ce dernier.

[2] Traduction française de *compressed sensing* [30]. Il s'agit de trouver des solutions (de systèmes linéaires sous-déterminés par exemple) avec le plus de zéros. On exprime ce problème en utilisant la norme ℓ_1 : $\inf\{\|x\|_1 : x \in X\}$.

Algorithme 12.20 (ADMM) Une itération passe de l'itéré courant $(y_k, \lambda_k) \in \mathbb{F} \times \mathbb{G}$ à l'itéré suivant (y_{k+1}, λ_{k+1}) par les étapes ci-dessous :

$$x_{k+1} \in \operatorname*{arg\,min}_{x \in \mathbb{E}} \ \ell_r(x, y_k, \lambda_k) \tag{12.31}$$

$$y_{k+1} \in \operatorname*{arg\,min}_{y \in \mathbb{F}} \ \ell_r(x_{k+1}, y, \lambda_k) \tag{12.32}$$

$$\lambda_{k+1} := \lambda_k + r(Ax_{k+1} + Bx_{k+1} - c). \tag{12.33}$$

Comme annoncé, l'algorithme ressemble très fort à l'algorithme du lagrangien augmenté 12.19, si ce n'est que la minimisation complète de $\ell_r(\cdot, \cdot, \lambda_k)$ est remplacée par un cycle gauss-seidelien (section 7.3.3) : une première minimisation en x dans (12.31), avec y fixé à y_k, suivie d'une minimisation en y dans (12.32), avec x fixé à x_{k+1} ; c'est tout, alors que l'algorithme de Gauss-Seidel itérerait ce cycle jusqu'à minimisation complète du lagrangien augmenté. C'est à cette double minimisation que l'on doit le vocable *directions alternées* utilisé dans le nom de l'algorithme. On notera que x_k est une variable auxiliaire qui ne doit pas exister au début de l'itération. Par ailleurs, cet algorithme n'est pas une méthode de dualité (chapitre 13), comme l'est l'algorithme du lagrangien augmenté, car l'itéré contient la variable primale y_k.

On peut montrer que la convergence du coût est en $O(1/k)$ [286, 395]. Des efforts importants ont été faits pour améliorer cette vitesse de convergence du coût, pour qu'elle soit en $O(1/k^2)$, notamment par le schéma de Nesterov [414, 245].

L'algorithme ADMM est adapté à l'optimisation quadratique convexe à la section **??**.

12.5 Pénalisation exacte non différentiable ▲

Le lagrangien augmenté étudié à la section 12.4 est une première manière d'obtenir une pénalisation exacte (voir la définition 12.1), pourvu que l'on connaisse un multiplicateur optimal (comme ce n'est généralement pas le cas, la méthode des multiplicateurs – l'algorithme 12.19 – approche celui-ci de manière itérative). L'idée sous-jacente est de pénaliser quadratiquement une fonction dont la dérivée est nulle en la solution, le lagrangien $\ell(\cdot, \bar{\lambda})$.

Une autre manière d'obtenir une pénalisation exacte est de le faire au moyen d'une fonction pénalisante non différentiable. Illustrons cela sur l'exemple 12.4. La figure 12.5 montre que si l'on ajoute le terme $r\,x^+$ à la fonction $1 - x - \frac{1}{3}x^3$, on obtient une fonction de pénalisation exacte dès que $r > 1$. Ce seuil $r = 1$ vient bien sûr ici de la pente de f en zéro et en toute généralité de la pente de la fonction valeur en zéro, si bien que c'est à nouveau le multiplicateur optimal $\bar{\lambda}$ qui jouera un rôle-clé dans la détermination de ce seuil.

De manière plus générale, si l'on enlève les carrés aux fonctions pénalisantes de la table 12.1, on obtient des fonctions de pénalisation exactes : si r est pris assez grand, les solutions *locales* de (P_X) sont solutions *locales* du problème pénalisé. Cela semble très intéressant, puisque l'on remplace un problème d'optimisation avec contraintes

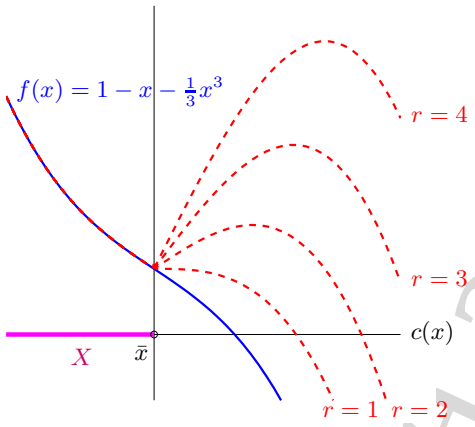


Fig. 12.5. Pénalisation non différentiable du problème (12.5) avec $r = 1$, 2, 3 et 4.

par un *unique* problème d'optimisation sans contrainte. On ne peut cependant pas gagner sur tous les plans : si la fonction de pénalisation est exacte, elle est aussi non différentiable et donc plus délicate à minimiser. La minimisation de ces fonctions se fait en général de manière détournée : on obtient une direction de descente en résolvant un problème auxiliaire et non pas en calculant quelque chose ressemblant à un gradient. Nous verrons au chapitre 14 une utilisation de cette idée.

Dans cette section, on considère le problème d'optimisation avec contraintes explicites

$$(P_{EI}) \quad \begin{cases} \inf \ f(x) \\ c_i(x) = 0, & i \in E \\ c_i(x) \leqslant 0, & i \in I, \end{cases}$$

décrit dans l'introduction de ce chapitre, auquel on associe la fonction de pénalisation suivante :

$$\Theta_r(x) = f(x) + r\|c(x)^{\#}\|_{\mathrm{P}}, \tag{12.34}$$

où $r > 0$ et $\|\cdot\|_{\mathrm{P}}$ est une norme quelconque. La première pénalisation de ce type a été introduite par Ablow et Brigham [2 ; 1955], avec la norme ℓ_1. Le résultat fondamental est donné à la proposition 12.23, qui énonce des conditions pour que Θ_r soit une fonction de pénalisation exacte.

Sa démonstration utilise les deux lemmes suivants. Le premier étudie la différentiabilité de Θ_r et utilise l'opérateur $P_v : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^m$, défini pour u et $v \leqslant 0$ dans $\mathbb{R}^m$ par

$$(P_v u)_i = \begin{cases} u_i & \text{si } i \in E \\ u_i^+ & \text{si } i \in I \text{ et } v_i = 0 \\ 0 & \text{si } i \in I \text{ et } v_i < 0. \end{cases}$$

Lemme 12.21 *Si f et c admettent des dérivées directionnelles en un point $x \in \mathbb{E}$, alors Θ_r admet des dérivées directionnelles en x et si $c(x)^\# = 0$, on a*

$$\Theta_r'(x;d) = f'(x;d) + r\|P_{c(x)}c'(x;d)\|_{\mathrm{P}}.$$

Démonstration. Le fait que Θ_r admette des dérivées directionnelles en x vient de ce que $(\cdot)^\#$ et $\|\cdot\|_{\mathrm{P}}$ sont lipschitziennes et admettent, ainsi que f et c, des dérivées directionnelles en x (proposition C.3).

Si $c(x)^\# = 0$, on a

$$\Theta_r'(x;d) = f'(x;d) + r(\|\cdot\|_{\mathrm{P}})'(0;(c^\#)'(x;d)).$$

Mais

$$(\|\cdot\|_{\mathrm{P}})'(0;v) = \lim_{t\downarrow 0}\frac{1}{t}\|tv\|_{\mathrm{P}} = \|v\|_{\mathrm{P}}$$

et

$$(c^\#)'(x;d) = (\cdot^\#)'(c(x);c'(x;d)) = P_{c(x)}c'(x;d).$$

On en déduit le résultat. □

Le second lemme montre qu'avec un facteur de pénalisation suffisamment grand, Θ_r domine le *lagrangien ordinaire* $\ell(\cdot,\bar\lambda)$ sur $\mathbb{E}$. On rappelle de (A.8) que la *norme duale* de $\|\cdot\|_{\mathrm{P}}$ pour le produit scalaire euclidien est la norme $\|\cdot\|_{\mathrm{D}}$ définie par

$$\|y\|_{\mathrm{D}} = \sup_{\|x\|_{\mathrm{P}}\leqslant 1} y^{\mathsf{T}}x.$$

Lemme 12.22 *Si $\lambda \in \mathbb{R}^m$ vérifie $r \geqslant \|\lambda\|_{\mathrm{D}}$ et $\lambda_I \geqslant 0$, alors pour tout $x \in \mathbb{E}$ on a $\ell(x,\lambda) \leqslant \Theta_r(x)$.*

Démonstration. Comme $\lambda_I \geqslant 0$, on a

$$\ell(x,\lambda) \leqslant f(x) + \lambda^{\mathsf{T}}c(x)^\#.$$

On en déduit que

$$\ell(x,\lambda) \leqslant f(x) + \|\lambda\|_{\mathrm{D}}\|c(x)^\#\|_{\mathrm{P}} \leqslant f(x) + r\|c(x)^\#\|_{\mathrm{P}} = \Theta_r(x).$$ □

Voici le résultat annoncé donnant des conditions suffisantes pour que Θ_r soit une fonction de pénalisation exacte en $\bar x$.

Proposition 12.23 (exactitude de Θ_r) *Soit $\bar{x}$ un minimum local du problème (P_{EI}). On suppose que f et c sont deux fois dérivables en $\bar{x}$ et lipschitziennes dans un voisinage de $\bar{x}$. On suppose également que $\bar{x}$ vérifie les conditions suffisantes d'optimalité du second ordre faible (4.58). On suppose enfin que*

$$r \geqslant \sup_{\bar{\lambda} \in \Lambda(\bar{x})} \|\bar{\lambda}\|_{\mathrm{D}} \qquad \text{et} \qquad r > \|\hat{\lambda}\|_{\mathrm{D}}, \text{ pour un } \hat{\lambda} \in \Lambda(\bar{x}), \tag{12.35}$$

où $\Lambda(\bar{x})$ est l'ensemble non vide des multiplicateurs optimaux associés à $\bar{x}$. Alors, $\bar{x}$ est un minimum local strict de la fonction de pénalisation Θ_r donnée en (12.34).

Démonstration. On raisonne par l'absurde en supposant que $\bar{x}$ n'est pas un minimum local strict de Θ_r. Alors, il existe une suite $\{x_k\}$ telle que $x_k \neq \bar{x}$, $x_k \to \bar{x}$ et

$$\forall k \geqslant 1 : \quad \Theta_r(x_k) \leqslant \Theta_r(\bar{x}). \tag{12.36}$$

1) *Construction d'une direction critique non nulle.* Comme la suite $\{(x_k - \bar{x})/\|x_k - \bar{x}\|\}$ est bornée ($\|\cdot\|$ est une norme arbitraire), on peut en extraire une sous-suite convergente : $(x_k - \bar{x})/\|x_k - \bar{x}\| \to d$, où $\|d\| = 1$. En notant $\alpha_k = \|x_k - \bar{x}\|$, on a

$$x_k = \bar{x} + \alpha_k d + o(\alpha_k).$$

Montrons que d est la direction critique recherchée.

- Comme Θ_r est lipschitzienne dans un voisinage de $\bar{x}$, on a

  $$\Theta_r(x_k) = \Theta_r(\bar{x} + \alpha_k d) + o(\alpha_k).$$

  Alors (12.36) montre que $\Theta'_r(\bar{x}; d) \leqslant 0$. Alors, grâce au lemme **??**, on peut écrire

  $$f'(\bar{x}) \cdot d + r\|P_{c(\bar{x})}(c'(\bar{x}) \cdot d)\|_{\mathrm{P}} \leqslant 0. \tag{12.37}$$

  On a donc certainement

  $$f'(\bar{x}) \cdot d \leqslant 0. \tag{12.38}$$

- D'autre part, d'après les hypothèses, on peut trouver un multiplicateur optimal $\hat{\lambda}$ tel que $r > \|\hat{\lambda}\|_{\mathrm{D}}$. En utilisant les conditions d'optimalité du premier ordre, notamment la positivité de $\hat{\lambda}_I$ et la complémentarité $\hat{\lambda}_I^{\mathsf{T}} c_I(x_*) = 0$, on a

  $$\begin{aligned} f'(\bar{x}) \cdot d &= -\sum_{i \in E \cup I} \hat{\lambda}_i \, c'_i(\bar{x}) \cdot d \\ &\geqslant -\hat{\lambda}^{\mathsf{T}} P_{c(\bar{x})}(c'(\bar{x}) \cdot d) \\ &\geqslant -\|\hat{\lambda}\|_{\mathrm{D}} \|P_{c(\bar{x})}(c'(\bar{x}) \cdot d)\|_{\mathrm{P}}. \end{aligned}$$

  Alors (12.37) implique que $P_{c(\bar{x})}(c'(\bar{x}) \cdot d) = 0$, c'est-à-dire

  $$\begin{cases} c'_i(\bar{x}) \cdot d = 0 & \text{pour } i \in E \\ c'_i(\bar{x}) \cdot d \leqslant 0 & \text{pour } i \in I^0(\bar{x}). \end{cases}$$

  Ces relations et (12.38) montrent que d est une direction critique non nulle.

Soit à présent $\bar\lambda$ le multiplicateur dépendant de d, déterminé par (4.58). D'après la proposition 4.47, on a

$$d^{\mathsf T}\nabla^2_{xx}\ell(\bar x,\bar\lambda)d>0.$$

Alors le développement suivant (on utilise le fait que $\nabla_x\ell(\bar x,\bar\lambda)=0$)

$$\ell(x_k,\bar\lambda)=\ell(\bar x,\bar\lambda)+\frac{\alpha_k^2}{2}d^{\mathsf T}\nabla^2_{xx}\ell(\bar x,\bar\lambda)d+o(\alpha_k^2)$$

permet de voir que, pour k suffisamment grand, on a

$$\ell(x_k,\bar\lambda)>\ell(\bar x,\bar\lambda). \tag{12.39}$$

On conclut en obtenant une contradiction. Pour k grand, on a

$$\begin{array}{rcll}\Theta_r(x_k) &\leqslant& \Theta_r(\bar x) & \text{[par (12.36)]}\\ &=& f(\bar x)&\\ &=& \ell(\bar x,\bar\lambda)&\\ &<& \ell(x_k,\bar\lambda) & \text{[par (12.39)]}\\ &\leqslant& \Theta_r(x_k) & \text{[par le lemme 12.22]},\end{array}$$

ce qui est absurde. □

Notes

Origine du lagrangien augmenté. Le lagrangien augmenté (12.18) associé aux problèmes avec contraintes d'égalité remonte au moins à Arrow et Solow [21 ; 1958] qui l'utilisent pour localiser des points-selles au moyen d'équations différentielles modifiant les variables primales et duales simultanément. Il a été redécouvert et utilisé indépendamment par Hestenes [289 ; 1969] et Powell [438 ; 1969] dans le même contexte algorithmique qu'ici, celui de la méthode des multiplicateurs du schéma 12.19, qui modifie les variables primales et duales séquentiellement. Le lagrangien augmenté (12.21) permettant de prendre en compte des contraintes d'inégalité est attribué à Rockafellar [463, 465, 466, 469 ; 1971-76] ; voir aussi Buys [89 ; 1972] et Arrow, Gould et Howe [20 ; 1973]. On pourra consulter la revue de Bertsekas [43 ; 1976] pour plus de références bibliographiques avant 1976.

Lagrangiens augmentés plus réguliers. Même en l'absence de complémentarité stricte, on peut obtenir des lagrangiens augmentés plus réguliers que celui (12.19) de la section 12.4.3 (voir ce qu'il en est dit à la proposition 12.17), si le terme de pénalisation quadratique est remplacé par d'autres fonctions (*divergence de Bregman*, *φ-divergence*, *etc*) ; sur ces questions, on pourra consulter [98, 511, 172, 27, 28, 491 ; 1992-2006]. Il n'est pas clair, cependant, qu'une telle fonction plus régulière soit intéressante numériquement [51, 173].

Algorithme du lagrangien augmenté pour résoudre un problème quadratique convexe. La proposition **??** étend un résultat de [234, 235, 203 ; 1976-1982] au cas où H n'est définie positive que dans le noyau de A ; la démonstration est identique. La

convergence linéaire globale de l'algorithme du lagrangien augmenté (ou méthode des multiplicateurs) sur les problèmes quadratiques convexes (éventuellement non réalisables) est étudiée dans [146, 109].

Minimisation inexacte du lagrangien augmenté. On gagne en efficacité en minimisant de manière approchée le lagrangien augmenté à l'étape 1 de la méthode des multiplicateurs (schéma 12.19), avec une précision qui dépend de la proximité de la solution. Pour une étude locale dans le cas de l'optimisation non linéaire, on pourra lire [190].

Pénalisation exacte. Nous avons montré que l'on peut obtenir des fonctions de pénalisation qui sont exactes en des points vérifiant les conditions d'optimalité du second ordre (proposition 12.23). On peut suivre la démarche inverse et retrouver les conditions d'optimalité à partir du concept de pénalisation exacte. Voir [86, 560].

Exercices

12.1. *Pénalisation quadratique.* Soit $\Theta_r : \mathbb{E} \to \mathbb{R}$ la fonction de pénalisation quadratique définie en (12.12).

1) Montrez qu'en $x \in \mathbb{E}$:

$$\Theta_r(x) = \inf_{s \in \mathbb{R}^{m_I}_+} f(x) + \frac{r}{2}\|c_E(x)\|_2^2 + \frac{r}{2}\|c_I(x) + s\|_2^2.$$

Remarque. La fonction Θ_r s'obtient donc en remplaçant les contraintes $c(x)^\# = 0$ de (P_{EI}) par les contraintes équivalentes ($c_E(x) = 0$, $c_I(x) + s = 0$ et $s \geqslant 0$) et en prenant une pénalisation quadratique des contraintes d'égalité tout en gardant explicite les contraintes de positivité $s \geqslant 0$.

2) Montrez que, si f et c définissant (P_{EI}) sont différentiables en x, alors

$$\nabla\Theta_r(x) = \nabla f(x) + \sum_{i \in E \cup I} r[c(x)]_i^\# \, \nabla c_i(x).$$

12.2. *Conditionnement limite de la hessienne du lagrangien augmenté.* Soient H une matrice d'ordre n symétrique et A une matrice de type $m \times n$ telles que $\sigma := \inf\{v^\mathsf{T} H v : v \in \mathcal{N}(A),\ \|v\|_2 = 1\} > 0$. On note $\kappa_2(H_r)$ le conditionnement ℓ_2 de la matrice $H_r := H + rA^\mathsf{T}A$. Montrez que

$$\lim_{r \to +\infty} \frac{\kappa_2(H_r)}{r} = \frac{\|A\|_2^2}{\sigma}.$$

12.3. *Pénalisation exacte ℓ_1.* On suppose que f et c sont régulières dans un voisinage d'une solution $\bar{x}$ de (P_{EI}). On se donne des scalaires positifs r_i, $i \in E \cup I$, et on considère la fonction de pénalisation suivante

$$\Theta_r^1(x) = f(x) + \sum_{i \in E} r_i |c_i(x)| + \sum_{i \in I} r_i c_i(x)^+.$$

On suppose également qu'il existe un multiplicateur $\bar{\lambda} = \{\bar{\lambda}_i\}_{i \in E \cup I}$ tel que $(\bar{x}, \bar{\lambda})$ vérifie les conditions suffisantes d'optimalité du deuxième ordre. Montrez que si

$$r_i > |\bar{\lambda}_i|, \quad \text{pour } i \in E \cup I,$$

alors $\bar{x}$ est un minimum local strict de Θ_r^1.

12.4. *Lagrangien augmenté non différentiable* [62 ; 1989]. On suppose que f et c sont régulières dans un voisinage d'une solution $\bar{x}$ du problème $\inf\{f(x) : c(x) = 0\}$. On suppose également qu'il existe un multiplicateur $\bar{\lambda}$ tel que $(\bar{x}, \bar{\lambda})$ vérifie les conditions suffisantes d'optimalité du deuxième ordre de ce problème. Montrez que

$$\Theta_{\mu,r}(x) = f(x) + \mu^{\mathsf{T}} c(x) + r\|c(x)\|_{\mathrm{P}}$$

est une fonction de pénalisation exacte du problème d'optimisation considéré si $r > \|\bar{\lambda} - \mu\|_{\mathrm{D}}$.

12.5. *Courbes de niveaux de fonctions de pénalisation.* On considère un problème de minimisation sur $\mathbb{R}^2$

$$\begin{cases} \inf\ f(x) \\ x \in \mathbb{R}^2 \\ c(x) = 0, \end{cases}$$

en présence d'une unique contrainte d'égalité. Les fonctions f et $c : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ sont supposées régulières. La figure 12.6 donne les tracés des courbes de niveau de trois

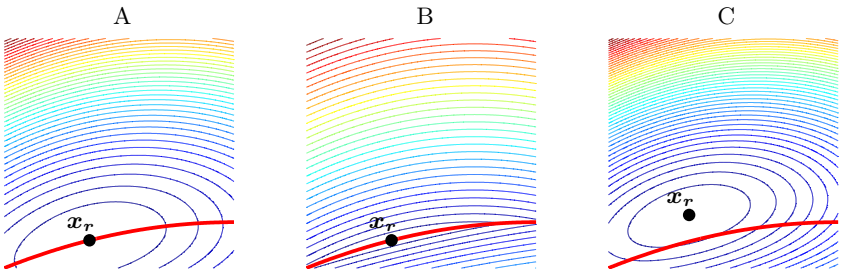


Fig. 12.6. Courbes de niveaux de 3 fonctions de pénalisation

fonctions de pénalisation associées au problème ci-dessus. L'ensemble admissible du problème est représenté dans chaque tracé par la courbe en trait large du bas. Déterminez pour chaque tracé A, B et C, laquelle des fonctions de pénalisation Θ_r^1, Θ_r^2 ou Θ_r^3 données ci-après qui a été utilisée pour dessiner ces courbes de niveau, sachant que toutes les trois ont été utilisées. Dans celles-ci r est un scalaire strictement positif et λ_* est le multiplicateur optimal du problème. Le minimum de ces fonctions est repéré par le point x_r dans chaque dessin.

$$\begin{aligned} \Theta_r^1(x) &= f(x) + \frac{r}{2}\|c(x)\|_2^2 \\ \Theta_r^2(x) &= f(x) + \lambda_*^{\mathsf{T}} c(x) + \frac{r}{2}\|c(x)\|_2^2 \\ \Theta_r^3(x) &= f(x) + r\|c(x)\|_2 \end{aligned}$$

13 Dualité

Les sages lui réservent toujours l'autre moitié du sens que mère nature sagement redoubla.

B. Gracián (1647). Oracle manuel et art de prudence. Traduction de B. Pelegrín [254].

Unus ego et multi in me.

M. Yourcenar. L'Œuvre au noir [556 ; 1968].

On the basis of this duality, close connections between otherwise disparate properties are revealed. [...] *In this way the analysis of a given situation can often be translated into an equivalent yet very different context. This can be a major source of insights as well as a means of unifying seemingly divergent parts of theory.*

R.T. Rockafellar, R.J.-B. Wets [473 ; 1998].

La dualité est une technique magique qui permet de révéler la face cachée de certains problèmes d'optimisation et d'établir des liens entre des problèmes qui peuvent paraître sans point commun au premier abord. Elle permet ainsi de mettre au jour de nouvelles propriétés sur ces problèmes, de mieux les comprendre, et d'introduire des algorithmes de résolution non triviaux. Parfois, la dualité apporte un éclairage original sur des algorithmes connus, conduisant alors à une meilleure conception de ceux-ci, voire à des résultats de convergence.

On sait que les problèmes d'optimisation avec contraintes ont des *variables cachées*, qui n'apparaissent pas dans l'expression du problème original, mais qui sont pourtant extrêmement précieuses : ce sont les multiplicateurs optimaux. On les utilise pour écrire les conditions d'optimalité, pour reconnaître les solutions, mais aussi pour définir des algorithmes de résolution, comme nous allons le voir dans ce chapitre et dans d'autres. Dans cet ouvrage, ces multiplicateurs sont apparus lors de l'obtention des conditions d'optimalité (chapitre 4), par l'intermédiaire du lemme de Farkas (section 2.5.6) : dans le cas du problème (P_{EI}), sachant que le gradient de l'objectif en la solution est dans le cône dual du cône tangent à l'ensemble admissible en ce point (CN1 de Peano-Kantorovitch de la proposition 4.6), qui est alors un cône polyédrique, on en déduit que ce gradient est l'image par une application linéaire d'un vecteur dont les composantes correspondant aux contraintes d'inégalité sont signées ; ce sont les multiplicateurs optimaux (voir la démonstration du théorème 4.30 par

exemple). Ces multiplicateurs forment apparemment un obscur vecteur, dont l'utilité ne semblait a priori que technique (l'écriture des conditions d'optimalité), mais dont la signification s'est manifestée par l'interprétation marginaliste de ses composantes que l'on a pu en faire (section 4.6.1) : les multiplicateurs optimaux expriment la variation au premier ordre de la valeur optimale du problème d'optimisation, lorsqu'on perturbe ses contraintes. Ce chapitre met en évidence une troisième propriété remarquable de ces multiplicateurs optimaux : ils sont parfois solutions d'autres problèmes d'optimisation, que l'on qualifie de *duaux* du problème original. Ce dernier est alors qualifié de *primal*.

En plus de donner une nouvelle interprétation aux multiplicateurs optimaux, la dualité a aussi un intérêt algorithmique. Les *méthodes primales* de résolution d'un problème d'optimisation se concentrent sur la détermination d'une solution optimale $\bar{x}$ en construisant une suite $\{x_k\}$ qui converge vers elle. Les méthodes vues précédemment peuvent être qualifiées de primales : méthodes de projection (section 11.1), méthodes d'activation (section 11.2) et méthodes de pénalisation (chapitre 12). Dans ces approches algorithmiques, un multiplicateur optimal $\bar{\lambda}$ est obtenu comme sous-produit de l'algorithme, permettant en particulier de vérifier l'optimalité de $\bar{x}$ (voir par exemple la proposition 12.10). Dans les *méthodes duales*, celles utilisant la dualité, l'effort est d'abord porté sur la recherche d'un multiplicateur optimal $\bar{\lambda}$ (aussi appelé *variable duale*, d'où le nom donné à ces approches algorithmiques) : on génère une suite de multiplicateurs $\{\lambda_k\}$ convergeant vers $\bar{\lambda}$. Dans les bons cas, la solution primale $\bar{x}$ est obtenue comme sous-produit de l'algorithme. C'est bien sûr le problème dual qui va aider à construire cette suite $\{\lambda_k\}$. Le problème dual n'est pas déterminé de manière unique et on verra une technique permettant d'en générer autant que l'on veut. Ceux-ci sont plus ou moins adaptés à un problème donné et plus ou moins aisés à résoudre. L'intérêt des méthodes duales apparaît lorsqu'on peut trouver un problème dual qui est plus simple à résoudre que le problème original et (cela paraît évident) qui a un rapport avec lui.

Il n'est pas toujours possible de trouver un problème dual dont les solutions sont les multiplicateurs optimaux et qui soit simple à analyser ou à résoudre numériquement. Même si cet objectif n'est pas atteint, les techniques de dualisation introduites dans ce chapitre restent précieuses car les problèmes duaux qu'elles construisent ont la propriété d'avoir une valeur optimale inférieure à celle du problème primal ; c'est la relation dite de *dualité faible* de la proposition 13.2. La différence entre les deux valeurs optimales est appelée le *saut de dualité*. Sur papier, le problème dual permet donc d'obtenir une borne inférieure de la valeur optimale du problème primal, parfois précise et souvent utile (voir l'exercice 17.3 par exemple). Numériquement, si le saut de dualité est faible et si le problème dual est plus simple à résoudre que le problème original, sa résolution permettra de trouver des solutions approchées du problème original dont la pertinence dépendra de chaque cas (comme exemple, on peut citer la relaxation SDP de problèmes non convexes ou combinatoires).

La notion de dualité est très générale et apparaît dans des contextes variés. En optimisation, elle peut s'appliquer à la minimisation de fonctions définies sur un ensemble X non vide quelconque. Celui-ci peut être $\mathbb{R}^n$, un espace fonctionnel, un ensemble discret ou une partie d'un de ces espaces éventuellement définie par des relations fonctionnelles. Nous allons garder cette généralité aussi longtemps que possible.

Les fonctions considérées dans ce chapitre seront à valeurs dans $\overline{\mathbb{R}} = \mathbb{R} \cup \{-\infty, +\infty\}$. Elles peuvent donc prendre les valeurs $-\infty$ et $+\infty$. L'intérêt de cette généralisation audacieuse vient de ce que le problème d'optimisation

$$\min_{x \in X} f(x),$$

dans lequel X est un ensemble arbitraire, peut alors représenter un problème d'optimisation avec contrainte. Par exemple, le problème

$$\begin{cases} \min \tilde{f}(x) \\ x \in A, \end{cases}$$

où A est une partie de X et $\tilde{f} : X \to \mathbb{R}$ est à valeurs réelles, pourra s'écrire comme ci-dessus si l'on définit

$$f = \tilde{f} + \mathcal{I}_A,$$

où $\mathcal{I}_A : X \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ est la fonction indicatrice de l'ensemble A. On peut donc traiter dans un même cadre les problèmes avec et sans contrainte. On rappelle que le domaine d'une fonction $f : X \to \overline{\mathbb{R}}$ est l'ensemble des points de X où elle ne prend pas la valeur $+\infty$. On le note

$$\operatorname{dom} f := \{x \in X : f(x) < +\infty\}.$$

La fonction f peut y prendre la valeur $-\infty$ cependant.

Il est difficile d'acquérir une bonne maîtrise de la dualité, malgré les nombreuses synthèses qui ont été publiées sur le sujet. C'est en effet une théorie qui peut être abordée avec des points de vue très différents et les liens entre ceux-ci ne sont pas toujours clairs. La dualité peut en effet être présentée sur des problèmes particuliers comme ceux de l'optimisation linéaire ou quadratique [160] ou sur certains problèmes convexes (section 13.3) ; elle peut aussi être introduite à partir des conditions d'optimalité (chapitre 4) des problèmes différentiables [545], à partir de la dualité min-max [507, 376], ou encore à partir de la perturbation de problèmes [218], avec éventuellement l'apport de la conjugaison [460]. Nous essayerons de décrire ici, au moins en partie, ces différents points de vue.

Nous commencerons par introduire la dualité min-max (section 13.1). Pour l'utiliser, on écrit le critère du problème d'optimisation original, qualifié ici de *primal*, comme un supremum, si bien que ce problème primal s'écrit comme l'inf-sup d'une *fonction de couplage* φ. Par définition, le problème *dual* s'obtient alors en inversant l'infimum et le supremum. Il s'écrit donc comme le sup-inf de la même fonction φ. Cette notion de dualité est liée au concept de point-selle. Il y a beaucoup de manières d'écrire une fonction comme un supremum et toutes n'ont pas un intérêt équivalent, parce que le problème dual résultant n'est pas plus simple à résoudre que le problème primal ou n'apporte pas d'information pertinente. À la section 13.2, nous présentons l'approche souvent fructueuse qui consiste à « plonger » le problème original dans une famille de problèmes qui sont des perturbations de celui-ci. Cela donne une procédure pour écrire f comme un supremum et se ramener ainsi à la dualité min-max. Ces notions sont ensuite appliquées au cadre particulier de la dualité de Fenchel (section 13.3) et à la minimisation de fonctions sur $\mathbb{R}^n$ en présence de contraintes d'égalité

et d'inégalité (sections 13.5 et 13.6). Finalement, deux approches numériques de résolution par dualité sont présentées (section 13.7) ; toutes deux recherchent un point-selle de φ : la première approche le fait par l'intermédiaire de la fonction duale, la seconde travaille directement sur φ.

On peut lire ce chapitre de deux manières différentes. Dans la première, l'on se passe de la notion de fonction conjuguée et l'on fait l'impasse sur le lien entre dualité et perturbation de problème d'optimisation (section 13.2). Pour cela, on lit d'abord la section 13.1, puis directement les sections 13.5 et 13.6 en considérant les lagrangiens des formules (13.32) et (13.39) comme des fonctions de couplage φ (celles de la section 13.1) données. Pour avoir une connaissance plus approfondie de la dualité, il faudra passer par la notion de fonction conjuguée, que l'on pourra aborder en seconde lecture. Ce concept permet d'établir les formules des lagrangiens ordinaire (13.32) et augmenté (13.39) à partir de perturbations du problème d'optimisation original.

13.1 Dualité min-max

As far as I can see, there could be no theory of games [...] *without that theorem* [...] *I thought there was nothing worth publishing until the 'Minimax Theorem' was proved.*

J. von Neumann, cité par J.L. Casti [96 ; 1996, p. 19].

La règle du « maximin » nous dit de hiérarchiser les solutions possibles en fonction de leur plus mauvais résultat possible : nous devons choisir la solution dont le plus mauvais résultat est supérieur à chacun des plus mauvais résultats des autres.

J. Rawls (1971). Théorie de la Justice [454].

L'histoire de la dualité min-max a probablement commencé avec le théorème du minimax de von Newmann (1928), auquel il est fait allusion dans la première épigraphe de cette section (il est proposé à l'exercice 15.12). Cette théorie a pris beaucoup d'ampleur et une grande importance, du fait de sa généralité qui permet de l'appliquer à des domaines variés.

13.1.1 Introduction d'un problème dual

Soient X un ensemble et $f : X \to \overline{\mathbb{R}}$ une fonction pouvant prendre des valeurs infinies. On considère le problème d'optimisation

$$(P) \qquad \inf_{x \in X} f(x).$$

Sa valeur optimale (éventuellement infinie) et son ensemble de solution (éventuellement vide) seront respectivement notés

$$\mathrm{val}(P) \qquad \text{et} \qquad \mathrm{Sol}(P).$$

Dans cette section, le problème (P) d'où l'on part est appelé le *problème primal* et ses solutions sont appelées les *solutions primales*.

De manière à introduire un problème dual de (P), on cherchera à représenter $f(x)$ comme un supremum :

$$f(x) = \sup_{y\in Y} \varphi(x,y), \tag{13.1}$$

où Y est un ensemble et $\varphi : X \times Y \to \overline{\mathbb{R}}$ sera appelée la *fonction de couplage* entre variables x et y. Par exemple, si $f \in \mathrm{C}\overline{\mathrm{onv}}(\mathbb{R}^n)$, elle est l'enveloppe supérieure de ses minorantes affines (point 1 de la proposition 3.40). Un autre exemple, plus pratique, est donné ci-dessous (l'exemple 13.1) et nous verrons à la section 13.2, une procédure permettant d'écrire f de cette manière. Lorsque f s'écrit comme ci-dessus, le problème primal devient

$$(P) \qquad \inf_{x\in X} \sup_{y\in Y} \varphi(x,y). \tag{13.2}$$

Insistons sur le fait que cette écriture veut dire que l'on cherche à minimiser la fonction $x \mapsto \sup_{y\in Y} \varphi(x,y)$.

On appelle *problème dual* de (P) relatif à φ le problème noté (D) et défini par

$$(D) \qquad \sup_{y\in Y} \inf_{x\in X} \varphi(x,y). \tag{13.3}$$

On a donc simplement inversé l'ordre dans lequel les extremums en $x \in X$ et en $y \in Y$ sont pris. La valeur optimale du problème (D) (éventuellement infinie) et son ensemble de solution (éventuellement vide) seront respectivement notés

$$\mathrm{val}(D) \qquad \text{et} \qquad \mathrm{Sol}(D).$$

Les solutions de (D) sont appelées les *solutions duales*. Le problème dual consiste donc à minimiser ce que l'on appelle la *fonction duale* δ associée à φ :

$$\delta : y \mapsto \delta(y) := -\inf_{x\in X} \varphi(x,y). \tag{13.4}$$

On gardera à l'esprit que, pour chaque $y \in Y$, il faut résoudre un problème de minimisation pour connaître la valeur $\delta(y)$ de la fonction duale !

Les problèmes

$$\inf_{x\in X} \varphi(x,y) \qquad \text{et} \qquad \sup_{y\in Y} \varphi(x,y)$$

sont appelé respectivement *problème interne primal* en $y \in Y$ et *problème interne dual* en $x \in X$. Dans certains contextes, ils portent parfois le nom de *problèmes de Lagrange*. On note respectivement

$$\bar{X}(y) := \arg\min_{x\in X} \varphi(x,y) \qquad \text{et} \qquad \overline{Y}(x) := \arg\max_{y\in Y} \varphi(x,y) \tag{13.5}$$

leur ensemble de solutions.

On peut souvent représenter f comme en (13.1) au moyen de différentes fonctions φ. À chacune d'elles correspond un problème dual différent. Il n'y a donc pas unicité du problème dual. En voici un exemple de dualisation, dont le principe est généralisable à d'autres contextes.

Exemple 13.1 Considérons le problème d'optimisation avec contraintes d'égalité

$$\inf_{\substack{x\in X\\ c(x)=0}} f(x),$$

dans lequel $c : X \to \mathbb{R}^m$. Ce problème peut s'écrire sous la forme

$$\inf_{x\in X} \tilde{f}(x),$$

si on définit $\tilde{f} = f + \mathcal{I}_{X_c}$ où $X_c = \{x \in X : c(x) = 0\}$. Les propriétés (1.1) sont importantes ici et joueront pleinement leur rôle dans tout ce chapitre. L'observation essentielle, à présent, est que l'on peut écrire $\tilde{f}$ comme un supremum :

$$\tilde{f}(x) = \sup_{y\in\mathbb{R}^m} \Big(f(x) + y^T c(x)\Big).$$

Le problème primal s'écrit

$$\inf_{x\in X} \sup_{y\in\mathbb{R}^m} \Big(f(x) + y^T c(x)\Big)$$

et le problème dual associé est

$$\sup_{y\in\mathbb{R}^m} \inf_{x\in X} \Big(f(x) + y^T c(x)\Big).$$

Si $X = \mathbb{R}^n$, la fonction de couplage φ utilisée ici est le lagrangien du problème. Nous reviendrons sur cette dualisation à la section **??**. □

13.1.2 Liens entre problèmes primal et dual, point-selle

Les problèmes primal et dual semblent a priori très différents. Si on met l'accent sur la minimisation en x, le problème primal consiste à minimiser la fonction $x \mapsto \sup_y \varphi(x, y)$ obtenue en maximisant point par point une famille $\mathcal{F}$ de fonctions $x \mapsto \varphi(x, y)$, paramétrées par $y \in Y$. Par ailleurs, le problème dual consiste à chercher dans cette famille $\mathcal{F}$, une fonction $\varphi(\cdot, y)$, $y \in Y$, dont le minimum est le plus élevé possible. Y a-t-il un lien entre ces deux problèmes ? De quelle nature est il ? C'est ce que l'on examine dans cette section, tout en restant à un niveau de généralité élevé.

La proposition suivante donne une relation entre les valeurs optimales primale et duale. Il s'agit d'un résultat très général puisqu'il ne fait d'hypothèse, ni sur les ensembles X et Y, ni sur la fonction φ.

Proposition 13.2 (dualité faible) *On a*

$$\sup_{y\in Y} \inf_{x\in X} \varphi(x, y) \leqslant \inf_{x\in X} \sup_{y\in Y} \varphi(x, y). \tag{13.6}$$

Démonstration. On a bien sûr

$$\forall\, x' \in X,\ \forall\, y' \in Y : \qquad \varphi(x', y') \leqslant \varphi(x', y')$$

et donc certainement

$$\forall\, x' \in X,\ \forall\, y' \in Y : \qquad \inf_{x \in X} \varphi(x, y') \leqslant \varphi(x', y').$$

En fixant $x' \in X$ et en prenant le supremum en $y' \in Y$ dans les deux membres, on obtient

$$\forall\, x' \in X : \qquad \sup_{y \in Y} \inf_{x \in X} \varphi(x, y) \leqslant \sup_{y \in Y} \varphi(x', y).$$

Le membre de gauche est indépendant de x', on peut donc prendre l'infimum en $x' \in X$ à droite et garder l'inégalité. Ceci conduit au résultat. □

Dans le cadre de la dualité min-max, on appelle *saut de dualité* l'écart positif entre les deux membres de (13.6) :

$$\text{Saut de dualité} := \operatorname{val}(P) - \operatorname{val}(D) \geqslant 0,$$

étant sous-entendu que ce saut est nul si $\operatorname{val}(P)$ et $\operatorname{val}(D)$ ont tous deux la même valeur infinie. On dit qu'*il n'y a pas de saut de dualité* si ce dernier est nul. En général, lorsqu'il y a un saut de dualité, les solutions éventuelles des problèmes primal et dual n'ont pas de rapports entre elles. Comme le montre le résultat suivant, l'existence de solutions primale et duale et l'égalité en (13.6) sont étroitement liés à l'existence de point-selle de φ (notion introduite à la définition 3.73).

Théorème 13.3 (caractérisation des points-selles) *Un couple de points $(\bar{x}, \bar{y}) \in X \times Y$ est un point-selle de φ sur $X \times Y$ si, et seulement si, $\bar{x}$ est solution du problème primal (13.2), $\bar{y}$ est solution du problème dual (13.3) et on a*

$$\sup_{y \in Y} \inf_{x \in X} \varphi(x, y) = \inf_{x \in X} \sup_{y \in Y} \varphi(x, y). \tag{13.7}$$

Dans ces conditions, la valeur en (13.7) est $\varphi(\bar{x}, \bar{y})$.

Démonstration. Quel que soit le couple $(\bar{x}, \bar{y}) \in X \times Y$, on a

$$\inf_{x \in X} \varphi(x, \bar{y}) \leqslant \sup_{y \in Y} \inf_{x \in X} \varphi(x, y) \leqslant \inf_{x \in X} \sup_{y \in Y} \varphi(x, y) \leqslant \sup_{y \in Y} \varphi(\bar{x}, y), \tag{13.8}$$

où la première inégalité provient de la définition même du « sup inf », la seconde n'est autre que (13.6) et la troisième provient de la définition même de l'« inf sup ».

[⇒] Si $(\bar{x}, \bar{y}) \in X \times Y$ est un point-selle de φ, alors les membres à l'extrême gauche et à l'extrême droite dans (13.8) sont tous deux égaux à $\varphi(\bar{x}, \bar{y})$. On en déduit que l'on a égalité partout dans (13.8), c'est-à-dire que $\bar{x}$ est solution primale (par l'égalité de droite), que $\bar{y}$ est solution duale (par l'égalité de gauche) et qu'il n'y a pas de saut de dualité (par l'égalité du milieu).

[⇐] Réciproquement, si $\bar{x}$ est solution du problème primal, si $\bar{y}$ est solution du problème dual et s'il n'y a pas de saut de dualité, on a égalité partout dans (13.8). Dès lors (les inégalités à gauche et à droite ci-dessous proviennent de la définition de l'infimum et du supremum)

$$\varphi(\bar{x},\bar{y}) \geqslant \inf_{x\in X} \varphi(x,\bar{y}) = \sup_{y\in Y} \varphi(\bar{x},y) \geqslant \varphi(\bar{x},\bar{y}).$$

On a donc égalité partout dans cette dernière relation. On en déduit (3.58). □

L'ensemble des points-selles d'une fonction $\varphi : X \times Y \to \overline{\mathbb{R}}$ a une structure très particulière, comme le montre le résultat suivant.

Corollaire 13.4 (produit cartésien des points-selles) *Supposons que la fonction $\varphi : X \times Y \to \overline{\mathbb{R}}$ ait un point-selle. Alors*
1) *l'ensemble des points-selles de φ est le produit cartésien* $\mathrm{Sol}(P) \times \mathrm{Sol}(D)$,
2) *la fonction φ prend une valeur constante sur* $\mathrm{Sol}(P) \times \mathrm{Sol}(D)$, *disons $\bar{\varphi}$,*
3) *on a*

$$\mathrm{Sol}(P) = \bigcap_{y\in Y} \{x \in X : \varphi(x,y) \leqslant \bar{\varphi}\} \quad \textit{et} \quad \mathrm{Sol}(D) = \bigcap_{x\in X} \{y \in Y : \varphi(x,y) \geqslant \bar{\varphi}\}.$$

Démonstration. 1) Soient (x_1,y_1) et (x_2,y_2) deux points-selles de φ. Il s'agit de montrer que (x_1,y_2) est aussi un point-selle. Par le théorème 13.3, x_1 est solution primale (car (x_1,y_1) est un point-selle), y_2 est solution duale (car (x_2,y_2) est un point-selle) et il n'y a pas de saut de dualité (car φ a un point-selle) ; on utilise alors la condition suffisante du théorème 13.3.

2) En utilisant le fait que (x_1,y_2) est un point-selle (inégalité (3.58)), on a

$$\varphi(x_1,y_1) \leqslant \varphi(x_1,y_2) \leqslant \varphi(x_2,y_2).$$

En permutant les indices, on trouve que $\varphi(x_1,y_1) = \varphi(x_2,y_2)$.

3) Soit $\bar{X} := \cap_{y\in Y}\{x \in X : \varphi(x,y) \leqslant \bar{\varphi}\}$. Il s'agit de montrer que $\mathrm{Sol}(P) = \bar{X}$ (l'expression de $\mathrm{Sol}(D)$ s'obtient de la même manière). Si $x_1 \in \mathrm{Sol}(P)$, alors $\varphi(x_1,y) \leqslant \bar{\varphi}$ pour tout $y \in Y$ (c'est l'inégalité de gauche dans (3.58)) ; donc $x_1 \in \bar{X}$. Inversement, si $x_1 \in \bar{X}$, on a $\sup_y \varphi(x_1,y) \leqslant \bar{\varphi} = \inf_x \sup_y \varphi(x,y)$ donc x_1 est solution primale et $x_1 \in \mathrm{Sol}(P)$. □

Lorsque φ a un point-selle, on dispose d'une *approche duale* pour résoudre le problème (P), celle qui consiste à résoudre le problème dual : on cherche $\bar{y} \in Y$ solution de

$$\sup_{y\in Y} \left(\inf_{x\in X} \varphi(x,y) \right).$$

Considérons alors le problème interne primal en une solution duale $\bar{y}$:

$$\inf_{x\in X} \varphi(x,\bar{y}). \tag{13.9}$$

Le corollaire suivant montre que les solutions du problème primal sont solutions de ce problème (mais la réciproque n'est pas nécessairement vraie, voir la section 13.1.4). On rappelle que $\bar{X}(y)$ et $\overline{Y}(x)$ sont définis en (13.5).

Corollaire 13.5 *Si φ a un point-selle $(\bar{x}, \bar{y})$, alors*

$$\varnothing \neq \mathrm{Sol}(P) \subseteq \bar{X}(\bar{y}) \qquad \textit{et} \qquad \varnothing \neq \mathrm{Sol}(D) \subseteq \overline{Y}(\bar{x}).$$

Démonstration. D'après le théorème 13.3, $\bar{x}$ est solution primale et $\bar{y}$ est solution duale ; donc $\mathrm{Sol}(P) \neq \varnothing$ et $\mathrm{Sol}(D) \neq \varnothing$. Par ailleurs, si $\hat{x}$ est solution primale, alors $(\hat{x}, \bar{y})$ est un point-selle (aussi par le théorème 13.3), et donc $\hat{x} \in \bar{X}(\bar{y})$. De même, si $\hat{y}$ est solution duale, alors $(\bar{x}, \hat{y})$ est un point-selle et donc $\hat{y} \in \overline{Y}(\bar{x})$. □

13.1.3 Existence de point-selle ▲ ⊖

Nous concluons cette section par un résultat d'existence de point-selle qui joue un peu le même rôle que celui de Weierstrass sur la minimisation de fonction (il est aussi de nature topologique), mais qui requiert des hypothèses beaucoup plus fortes. La discussion ci-dessous motive partiellement ces hypothèses.

Observons que la fonction φ a peu de chance d'avoir un point-selle si X ou Y est un ensemble fini. Par exemple si $Y = \{0, 1\}$ et si les fonctions $\varphi(\cdot, 0)$ et $\varphi(\cdot, 1)$ sont comme à gauche dans la figure 13.1, il y aura un saut de dualité (et donc pas

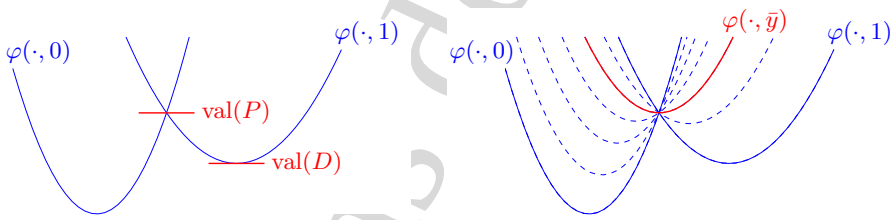


Fig. 13.1. Exemples avec et sans saut de dualité : $\varphi(x, y) = 2(1-y)[(x+1)^2 - 1] + y[(x-1)^2 - 1]$. À gauche, $Y = \{0, 1\}$: il y a un saut de dualité car aucune des fonctions $\varphi(\cdot, y)$ n'a pour valeur minimale $\mathrm{val}(P)$. À droite, $Y = [0, 1]$: il n'y a pas de saut de dualité car pour $\bar{y} = 2/3$, $\varphi(\cdot, \bar{y})$ a pour valeur minimale $\mathrm{val}(P)$; la solution duale est donc $\bar{y}$.

de point-selle). À l'inverse, si $\varphi(x, \cdot)$ est affine sur $Y = [0, 1]$ avec les mêmes fonctions $\varphi(\cdot, 0)$ et $\varphi(\cdot, 1)$ que précédemment (ce qui est suggéré par l'ensemble des courbes à droite dans la figure 13.1, correspondant à diverses valeurs de $y \in [0, 1]$), on obtient pour un certain $\bar{y} \in [0, 1]$ une courbe $\varphi(\cdot, \bar{y})$ ayant $\mathrm{val}(P)$ comme valeur minimale (la convexité des fonctions $\varphi(\cdot, y)$ joue ici un rôle important), ce qui implique qu'il n'y a pas de saut de dualité. Dans le résultat ci-dessous, on suppose que X et Y sont des parties *convexes* d'espaces vectoriels et que la fonction φ est convexe-concave.

La démonstration du résultat ci-dessous est fondée sur l'observation faite dans la remarque précédente.

Théorème 13.6 (Sion, existence de point-selle) *Supposons que X et Y soient des ensembles convexes non vides d'espaces vectoriels topologiques, que X soit compact et que*

(i) pour tout $y \in Y$, $\varphi(\cdot, y)$ est quasi-convexe s.c.i.,
(ii) pour tout $x \in X$, $\varphi(x, \cdot)$ est quasi-concave s.c.s..

Alors

$$\sup_{y\in Y} \min_{x\in X} \varphi(x,y) = \min_{x\in X} \sup_{y\in Y} \varphi(x,y). \tag{13.10}$$

Démonstration. Il suffit de montrer l'absence de saut de dualité, car le minimum (au lieu de l'infimum) en $x \in X$ dans (13.10) est une conséquence directe de la compacité de X, du caractère s.c.i. de $\varphi(\cdot, y)$ (quel que soit $y \in Y$) et de $x \mapsto \sup_{y\in Y} \varphi(x, y)$ et du théorème de Weierstrass (théorème 1.2). Comme $\mathrm{val}(D) \leqslant \mathrm{val}(P)$ par la dualité faible, il suffit de montrer que

$$\forall\, \varepsilon > 0, \quad \exists\, y \in Y : \qquad \inf_{x\in X} \varphi(x,y) \geqslant \mathrm{val}(P) - \varepsilon.$$

On procède par étapes, avec un ensemble Y de plus en plus général.

Étape 1 : *on suppose que Y est un intervalle* $[y_1, y_2]$.

Étape 2 : *on suppose que Y est un polytope* $\mathrm{co}\{y_1, \dots, y_p\}$.

Étape 3 : *cas général.* □

Le théorème 13.6 affirme l'absence de saut de dualité, mais pas l'existence d'un point-selle. Celui-ci sera toutefois bien présent si Y est également compact. En effet, sous les hypothèses du théorème, $y \mapsto \min_{x\in X} \varphi(x, y)$ est s.c.s., si bien que son maximum sur le compact Y est atteint (théorème de Weierstrass) ; ce maximum est une solution duale ; l'existence d'une solution primale-duale et l'absence de saut de dualité assure alors l'existence d'un point-selle.

Par ailleurs, si X n'est pas compact, mais que Y l'est, on peut appliquer le théorème à $-\varphi$, ce qui donne

$$\max_{y\in Y} \inf_{x\in X} \varphi(x,y) = \inf_{x\in X} \max_{y\in Y} \varphi(x,y).$$

13.1.4 Stabilité des solutions primales et duales ▲ ⊖

D'après le corollaire 13.5, lorsque φ a un point-selle, l'ensemble $\mathrm{Sol}(P)$ des solutions primales vérifie

$$\varnothing \neq \mathrm{Sol}(P) \subseteq \bar{X}(\bar{y}) := \operatorname*{arg\,min}_{x\in X} \varphi(x, \bar{y}),$$

quel que soit $\bar{y} \in \mathrm{Sol}(D)$. Si le problème à droite ci-dessus a une unique solution ($\bar{X}(\bar{y})$ est un singleton), ce ne peut être que la solution primale. S'il en a plusieurs, certaines d'entre elles peuvent être des *solutions importunes* (c.-à-d., qui ne sont pas solutions primales). En voici deux exemples.

- Le premier exemple est celui illustré par le tracé de droite de la figure 3.9 : $X = Y = \mathbb{R}$ et
$$\varphi(x, y) = xy.$$
Le problème primal $\inf_x \sup_y xy = \inf_{x=0} 0 = 0$ a pour unique solution $\bar{x} = 0$ et le problème dual $\sup_y \inf_x xy = \sup_{y=0} 0 = 0$ a pour unique solution $\bar{y} = 0$, alors que le problème interne $\inf_x \varphi(x, \bar{y})$ a pour solution tout point de $\mathbb{R}$ (en particulier la solution primale).
- Le second exemple est l'optimisation linéaire (chapitre 15).

D'autres exemples peuvent être facilement construits en se plaçant dans le cadre défini dans l'exercice 13.1 et en y choisissant des ensembles X de manière appropriée.

Définition 13.7 On dit que $\bar{y} \in \mathrm{Sol}(D)$ est une *solution duale stable* si $\mathrm{Sol}(P) = \bar{X}(\bar{y})$, c'est-à-dire si toutes les solutions du problème interne primal $\inf_x \varphi(x, \bar{y})$ sont solutions du problème primal. De même, on dit que $\bar{x} \in \mathrm{Sol}(P)$ est une *solution primale stable* si $\mathrm{Sol}(D) = \overline{Y}(\bar{x})$, c'est-à-dire si toutes les solutions du problème interne dual $\sup_y \varphi(\bar{x}, y)$ sont solutions du problème dual. □

Dans la suite, nous allons considérer des fonctions φ définies sur un produit cartésien $X \times Y$ de parties d'espaces vectoriels $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$. On peut alors faire intervenir la convexité.

Définition 13.8 Soient X et Y deux parties convexes d'espaces vectoriels. On dit que $\varphi : X \times Y \to \overline{\mathbb{R}}$ est *convexe-concave* si pour tout $y \in Y$, la fonction $\varphi(\cdot, y) : x \in X \mapsto \varphi(x, y)$ est convexe et si pour tout $x \in X$, la fonction $\varphi(x, \cdot) : y \in Y \mapsto \varphi(x, y)$ est concave. □

Proposition 13.9 *Si φ est convexe-concave et admet un point-selle et s'il existe une solution duale stable, alors toute solution duale de* $\operatorname{intr} \mathrm{Sol}(D)$ *est stable.*

On trouvera dans le livre de Gol'shteĭn et Treti'akov [247 ; section 2.4] des conditions que doit vérifier φ pour écarter les solutions importunes.

13.1.5 Schéma algorithmique

La dualisation min-max conduit au schéma algorithmique (ou principe algorithmique très grossièrement décrit) suivant. Ce schéma se concentre sur la génération d'une suite $\{y_k\} \subseteq Y$ que l'on cherche à faire tendre vers une solution du problème dual (D) défini en (13.3). La suite primale générée, $\{x_k\} \subseteq X$, apparaît ici comme un sous-produit, aidant à la construction de la suite duale.

Schéma algorithmique 13.10 (de dualité) Une itération passe de l'itéré courant $y_k \in Y$ à l'itéré suivant $y_{k+1} \in Y$ par les étapes suivantes.

1. *Calcul de l'itéré primal* :
$$x_k \in \arg\min_{x\in X} \varphi(x, y_k). \tag{13.11}$$
2. *Vérification de l'optimalité* : si (x_k, y_k) est satisfaisant, on s'arrête.
3. *Nouvel itéré dual* : on calcule y_{k+1} en utilisant des informations recueillies en résolvant le problème interne dans (13.11).

Ce schéma est très peu précis. On ne dit pas en effet comment se vérifie l'optimalité, ni comment on calcule y_{k+1} à partir de y_k et des informations obtenues en résolvant le problème interne dans (13.11), mais on ne peut guère en dire davantage à ce niveau de généralité. Nous serons plus précis lorsque les problèmes d'optimisation considérés seront plus palpables, décrits en termes de critère à minimiser et de contraintes fonctionnelles à réaliser. Le schéma algorithmique dual ci-dessus servira alors de canevas permettant d'y broder des méthodes plus précises.

Pour que le schéma algorithmique dual, qui cherche à résoudre (D), ait quelqu'intérêt, il est souhaitable que les conditions suivantes soient remplies.

(D_1) En résolvant (D) on résout aussi (P). Il faut donc que les deux problèmes aient un lien entre eux, ce qui n'est pas toujours le cas. L'existence d'un point-selle de φ sera une propriété précieuse pour obtenir ce lien (voir la section 13.1.2).

(D_2) Il est beaucoup plus facile de résoudre les problèmes internes dans (13.11) que de résoudre (P). Il faut en effet résoudre un tel problème interne en X à chaque itération.

(D_3) Si Y est un espace topologique et si $\bar{y}$ est un point d'adhérence de la suite générée $\{y_k\}$, il est souhaitable que les solutions du problème interne primal $\inf_{x\in X} \varphi(x, \bar{y})$ soient solutions du problème primal, c'est-à-dire que ce problème interne n'ait pas de solutions importunes (voir le corollaire 13.5).

Comme beaucoup dépend de la fonction φ, son choix sera guidé par les trois conditions ci-dessus.

13.2 Dualité par perturbation ⊖

As a graduate student at Harvard, I got interested in convexity because I was amazed by linear programming duality and wanted to invent a nonlinear programming duality. That was around 1961. [...] *It was while I was writing up my dissertation—focused then on dual problems stated in terms of polar cones—that I came across Fenchel's conjugate convex functions.* [...] *They turned out to be a wonderful vehicle for expressing nonlinear programming duality, and I adopted them wholeheartedly. Around the time the thesis was nearly finished, I also found out about Moreau's efforts to apply convexity ideas, including duality, to problems in mechanics.*

R.T. Rockafellar sur le site Wikimization.

Dans cette section, nous décrivons une méthode permettant, dans les bons cas, d'écrire f comme le supremum d'une fonction, appelée *lagrangien*. On se ramène ainsi à la notion de dualité min-max introduite en section 13.1. Un intérêt de cette approche est de donner des conditions dans lesquelles il n'y a pas de saut de dualité, sans faire référence à la notion de point-selle comme à la section 13.1.2, mais en examinant les propriétés de la fonction valeur associée aux perturbations.

13.2.1 Perturbation du problème primal

Rappelons la forme du *problème primal*

$$(P) \qquad \inf_{x\in X} \; f(x),$$

dans lequel l'ensemble X est toujours quelconque. On note comme précédemment par $\mathrm{val}(P)$ la valeur de l'infimum dans (P). L'idée est de plonger le problème primal dans une famille de problèmes qui sont des perturbations de celui-ci. Ces perturbations sont introduites en se donnant une *fonction de perturbation*

$$\Phi : X \times P \to \overline{\mathbb{R}} : (x,p) \mapsto \Phi(x,p),$$

où P est un espace vectoriel de dimension finie. On suppose que l'on retrouve (P) lorsque la perturbation est nulle :

$$\Phi(x,0) = f(x), \quad \forall x \in X. \tag{13.12}$$

On considère alors la famille de problèmes

$$(P_p) \qquad \inf_{x\in X} \; \Phi(x,p),$$

qui sont des perturbations de (P).

La variation de l'infimum de (P_p) avec p est représentée par la *fonction valeur* $v : P \to \overline{\mathbb{R}}$, qui est définie par

$$v(p) = \inf_{x\in X} \Phi(x,p).$$

Cette fonction joue un rôle important dans toute cette section. On a clairement

$$\boxed{\mathrm{val}(P) = v(0).} \tag{13.13}$$

13.2.2 Le problème dual

Comme on a pris soin de prendre la perturbation p dans un espace vectoriel, on peut considérer la conjuguée v^* de la fonction valeur v. On sait que cette opération ne sera utile que si v est propre avec une minorante affine, c'est-à-dire

$$\mathrm{dom}\, v \neq \varnothing \quad \text{et} \quad v \text{ a une minorante affine.}$$

Dans ces conditions $v^* \in \mathrm{C\overline{onv}}(P)$ (proposition 3.37) et il y a un sens à minimiser v^* : d'une part, le caractère fermé de v^* a tendance à assurer l'existence d'une solution (par exemple si v^* est coercive) et, d'autre part, la convexité annule l'ambiguïté entre solution locale et globale. Ceci nous amène à considérer le problème

$$(D) \qquad -\inf_{p^*\in P} v^*(p^*) = \sup_{p^*\in P} -v^*(p^*). \tag{13.14}$$

Le signe « $-$ » est introduit pour se ramener au cadre de la dualité min-max (section 13.1). Ce problème est appelé *problème dual associé aux perturbations* et la fonction

$$\delta = v^* \tag{13.15}$$

est appelée *fonction duale associée aux perturbations* : le problème dual consiste donc à minimiser la fonction duale.

On peut aussi exprimer le problème dual en termes de la fonction de perturbation Φ. En effet,

$$\begin{aligned} v^*(p^*) &= \sup_{p\in P} \Big(\langle p^*, p\rangle - v(p) \Big) \\ &= \sup_{p\in P} \Big(\langle p^*, p\rangle - \inf_{x\in X} \Phi(x,p) \Big) \\ &= \sup_{p\in P} \sup_{x\in X} \Big(\langle p^*, p\rangle - \Phi(x,p) \Big) \qquad (13.16) \\ &= \Phi^*(0,p^*). \qquad (13.17) \end{aligned}$$

Dès lors

$$(D) \qquad -\inf_{p^*\in P} \Phi^*(0,p^*) = \sup_{p^*\in P} -\Phi^*(0,p^*).$$

On note $\mathrm{val}(D)$ la valeur valeur optimale du problème dual (D) et $\mathrm{Sol}(D)$ l'ensemble de ses solutions. On a clairement

$$\boxed{\mathrm{val}(D) = v^{**}(0)} \qquad \text{et} \qquad \boxed{\mathrm{Sol}(D) = \partial v^{**}(0),} \tag{13.18}$$

que l'on comparera avec (13.13). La première identité provient du fait que

$$\mathrm{val}(D) = -\inf_{p^* \in P} v^*(p^*) = \sup_{p^* \in P} -v^*(p^*) = v^{**}(0).$$

Alors la seconde identité de (13.18) provient de ce que $\bar{p}^*$ est solution du problème dual si, et seulement si, $-v^*(\bar{p}^*) = v^{**}(0)$, ce qui s'écrit aussi $0 = v^*(\bar{p}^*) + v^{**}(0)$. D'après la proposition 3.49 (avec $f = v^{**}$ et $f^* = (v^{**})^* = v^*$), cette dernière égalité est équivalente au fait que $\bar{p}^* \in \partial v^{**}(0)$.

Nous montrerons avec la proposition 13.11 que le problème primal a « quelques chances » d'être de la forme inf-sup et que le problème dual est bien de la forme sup-inf.

13.2.3 Le lagrangien associé aux perturbations

En (13.16), le supremum en p dépend essentiellement de la perturbation que l'on se donne. Si cette perturbation est simple, il sera en général possible de donner une expression explicite de la valeur du supremum en p. Cela nous conduit à introduire la notion de *lagrangien associé aux perturbations*, qui est la fonction

$$\ell_\Phi : X \times P \to \overline{\mathbb{R}},$$

définie par

$$\boxed{\ell_\Phi(x, p^*) := -\sup_{p \in P} \Big(\langle p^*, p \rangle - \Phi(x, p) \Big) = -\Phi_x^*(p^*),} \tag{13.19}$$

où on a introduit l'application associée à Φ et à $x \in X$ suivante

$$\Phi_x : p \mapsto \Phi(x, p).$$

Ce lagrangien dépend des perturbations choisies et n'est donc pas nécessairement identique au lagrangien ordinaire (4.33), introduit pour écrire les conditions d'optimalité. Nous verrons plus loin (à la section **??**) que l'on peut choisir des perturbations telles que le lagrangien (13.19) redonne, là où il prend des valeurs finies, le lagrangien ordinaire (4.33).

Par (13.15) et (13.16), la valeur de la fonction duale en p^* se récrit

$$\delta(p^*) = -\inf_{x \in X} \ell_\Phi(x, p^*). \tag{13.20}$$

Cette formule est donc identique à celle définissant la fonction duale par (13.4) en dualité min-max, lorsqu'on prend le lagrangien $(x, p^*) \in X \times P \mapsto \ell_\Phi(x, p^*)$ comme fonction de couplage $(x, y) \in X \times Y \mapsto \varphi(x, y)$.

Remarquons bien que, dans le couple (x, p^*) dont dépend ℓ_Φ, x est une variable primale, appartenant à l'espace sur lequel est défini le problème (P), et p^* est une variable duale, variant dans l'espace dual de l'espace des perturbations.

Proposition 13.11 (dualité faible) *On a*

$$\begin{aligned} \mathrm{val}(D) &= \sup_{p^*\in P}\inf_{x\in X} \ell_\Phi(x,p^*) \\ &\leqslant \inf_{x\in X}\sup_{p^*\in P} \ell_\Phi(x,p^*) \qquad (13.21) \\ &\leqslant \mathrm{val}(P). \end{aligned}$$

Démonstration. L'égalité $(13.21)_a$ vient de la définition de (D) et de ce que

$$-v^*(p^*) = -\sup_{x\in X}(-\ell_\Phi(x,p^*)) = \inf_{x\in X}\ell_\Phi(x,p^*).$$

L'inégalité $(13.21)_b$ découle de la proposition 13.2. Enfin l'inégalité $(13.21)_c$ est obtenue comme suit

$$\sup_{p^*\in P}\ell_\Phi(x,p^*) = \sup_{p^*\in P}\inf_{p\in P}(\Phi(x,p)-\langle p^*,p\rangle) \leqslant \sup_{p^*\in P}\Phi(x,0) = f(x).$$

□

Définition 13.12 On appelle *saut de dualité*, la quantité positive $\mathrm{val}(P)-\mathrm{val}(D)$. On dit qu'*il n'y a pas de saut de dualité* si le saut de dualité est nul, c'est-à-dire si

$$\mathrm{val}(D) = \mathrm{val}(P).$$

□

Grâce à (13.13) et (13.18), l'inégalité $\mathrm{val}(D)\leqslant\mathrm{val}(P)$ s'écrit $v^{**}(0)\leqslant v(0)$, qui n'est autre que l'inégalité bien connue entre une fonction et sa biconjuguée (corollaire 3.41). On a donc, par cette théorie de la dualité par perturbation, transformé la question importante de l'absence de saut de dualité par celle de savoir si la fonction valeur et sa biconjuguée (qui la convexifie) coïncide en 0. C'est donc l'analyse de la fonction valeur v qui peut apporter ici une réponse à cette question.

La proposition 13.13 ci-dessous examine les propriétés du lagrangien ℓ_Φ associé aux perturbations. Le point 2 donne des conditions pour que f s'écrive comme un supremum, à savoir que $\Phi_x^{**}(0)=\Phi_x(0)$ pour tout $x\in X$, auquel cas la dualité par pertubation se ramène à la dualité min-max de la section 13.1.

Proposition 13.13 (propriétés du lagrangien associé aux perturbations)
1) *Pour tout $x\in X$, l'application $p^*\in P\to -\ell_\Phi(x,p^*)$ est convexe et fermée.*
2) *Si, pour $x\in X$, $\Phi_x^{**}(0)=\Phi_x(0)$, alors*

$$f(x) = \sup_{p^*\in P}\ell_\Phi(x,p^*). \qquad (13.22)$$

En particulier, l'identité (13.22) *a lieu si* $\Phi_x \in \mathrm{C\overline{onv}}(P)$ *ou si* $\Phi_x \in \mathrm{Conv}(P)$ *et* $\partial\Phi_x(0) \neq \varnothing$.

DÉMONSTRATION. 1) Il s'agit en effet de l'enveloppe supérieure de fonctions affines (proposition 3.33).

2) Par (13.12) et (13.19), on a

$$\Phi_x(0) = f(x),$$
$$\Phi_x^{**}(0) = \sup_{p^* \in P} (-\Phi_x^*(p^*)) = \sup_{p^* \in P} \ell_\Phi(x, p^*).$$

On en déduit l'expression de $f(x)$ si $\Phi_x^{**}(0) = \Phi_x(0)$, ce qui est le cas si $\Phi_x \in \mathrm{C\overline{onv}}(P)$ (point 3 de la proposition 3.40) ou si $\Phi_x \in \mathrm{Conv}(P)$ et $\partial\Phi_x(0) \neq \varnothing$ (point 2 du corollaire 3.54). □

Les propriétés démontrées au chapitre 3 conduisent aux résultats de la proposition 13.14 ci-dessous qui apportent une réponse à la question de l'absence de saut de dualité et à l'existence de solution primale ou duale à partir des propriétés de la fonction valeur v en 0 (point 1) ou sur P tout entier (point 2). La proposition fait l'hypothèse de convexité de v, mais n'est pas pour autant limitée aux problèmes convexes car des problèmes non convexes peuvent très bien avoir une fonction valeur convexe. Remarquons que, dans le point 1 de la proposition, les conditions données sur v en 0 sont de plus en plus restrictives puisque $0 \in (\mathrm{dom}\, v)^\circ \implies 0 \in (\mathrm{dom}\, v)^{\ominus}$ [clair] $\implies \partial v(0) \neq \varnothing$ [proposition 3.56] $\implies v$ est s.c.i. en 0 [clair par le point (ii) de la proposition 3.49] ; il est donc normal que les conséquences de ces hypothèses soient de plus en plus riches.

Proposition 13.14 (existence de solution duale et saut de dualité)

1) *Si la fonction valeur* $v \in \mathrm{Conv}(P)$ *et* $0 \in \mathrm{dom}\, v$, *on a*
   - *a)* v *est s.c.i. en* $0 \iff \mathrm{val}(P) = \mathrm{val}(D)$,
   - *b)* $\partial v(0) \neq \varnothing \iff \mathrm{val}(P) = \mathrm{val}(D)$ *et* $\mathrm{Sol}(D) \neq \varnothing \implies \mathrm{Sol}(D) = \partial v(0)$,
   - *c)* $0 \in (\mathrm{dom}\, v)^{\ominus} \implies \mathrm{val}(P) = \mathrm{val}(D)$ *et* $\mathrm{Sol}(D) = \partial v(0) \neq \varnothing$,
   - *d)* $0 \in (\mathrm{dom}\, v)^\circ \implies \mathrm{val}(P) = \mathrm{val}(D)$, $\mathrm{Sol}(D) = \partial v(0)$ *est un compact non vide et* v *est lipschitzienne dans un voisinage de* 0.

2) *Si* $v \in \mathrm{C\overline{onv}}(P)$, *alors* $\mathrm{val}(P) = \mathrm{val}(D) \in \overline{\mathbb{R}}$.

DÉMONSTRATION. 1.*a*) C'est une récriture de la seconde partie du corollaire 3.41.

1.*b*) Si $\partial v(0) \neq \varnothing$, alors $v(0) = v^{**}(0)$ (corollaire 3.54, point 2) et $\partial v(0) = \partial v^{**}(0)$ (corollaire 3.54, point 3). L'égalité $v(0) = v^{**}(0)$ montre qu'il n'y a pas de saut de dualité et le fait que $\partial v(0) \neq \varnothing$ implique alors que $\mathrm{Sol}(D) \equiv \partial v^{**}(0)$ est non vide.

Réciproquement, $v(0) = v^{**}(0)$ (pas de saut de dualité) implique que $\partial v(0) = \partial v^{**}(0)$ (corollaire 3.54, point 3). Comme $\mathrm{Sol}(D) \equiv \partial v^{**}(0)$ est non vide, il en est de même de $\partial v(0)$.

1.*c*) Si $0 \in (\mathrm{dom}\, v)^{\ominus}$, v est sous-différentiable en 0 (proposition 3.56). On applique alors le point 1.*b*.

1.*d*) Si $0 \in (\operatorname{dom} v)^\circ$, alors v est lipschitzienne dans un voisinage de 0 (proposition 3.13) et $\partial v(0)$ est non vide et compact (proposition 3.58).

2) Si $v \in \mathrm{C}\overline{\mathrm{onv}}(P)$, $v^{**} = v$ (point 3 de la proposition 3.40), donc $v(0) = v^{**}(0)$, c'est-à-dire qu'il n'y a pas de saut de dualité (mais les valeurs optimales peuvent être infinies). □

13.2.4 Perturbation du problème dual

Le procédé de dualisation par perturbation du problème primal introduit aux sections 13.2.1 et 13.2.2 peut être inversé : on peut plonger le problème dual dans une famille de problèmes perturbés dont le dual associé redonne le problème primal.

Le problème dual consiste à minimiser la fonction $p^* \mapsto v^*(p^*) = \Phi^*(0, p^*)$. Ce fait suggère de prendre comme fonction de perturbation de (D), la fonction $(x^*, p^*) \mapsto \Phi^*(x^*, p^*)$ et de considérer les problèmes duaux perturbés suivants

$$(D_{x^*}) \qquad \inf_{p^* \in P} \Phi^*(x^*, p^*).$$

La *fonction valeur* associée à ces perturbations est la fonction $w : X \to \overline{\mathbb{R}}$, qui est définie par

$$w(x^*) = \inf_{p^* \in P} \Phi^*(x^*, p^*).$$

Contrairement à v dont la convexité n'est pas assurée, w est toujours convexe, comme fonction marginale de la fonction convexe Φ^*. On note que

$$\boxed{\operatorname{val}(D) = -w(0).} \tag{13.23}$$

La conjuguée de w s'écrit

$$w^*(x) = \Phi^{**}(x, 0) \tag{13.24}$$

et le dual du dual est le problème suivant

$$(DD) \qquad \inf_{x \in X} w^*(x) = \inf_{x \in X} \Phi^{**}(x, 0).$$

Proposition 13.15 (retour au primal) *Si X est un espace vectoriel et si $\Phi \in \mathrm{C}\overline{\mathrm{onv}}(X, P)$, alors $f = w^*$ et le problème (DD) n'est autre que le problème primal (P).*

Démonstration. Clair à partir de l'expression (13.24) de w^* et du point 3 de la proposition 3.40 qui assure que $\Phi^{**} = \Phi$ grâce au fait que $\Phi \in \mathrm{C}\overline{\mathrm{onv}}(X, P)$. □

13.3 Dualité de Fenchel ⊖

La dualité de Fenchel regroupe un ensemble de résultats issus de la dualisation d'un problème d'optimisation à la structure particulière, le problème (P_F) ci-dessous. Celui-ci se rencontre fréquemment en optimisation convexe. Nous avons choisi de construire le dual par la technique de perturbation (section 13.2), mais nous aurions pu le faire au moyen de la dualité min-max lagrangienne (section 13.1). Nous allons un peu plus loin que la construction du dual, cependant, on donnant des conditions suffisantes assurant l'absence de saut de dualité et l'existence de solutions primale et duale.

Le cadre est le suivant. On se donne deux espaces euclidiens $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ (produits scalaires tous deux notés $\langle\cdot,\cdot\rangle$), une fonction $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$, une application linéaire $A : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ (on note A^* son adjointe) et une fonction $g : \mathbb{F} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$. On considère le problème, dit *primal*,

$$(P_F) \quad \inf_{x\in\mathbb{E}} \Big(f(x) + g(Ax) \Big). \tag{13.25}$$

Introduisons un problème dual par perturbation de Ax. On considère le *fonction valeur*

$$v_F : \mathbb{F} \to \overline{\mathbb{R}} : p \mapsto v_F(p) := \inf_{x\in\mathbb{E}} \Big(f(x) + g(Ax + p) \Big). \tag{13.26}$$

Sa conjuguée s'écrit

$$\begin{aligned} v_F^*(\lambda) &= \sup_{x\in\mathbb{E}} \sup_{p\in\mathbb{F}} \Big(\langle\lambda, p\rangle - f(x) - g(Ax + p) \Big) \\ &= \sup_{x\in\mathbb{E}} \Big(-\langle\lambda, Ax\rangle - f(x) + g^*(\lambda) \Big) \\ &= f^*(-A^*\lambda) + g^*(\lambda). \end{aligned}$$

Le problème dual consiste à maximiser $-v_F^*(-\lambda)$ (on fait un changement de variable $\lambda \curvearrowright -\lambda$) :

$$(D_F) \quad \sup_{\lambda\in\mathbb{F}} \Big(-f^*(A^*\lambda) - g^*(-\lambda) \Big). \tag{13.27}$$

Un résultat de dualité faible découle directement de la proposition 13.11.

Proposition 13.16 (dualité de Fenchel faible) *On a* $\mathrm{val}(D_F) \leqslant \mathrm{val}(P_F)$.

Pour obtenir un résultat de dualité forte, assurant en particulier l'absence de saut de dualité, $\mathrm{val}(P_L) = \mathrm{val}(D_F)$, nous allons analyser la régularité de la fonction valeur v_F et utiliser les résultats du chapitre 3. Calculons d'abord le domaine de v_F. Clairement, $p \in \operatorname{dom} v_F$ si, et seulement si, il existe un $x \in \operatorname{dom} f$ tel que $Ax + p \in \operatorname{dom} g$ ou encore $p \in \operatorname{dom} g - A(\operatorname{dom} f)$. Nous avons donc montré que

$$\operatorname{dom} v_F = \operatorname{dom} g - A(\operatorname{dom} f).$$

On comprend donc pourquoi l'ensemble à droite intervient dans le résultat suivant.

Théorème 13.17 (dualité de Fenchel forte) *On suppose que* $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$, *que* $g \in \mathrm{Conv}(\mathbb{F})$, *que* $\mathrm{val}(P_F) \in \mathbb{R}$ *et que*

$$0 \in \Big(\mathrm{dom}\, g - A(\mathrm{dom}\, f)\Big)^\circ. \tag{13.28}$$

Alors $\mathrm{val}(P_F) = \mathrm{val}(D_F)$ *et* $\mathrm{Sol}(D_F)$ *est non vide et compact.*

Démonstration. En tant que fonction marginale définie par (13.26), avec $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$ et $g \in \mathrm{Conv}(\mathbb{F})$, v_F est une fonction convexe. Elle est aussi propre car $v_F(0) \in \mathbb{R}$ et, par (13.28), $0 \in (\mathrm{dom}\, v_F)^\circ$ (donc v_F ne peut pas prendre la valeur $-\infty$). Le résultat se déduit alors de la proposition 13.14, point 1.*d*. □

Ce résultat a de multiples applications. Nous en donnons deux à titre d'illustration. Le corollaire 13.18 étend des résultats des propositions 3.65 et 3.66 au cas de fonctions pouvant prendre la valeur $+\infty$. Le corollaire 13.19 étudie la dualité de Fenchel pour des problèmes avec contraintes linéaires d'égalité.

Corollaire 13.18 *Dans le cadre défini ci-dessus, avec* f *et* g *convexes, on a*

$$\partial(f + g \circ A)(x) \supseteq \partial f(x) + A^* \partial g(Ax),$$

avec égalité si la condition de stabilité (13.28) *a lieu.*

Démonstration. [$\supseteq$] Soit $x \in \mathrm{dom}\, f$ tel que $\partial f(x) \neq \varnothing$ et $\partial g(Ax) \neq \varnothing$ (sinon, l'inclusion est triviale). Si $x^* \in \partial f(x)$ et $y^* \in \partial g(Ax)$, alors $x \in \mathrm{dom}\, f$, $Ax \in \mathrm{dom}\, g$ et quel que soit $d \in \mathbb{E}$, on a

$$f'(x;d) \geqslant \langle x^*, d\rangle \quad \text{et} \quad g'(Ax;d) \geqslant \langle y^*, d\rangle.$$

Alors

$$\Big(f + g \circ A\Big)'(x;d) = f'(x;d) + g'(Ax;Ad) \geqslant \langle x^* + A^* y^*, d\rangle.$$

Donc $x^* + A^* y^* \in \partial(f + g \circ A)(x)$ et l'inclusion a lieu.

[$\subseteq$] Soient à présent $\bar{x} \in \mathrm{dom}(f + g \circ A)$ et $\bar{s} \in \partial(f + g \circ A)(\bar{x})$, ce qui s'écrit aussi $0 \in \partial(f + g \circ A)(\bar{x}) - \bar{s}$. Alors $\bar{x}$ est solution du problème

$$\inf_{x \in \mathbb{E}} \Big(\tilde{f}(x) + g(Ax)\Big),$$

où $\tilde{f}(x) := f(x) - \langle \bar{s}, x\rangle$. Comme $\tilde{f}^*(x^*) = f^*(x^* + \bar{s})$, le dual de ce problème s'écrit

$$\sup_{\lambda \in \mathbb{F}} \Big(-f^*(A^*\lambda + \bar{s}) - g^*(-\lambda)\Big).$$

Si la condition de stabilité (13.28) a lieu ($\mathrm{dom}\, \tilde{f} = \mathrm{dom}\, f$), les valeurs optimales des problèmes ci-dessus sont égales (d'après le théorème). Comme elles sont finies, le problème dual a une solution, disons $\bar{\lambda}$ et on a

$$f(\bar{x}) + f^*(A^*\bar{\lambda} + \bar{s}) + g(A\bar{x}) + g^*(-\bar{\lambda}) = \langle \bar{s}, \bar{x} \rangle.$$

En utilisant le fait que $f(\bar{x}) + f^*(A^*\bar{\lambda} + \bar{s}) \geqslant \langle A^*\bar{\lambda} + \bar{s}, \bar{x} \rangle$ et $g(A\bar{x}) + g^*(-\bar{\lambda}) \geqslant -\langle A^*\bar{\lambda}, \bar{x} \rangle$, on obtient

$$\langle \bar{s}, \bar{x} \rangle \leqslant f(\bar{x}) + f^*(A^*\bar{\lambda} + \bar{s}) + g(A\bar{x}) + g^*(-\bar{\lambda}).$$

On a donc des égalités dans les trois inégalités précédentes. Celles-ci impliquent que $A^*\bar{\lambda} + \bar{s} \in \partial f(\bar{x})$ et $-\bar{\lambda} \in \partial g(A\bar{x})$. Donc $\bar{s} \in \partial f(\bar{x}) + A^*\partial g(A\bar{x})$, ce qui conclut la démonstration. □

Corollaire 13.19 *On suppose donnés $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$, une application linéaire $A : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ et un élément $b \in \mathbb{F}$. Alors*

$$\sup_{y \in \mathbb{F}} \Big(\langle b, y \rangle - f^*(A^*y) \Big) \quad \leqslant \quad \inf_{\substack{x \in \mathbb{E} \\ Ax = b}} f(x)$$

Si f et g sont convexes et si $b \in (A(\operatorname{dom} f))^\circ$, alors on a égalité ci-dessus et, lorsqu'il est fini, le supremum à gauche est atteint.

Démonstration. On considère le problème (13.25) avec $g = \mathcal{I}_{\{b\}}$, la fonction indicatrice du singleton $\{b\}$. On a $g^*(y^*) = \langle b, y^* \rangle$ et le dual de (13.25) s'écrit comme à gauche dans l'inégalité ci-dessus. Enfin la condition de stabilité (13.28) s'écrit $0 \in (b - A(\operatorname{dom} f))^\circ$, c'est-à-dire $b \in (A(\operatorname{dom} f))^\circ$. □

13.4 Dualité non convexe de Toland ⊖

Voir le syllabus complet.

13.5 Dualisation lagrangienne

13.5.1 Dualisation de contraintes d'égalité et d'inégalité

Dans cette section, on considère le problème d'optimisation sous contraintes fonctionnelles suivant

$$(P) \equiv (P_{X,EI}) \qquad \begin{cases} \min f(x) \\ x \in X \\ c_i(x) = 0, \quad \forall i \in E \\ c_i(x) \leqslant 0, \quad \forall i \in I, \end{cases} \tag{13.29}$$

où X est toujours un ensemble quelconque et E et I sont des ensembles finis d'indices, contenant respectivement $m_E = |E|$ et $m_I = |I|$ éléments, formant une partition de

$[1:m]$. Donc $m = m_E + m_I$ et on note $c_E = \{c_i\}_{i\in E}$ et $c_I = \{c_i\}_{i\in I}$. La fonction f et les fonctions c_i, $i \in E \cup I$, sont définies sur X à valeurs dans $\mathbb{R}$.

Nous introduisons deux problèmes duaux de (13.29) en utilisant deux types de problèmes perturbés. Le lagrangien correspondant aux premières perturbations est très voisin du lagrangien ordinaire (4.33), servant à écrire les conditions d'optimalité. Cette approche est bien adaptée aux problèmes convexes. À l'inverse, lorsque le problème (13.29) n'est pas convexe, c'est le second type de perturbations qui est le plus approprié. Celles-ci conduisent au lagrangien augmenté.

Les problèmes duaux introduits ci-dessous sont obtenus en perturbant les contraintes fonctionnelles de (13.29), sans toucher à la « contrainte » $x \in X$ considérée comme « contrainte dure ». On dit que l'on *dualise* les contraintes fonctionnelles, celles définies au moyen des fonctions c_E et c_I. Comme X est un ensemble quelconque, la démarche suivie englobe le cas où on ne dualiserait qu'une partie des contraintes fonctionnelles. En effet, X peut être un ensemble défini par d'autres contraintes d'égalité ou d'inégalité et peut donc prendre en compte les contraintes non dualisées. Cette remarque soulève la question du choix des contraintes à dualiser dans un cas concret. Sur ce sujet, ce sont les conditions (D_1)-(D_3) de la page 444 qui servent de gouverne. Comme les contraintes non dualisées (celles prisent en compte par X) se retrouvent dans les problèmes internes primaux (13.11), on cherchera à dualiser les contraintes difficilement traitées par un algorithme de minimisation.

Pour $p = (p_E, p_I) \in \mathbb{R}^m$, on introduit le problème perturbé de $(P_{X,EI})$ suivant et la *fonction valeur* v_0 associée :

$$v_0 : p \in \mathbb{R}^m \mapsto v_0(p) := \inf_{\substack{x\in X \\ c_E(x)+p_E=0 \\ c_I(x)+p_I\leqslant 0}} f(x) \in \overline{\mathbb{R}}. \tag{13.30}$$

La fonction de perturbation Φ_0 est donc définie sur $X \times \mathbb{R}^m$ par

$$\Phi_0(x,p) = \begin{cases} f(x) & \text{si } \ c_E(x) + p_E = 0 \ \text{ et } \ c_I(x) + p_I \leqslant 0 \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases} \tag{13.31}$$

Le lagrangien associé à ces perturbations se calcule au moyen de la formule (13.19). Avec $\lambda = (\lambda_E, \lambda_I) \in \mathbb{R}^m$, on trouve

$$\begin{aligned} \ell_0(x,\lambda) &= -\sup_{p=(p_E,p_I)} \Big(\langle \lambda, p\rangle - \Phi_0(x,p) \Big) \\ &= -\sup_{\substack{p=(p_E,p_I) \\ p_E=-c_E(x) \\ p_I\leqslant -c_I(x)}} \Big(\langle \lambda, p\rangle - f(x) \Big). \end{aligned}$$

Finalement, on obtient comme *lagrangien associé à la fonction de perturbation* (13.31) :

$$\boxed{\ell_0(x,\lambda) = \begin{cases} f(x) + \displaystyle\sum_{i\in E\cup I} \lambda_i c_i(x) & \text{si } \ \lambda_I \geqslant 0 \\ -\infty & \text{sinon.} \end{cases}} \tag{13.32}$$

Pour λ tel que $\lambda_I \geqslant 0$, on retrouve le *lagrangien ordinaire* (4.33), servant à exprimer les conditions d'optimalité. Celui-ci correspond donc aux perturbations (13.30) du problème (13.29).

Le problème dual s'écrit

$$(D_0) \qquad \sup_{\substack{\lambda=(\lambda_E,\lambda_I)\\ \lambda_I\geqslant 0}} \ \inf_{x\in X} \ \ell_0(x,\lambda) \tag{13.33}$$

On notera que les seules contraintes qui portent sur les variables duales sont des contraintes de positivité sur λ_I. Ces contraintes sont simples, surtout si on les compare aux contraintes (éventuellement non linéaires) d'égalité et d'inégalité du problème original (13.29).

Le problème primal (13.29) s'écrit aussi

$$\inf_{x\in X} \ \sup_{\substack{\lambda=(\lambda_E,\lambda_I)\\ \lambda_I\geqslant 0}} \ \ell_0(x,\lambda),$$

ce qui montre que l'on a égalité en $(13.21)_c$. On remarque en effet que cette quantité s'écrit

$$\begin{aligned} &\inf_{x\in X} \ \sup_{\substack{\lambda\\ \lambda_I\geqslant 0}} \left(f(x) + \sum_{i\in E\cup I} \lambda_i c_i(x) \right) \\ &\quad = \ \inf_{x\in X} \begin{cases} f(x) & \text{si } \ c_E(x)=0 \ \text{ et } \ c_I(x)\leqslant 0 \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases} \\ &\quad = \ \mathrm{val}(P_{X,EI}). \end{aligned}$$

La proposition suivante analyse le lien entre les points-selles du lagrangien ordinaire (13.32) et les solutions de (13.29). Schématiquement, les points-selles du lagrangien ordinaire sont des solutions de (13.29) et la réciproque est vraie si le problème est convexe. Le point 2 de ce résultat apporte des précisions sur ce qui est affirmé à la proposition 12.14 : sous des hypothèses de convexité, non seulement $\bar{x}$ minimise le lagrangien $\ell_0(\cdot,\bar{\lambda})$, mais $(\bar{x},\bar{\lambda})$ est un point-selle de ℓ_0.

Proposition 13.20 (point-selle de ℓ_0 et KKT) *On suppose que $X=\mathbb{R}^n$.*

1) *Si $(\bar{x},\bar{\lambda})$ est point-selle du lagrangien ordinaire (13.32) sur $\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^m$, alors $\bar{x}$ est solution (globale) de (13.29). Si, de plus, les fonctions f et c sont différentiables, alors les conditions d'optimalité (4.32) soient vérifiées avec $(x_*,\lambda_*)\equiv(\bar{x},\bar{\lambda})$.*
2) *Réciproquement, supposons que f et les $\{c_i\}_{i\in I}$ soient convexes, que c_E soit affine et que les fonctions f et c soient différentiables en une solution $\bar{x}$ du problème. Supposons également qu'il existe un multiplicateur $\bar{\lambda}$ tel que les conditions d'optimalité de Karush, Kuhn et Tucker (4.32) aient lieu avec $(x_*,\lambda_*)\equiv(\bar{x},\bar{\lambda})$. Alors, $(\bar{x},\bar{\lambda})$ est un point-selle du lagrangien ordinaire (13.32) sur $\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^m$.*

Démonstration. 1) Si $(\bar{x},\bar{\lambda})$ est point-selle du lagrangien (13.32) sur $\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^m$, alors $\bar{x}$ est solution du problème primal (théorème 13.3), qui n'est autre que (13.29). On peut aussi invoquer la proposition 4.51.

Si, de plus, f et c sont différentiables, le fait que $\bar{x}$ minimise $\ell_0(\cdot,\bar{\lambda})$ sur $\mathbb{R}^n$ implique que $\nabla_x \ell_0(\bar{x},\bar{\lambda}) = 0$. Par ailleurs, le fait que $\bar{\lambda}$ maximise $\ell(\bar{x},\cdot)$ sur $\mathbb{R}^m$ implique l'admissibilité de $\bar{x}$, ainsi que la complémentarité (implication $(i) \Rightarrow (ii)$ de la proposition 4.50).

2) La minimalité de $\ell_0(\cdot,\bar{\lambda})$ en $\bar{x}$ a été démontrée par la proposition 12.14 et la maximalité de $\ell_0(\bar{x},\cdot)$ en $\bar{\lambda}$ résulte de l'implication $(ii) \Rightarrow (i)$ de la proposition 4.50. □

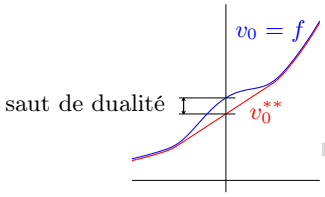
D'après le théorème 13.3 et la proposition 13.20, on voit que, pour une grande classe de problèmes *convexes*, il n'y a pas de saut de dualité et que l'on peut trouver $\bar{\lambda}$ en résolvant le problème dual (13.33). Sans convexité, il peut y avoir ou ne pas y avoir de saut de dualité comme le montre l'exemple 1 ci-dessous.

Exemples 13.21 (saut de dualité et existence de solution primale-duale) Il est un cas où la fonction valeur (13.30) associée au problème perturbé se calcule facilement. C'est celui où le critère $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ est une fonction *croissante*, où $X = \mathbb{R}$ et où les contratintes se résument à l'appartenance à $\mathbb{R}_+$:

$$\begin{cases} \inf\ f(x) \\ x \geqslant 0, \end{cases}$$

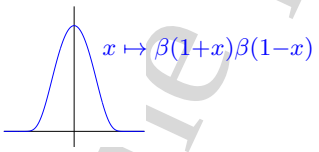
Par la croissance de f, la valeur optimale de ce problème est $f(0)$ et sa fonction valeur s'écrit $p \in \mathbb{R} \mapsto v_0(p) := \inf(f(x) : x \geqslant p\} = f(p)$. La biconjuguée de v_0 est donc l'enveloppe convexe fermée de f, si bien que la saut de dualité $v_0(0) - v_0^{**}(0)$ s'écrit aussi $f(0) - f^{**}(0)$, ce qui peut se voir aisément par l'examen de f. Voici quelques cas de fonctions croissantes f.

1) *Problème non convexe avec ou sans saut de dualité.* Prenons pour f la perturbation suivante de l'exponentielle



$$x \mapsto f(x) = e^x + \alpha\beta(1+x)\beta(1-x), \qquad (13.34)$$

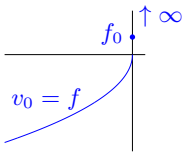
où $\alpha > 0$ est pris assez petit, tandis que la perturbation a pour support le compact $[-1,1]$ et est construite au moyen de la fonction $\beta : \mathbb{R} \to \mathbb{R}_+$, de classe C^∞, définie par



$$\beta(t) = \begin{cases} e^{-1/t^2} & \text{si } t > 0 \\ 0 & \text{si } t \leqslant 0. \end{cases}$$

Dans ce cas, le saut de dualité $v_0(0) - v_0^{**}(0)$ est non nul (voir la figure ci-dessus, à côté de la formule de f). Si au lieu de f on prenait la fonction $f_t : x \mapsto f_t(x) := f(x+t)$, avec f donnée par (13.34) et $t \notin [-1,1]$, il n'y aurait pas de saut de dualité, bien que v_0 ne soit pas convexe.

2) *Problème convexe avec ou sans saut de dualité et sans solution duale.* Supposons que f soit définie par



$$f(x) = \begin{cases} -\sqrt{-x} & \text{si } x < 0 \\ f_0 & \text{si } x = 0 \\ +\infty & \text{si } x > 0. \end{cases}$$

Si $f_0 \geqslant 0$, la fonction est convexe. Dans ce cas, la biconjuguée de $v_0 = f$ est la fonction définie par

$$v_0^{**}(x) = f^{**}(x) = \begin{cases} -\sqrt{-x} & \text{si } x \leqslant 0 \\ +\infty & \text{si } x > 0. \end{cases}$$

En accord avec le point 1.a de la proposition 13.14, on voit que le saut de dualité $f_0 - 0$ est nul si, et seulement si, $f_0 = 0$, c'est-à-dire si, et seulement si, $v_0 = f$ est s.c.i. en 0. Par ailleurs, comme v_0^{**} n'est pas sous-différentiable en 0 [par la proposition 3.56 et $(v_0^{**})'(0;-1) = -\infty$], le problème dual n'a pas de solution ; voir (13.18). □

La proposition 13.22 ci-dessous est intéressante pour ses interprétations, qui sont multiples. Donnons-en deux, qui ne sont pas sans rapport.

- Le calcul de la fonction valeur v_0 en une perturbation p donnée requiert la résolution du problème $(P_{X,EI})$ perturbé par p comme dans (13.30), qui est potentiellement difficile à résoudre. La proposition nous apprend que l'on peut évaluer cette fonction en une perturbation p non connue à l'avance en minimisant le lagrangien ordinaire $\ell_0(\cdot, \bar{\lambda})$, problème normalement plus simple : si $\bar{x}$ est un minimiseur de ce lagrangien, alors $v_0(-c(\bar{x})) = f(\bar{x})$. On comprend par la figure 13.2, qui

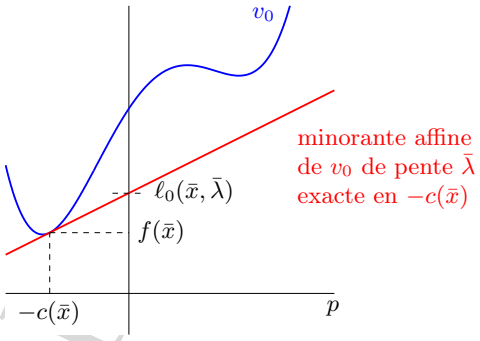


Fig. 13.2. Illustration de la proposition 13.22

illustre la proposition, que toutes les perturbations ne sont pas nécessairement atteignables par cette méthode, en particulier si v_0 n'est pas convexe ou si v_0 est convexe mais n'est pas sous-différentiable. Ainsi, un point $\bar{x}$ satisfaisant les contraintes ne pourra pas nécessairement être obtenu par cette méthode.

- Le résultat exprime aussi, à sa manière, le *théorème d'Everett* (exercice 13.8) : si $\bar{x}$ minimise le lagrangien $\ell_0(\cdot, \bar{\lambda})$ avec $\bar{\lambda}_I \geqslant 0$, alors $\bar{x}$ minimise f sur $X_p :=$

$\{x \in X : c_E(x) + p_E = 0,\ c_I(x) + p_I \leqslant 0\}$. En effet, puisque $v_0(-c(\bar{x})) = f(\bar{x})$, il s'en ensuit que $f(x) \geqslant f(\bar{x})$ pour tout $x \in X_p$; de plus, comme $\bar{x} \in X_p$, $\bar{x}$ est bien solution du problème perturbé comme dans (13.30) par $p = -c(\bar{x})$.

Proposition 13.22 (minorante affine de v_0) *Soient $\bar{\lambda} \in \mathbb{R}^m$ tel que $\bar{\lambda}_I \geqslant 0$ et ℓ_0 le lagrangien ordinaire, défini par (13.32). Alors $\bar{x} \in \arg\min\{\ell_0(x, \bar{\lambda}) : x \in X\}$ si, et seulement si, la fonction affine*

$$p \in \mathbb{R}^m \mapsto \ell_0(\bar{x}, \bar{\lambda}) + \bar{\lambda}^\mathsf{T} p \tag{13.35}$$

est une minorante de la fonction valeur v_0 définie en (13.30). Dans ce cas, cette minorante affine est exacte en $p = -c(\bar{x})$ et on a $v_0(-c(\bar{x})) = f(\bar{x})$.

Démonstration. [Préliminaire] Pour $p \in \mathbb{R}^m$, on note $X_p := \{x \in X : c_E(x) + p_E = 0,\ c_I(x) + p_I \leqslant 0\}$ l'ensemble admissible du problème perturbé dans (13.30). On observe que $\operatorname{dom} v_0 = \{p \in \mathbb{R}^m : X_p \neq \varnothing\}$.

[⇒] Pour tout $\varepsilon > 0$ et $p \in \operatorname{dom} v_0$, on peut trouver un $x \in X_p$ tel que $f(x) \leqslant v_0(p) + \varepsilon$. Par la propriété de $\bar{x}$ et $\bar{\lambda}_I \geqslant 0$, on a

$$\ell_0(\bar{x}, \bar{\lambda}) + \bar{\lambda}^\mathsf{T} p \leqslant f(x) + \bar{\lambda}^\mathsf{T}(c(x) + p) \leqslant v_0(p) + \varepsilon.$$

Comme $\varepsilon > 0$ et $p \in \operatorname{dom} v_0$ sont arbitraires, on en déduit que la fonction affine (13.35) est une minorante de v_0 sur $\operatorname{dom} v_0$, donc aussi sur $\mathbb{R}^m$.

[⇐] Quel que soit le couple $(x, p) \in X_p \times \mathbb{R}^m$, on a par hypothèse :

$$\ell_0(\bar{x}, \bar{\lambda}) + \bar{\lambda}^\mathsf{T} p \leqslant v_0(p) \leqslant f(x). \tag{13.36}$$

Quel que soit $x \in X$, $(x, p) \in X_p \times \mathbb{R}^m$ en prenant $p = -c(x)$, si bien que l'inégalité entre les membres extrêmes de (13.36) conduit à $\ell_0(\bar{x}, \bar{\lambda}) \leqslant \ell_0(x, \bar{\lambda})$ et montre que $\bar{x} \in \arg\min\{\ell_0(x, \bar{\lambda}) : x \in X\}$.

[Conclusion] Si $p = -c(\bar{x})$, $(\bar{x}, p) \in X_p \times \mathbb{R}^m$ et (13.36) devient $f(\bar{x}) \leqslant v_0(-c(\bar{x})) \leqslant f(\bar{x})$, ce qui montre d'une part l'exactitude de la minorante affine (13.35) en $p = -c(\bar{x})$ et $v_0(-c(\bar{x})) = f(\bar{x})$. □

Voici une propriété reliant la fonction valeur v_0 définie en (13.30) et le problème dual (D_0) défini en (13.33) ; elle donne des conditions pour que le problème dual soit non borné, qui sont que $\operatorname{val}(D_0) \neq +\infty$ et $0 \notin \operatorname{adh}(\operatorname{dom} v_0)$. Dans ce cas, bien sûr, l'infimum de la fonction duale vaut $-\infty$. La démonstration montre que la fonction duale tend en réalité vers $-\infty$ le long du vecteur directeur de l'hyperplan séparant 0 et l'adhérence de $\operatorname{dom} v_0$.

Proposition 13.23 (dual lagrangien non borné) *Lorsque $\operatorname{val}(D_0) \neq -\infty$, on a*

$$0 \notin \overline{\operatorname{dom} v_0} \qquad \Longrightarrow \qquad \operatorname{val}(D_0) = +\infty.$$

DÉMONSTRATION. Soit $\mathscr{D} := \operatorname{dom} v_0$. Si $0 \notin \overline{\mathscr{D}}$, on peut séparer strictement $\{0\}$ et $\overline{\mathscr{D}}$: il existe $\mu \in \mathbb{R}^m$ tel que

$$\sup_{p \in \mathscr{D}} \mu^\mathsf{T} p < 0.$$

On déduit deux informations de cette inégalité.

- D'abord $\mu_I \geqslant 0$. En effet, en prenant $x \in X$, $i \in I$ et $t \geqslant 0$, on voit que $p := -c(x) - te^i$ est dans $\mathscr{D}$, si bien que $\mu^\mathsf{T} p \leqslant 0$ ou $-\mu^\mathsf{T} c(x) - t\mu_i \leqslant 0$ pour tout $t \geqslant 0$, dont on déduit que $\mu_i \geqslant 0$.
- Pour $x \in X$, $p := -c(x) \in \mathscr{D}$ et donc

$$\inf_{x \in X} \mu^\mathsf{T} c(x) > 0. \tag{13.37}$$

Par la définition de δ_0 et $X \neq \varnothing$, on a $\delta_0 > -\infty$. Par ailleurs, $\operatorname{val}(D) \neq -\infty$ implique qu'il existe un $\lambda \geqslant 0$ tel que $\delta_0(\lambda) < +\infty$. Pour ce $\lambda \geqslant 0$, on a donc $\delta_0(\lambda) \in \mathbb{R}$.

Avec ce λ et le μ utilisé en (13.37), on a pour tout $t \geqslant 0$: $\lambda + t\mu \geqslant 0$ et donc

$$\begin{aligned} \delta_0(\lambda + t\mu) &= -\inf_{x \in X} f(x) + (\lambda + t\mu)^\mathsf{T} c(x) \\ &\leqslant \underbrace{-\inf_{x \in X} \ell(x, \lambda)}_{\delta_0(\lambda) \in \mathbb{R}} - t \underbrace{\inf_{x \in X} \mu^\mathsf{T} c(x)}_{>0 \text{ par } (13.37)}, \end{aligned}$$

qui tend donc vers $-\infty$ lorsque $t \to +\infty$. On en déduit que $\operatorname{val}(D_0) = +\infty$. □

Voici un corrolaire immédiat qui donnent des conditions pour que $\operatorname{val}(P) \in \mathbb{R}$ (ce qui implique, en particulier, que (P) est réalisable). Une de ces conditions est que $\operatorname{val}(D_0) \in \mathbb{R}$, mais on pourra très bien avoir $\operatorname{val}(D_0) < \operatorname{val}(P)$ (présence d'un saut de dualité).

Corollaire 13.24 *Si* $\operatorname{dom} v_0$ *est fermé et* $\operatorname{val}(D_0) \in \mathbb{R}$*, alors* $\operatorname{val}(P) \in \mathbb{R}$.

13.5.2 Dualisation de contraintes générales

Voir le syllabus complet.

13.6 Dualisation lagrangienne augmentée

13.6.1 Dualisation de contraintes d'égalité et d'inégalité

En dualité, le lagrangien augmenté a plusieurs intérêts :

- si le paramètre de pénalisation r est pris assez grand, il n'y a pas de saut de dualité pour des problèmes (13.29) non convexes (proposition 13.25),
- la fonction duale associée est différentiable, c'est la *régularisée de Moreau-Yosida* de la fonction duale associée au lagrangien ordinaire,

- si r est pris assez grand, les problèmes internes primaux n'ont pas de solutions importunes.

Mais il a aussi des inconvénients, celui de détériorer le conditionnement des problèmes internes primaux et celui d'empêcher le découplage des variables des problèmes décomposables.

Le lagrangien augmenté a déjà été introduit dans le chapitre sur la pénalisation, essentiellement au moyen de considérations intuitives, cherchant à créer une cuvette autour d'une solution vérifiant les conditions d'optimalité du second ordre (voir la section 12.4). On l'introduit ici par une technique de perturbation avec un autre objectif, celui de convexifier la fonction valeur dans un voisinage de 0. Si l'on ajoute au critère de (13.30) le terme $(r/2)\|p\|_2^2$, celui-ci se retrouvera ajouter tel quel à la fonction valeur, ce qui aura pour effet de la convexifier près de l'origine.

Soit $r \geqslant 0$. Pour $p = (p_E, p_I) \in \mathbb{R}^m$, on introduit le problème perturbé de $(P_{X,EI})$ suivant et la *fonction valeur* v_r associée :

$$v_r : p \in \mathbb{R}^m \mapsto v_r(p) := \inf_{\substack{x \in X \\ c_E(x)+p_E=0 \\ c_I(x)+p_I \leqslant 0}} \left(f(x) + \frac{r}{2}\|p\|_2^2 \right) = v_0(p) + \frac{r}{2}\|p\|_2^2 \in \overline{\mathbb{R}}. \quad (13.38)$$

On a noté $\|\cdot\|_2$ la norme ℓ_2. La perturbation des contraintes est donc identique à celle utilisée dans (13.30), mais ici une perturbation du critère est aussi introduite. Le problème d'optimisation dans (13.38) équivaut à minimiser en x la fonction définie sur $X \times \mathbb{R}^m$ par

$$\Phi_r(x,p) = \begin{cases} f(x) + \dfrac{r}{2}\|p\|_2^2 & \text{si } \; c_E(x) + p_E = 0 \;\text{ et }\; c_I(x) + p_I \leqslant 0 \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$

Calculons le lagrangien ℓ_r associé aux perturbations introduites. Pour $\lambda = (\lambda_E, \lambda_I)$, il s'écrit

$$\begin{aligned} \ell_r(x,\lambda) &= -\sup_{p=(p_E,p_I)} \Big(\langle \lambda, p \rangle - \Phi_r(x,p) \Big) \\ &= f(x) - \sup_{\substack{p=(p_E,p_I) \\ p_E=-c_E(x) \\ p_I \leqslant -c_I(x)}} \Big(\langle \lambda, p \rangle - \frac{r}{2}\|p\|_2^2 \Big). \end{aligned}$$

Si $r = 0$, on retrouve le lagrangien ordinaire ℓ_0 de la formule (13.32). Si $r > 0$, le supremum en p_I est atteint pour $p_I = \min(\lambda_I/r, -c_I(x))$, si bien que l'on a

$$\boxed{\begin{aligned} \ell_r(x,\lambda) = f(x) &+ \sum_{i \in E} \left[\lambda_i c_i(x) + \frac{r}{2} c_i(x)^2 \right] \\ &+ \sum_{i \in I} \left[\lambda_i \max\left(\frac{-\lambda_i}{r}, c_i(x) \right) + \frac{r}{2} \left(\max\left(\frac{-\lambda_i}{r}, c_i(x) \right) \right)^2 \right]. \end{aligned}} \quad (13.39)$$

On a donc retrouvé le lagrangien augmenté défini en (12.21). Remarquons que, contrairement au lagrangien ordinaire, le lagrangien augmenté ne prend que des valeurs

finies. Cette formule est compliquée, surtout du fait de la présence des contraintes d'inégalité. S'il n'y a que des contraintes d'égalité, elle devient

$$\ell_r(x,\lambda) = f(x) + \lambda^{\mathsf{T}} c(x) + \frac{r}{2}\|c(x)\|_2^2,$$

qui est le lagrangien ordinaire avec pénalisation quadratique des contraintes.

Le problème dual s'écrit comme d'habitude

$$\sup_{\lambda=(\lambda_E,\lambda_I)} \inf_{x\in X} \ell_r(x,\lambda)$$

et le problème primal s'écrit

$$\inf_{x\in X} \sup_{\lambda=(\lambda_E,\lambda_I)} \ell_r(x,\lambda).$$

Pour ce dernier, on constate en effet que

$$\begin{aligned}
&\sup_{\lambda=(\lambda_E,\lambda_I)} \ell_r(x,\lambda) \\
&\quad = \quad f(x) + \sum_{i\in E} \sup_{\lambda_i} \left[\lambda_i c_i(x) + \frac{r}{2} c_i(x)^2\right] \qquad (13.40)\\
&\qquad\quad + \sup_{\lambda_I\in\mathbb{R}^{m_I}} \left[- \sum_{\substack{i\in I\\ rc_i(x)+\lambda_i\leqslant 0}} \frac{(\lambda_i)^2}{2r} + \sum_{\substack{i\in I\\ rc_i(x)+\lambda_i>0}} \left(\lambda_i c_i(x) + \frac{r}{2} c_i(x)^2\right)\right].
\end{aligned}$$

Le supremum en λ_i ($i \in E$) du premier crochet vaut $+\infty$ si $c_i(x) \neq 0$ et vaut 0 si $c_i(x) = 0$. Le supremum en λ_i ($i \in I$) du second crochet vaut $+\infty$ si $c_i(x) > 0$ et 0 si $c_i(x) \leqslant 0$ [il est atteint en tout $\lambda_i \geqslant 0$ si $c_i(x) = 0$ et en $\lambda_i = 0$ si $c_i(x) < 0$]. Dès lors, on retrouve le problème primal :

$$\inf_{x\in X} \sup_{\lambda=(\lambda_E,\lambda_I)} \ell_r(x,\lambda) = \inf_{x\in X} \begin{cases} f(x) & \text{si } \ c_E(x) = 0 \ \text{ et } \ c_I(x) \leqslant 0 \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$

On a donc, ici aussi, égalité en $(13.21)_c$.

La proposition suivante donne des conditions pour ne pas avoir de saut de dualité localement. Pour les problèmes non convexes sur $\mathbb{R}^n$, on peut donc avoir des résultats de dualité locaux via le lagrangien augmenté. Ce résultat renforce celui du théorème 12.18 en affirmant que, non seulement $\ell_r(\cdot,\bar\lambda)$ est minimisée localement en $\bar x$, mais que $\ell_r(\bar x,\cdot)$ est maximisée en $\bar\lambda$.

Proposition 13.25 (point-selle de ℓ_r et KKT) *On considère le problème (13.29) avec $X = \mathbb{R}^n$ et on suppose que f et $c_{E\cup I^0(\bar x)}$ sont deux fois dérivables en un minimum local $\bar x$ de ce problème. On suppose également que les conditions de (KKT) ont lieu en $(x_*,\lambda_*) = (\bar x,\bar\lambda) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$ et que la condition suffisante*

d'optimalité du second ordre semi-forte (4.61) *a lieu pour un certain multiplicateur optimal* $\bar\lambda$. *Alors, il existe un réel* $\bar r > 0$ *et un voisinage* V *de* $\bar x$, *tels que pour tout* $r \geqslant \bar r$, *tout* $x \in V \setminus \{\bar x\}$ *et tout* $\lambda \in \mathbb{R}^m$, *on ait*

$$\ell_r(\bar x, \lambda) \leqslant \ell_r(\bar x, \bar\lambda) < \ell_r(x, \bar\lambda). \tag{13.41}$$

Démonstration. La minimalité stricte de $\ell_r(\cdot, \lambda)$ en $\bar x$ sur V, pour r au-delà d'un certain seuil $\bar r > 0$, a été établie au théorème 12.18. Il reste donc à montrer la maximalité de $\ell_r(\bar x, \cdot)$ en $\bar\lambda$. Ici le seuil $\bar r > 0$ n'est pas nécessaire : un $r > 0$ suffit.

Soient $\lambda \in \mathbb{R}^m$ et $r > 0$. D'après (13.39), on a

$$\ell_r(\bar x, \lambda) = f(\bar x) + \sum_{\substack{i\in I\\ rc_i(\bar x)+\lambda_i>0}} \Big(\lambda_i c_i(\bar x) + \frac{r}{2} c_i(\bar x)^2\Big) - \sum_{\substack{i\in I\\ rc_i(\bar x)+\lambda_i\leqslant 0}} \frac{(\lambda_i)^2}{2r}.$$

Le dernier terme est clairement négatif. Quant au second, en utilisant $rc_i(\bar x) + \lambda_i > 0$ et $c_i(\bar x) \leqslant 0$, on voit que chaque terme de la somme est $\leqslant -rc_i(\bar x)^2 + \frac{r}{2} c_i(\bar x)^2 \leqslant 0$. Donc

$$\ell_r(\bar x, \lambda) \leqslant f(\bar x).$$

On conclut en observant que $f(\bar x) = \ell_r(\bar x, \bar\lambda)$. En effet, il suffit d'utiliser dans l'expression de $\ell_r(\bar x, \bar\lambda)$ ci-dessus le fait que $\bar\lambda_i c_i(\bar x) = 0$, que $rc_i(\bar x) + \bar\lambda_i > 0$ implique que $\bar\lambda_i > 0$ et donc $c_i(\bar x) = 0$, et que $rc_i(\bar x) + \bar\lambda_i \leqslant 0$ implique que $\bar\lambda_i = 0$. □

Les *fonctions duales* associées au lagrangien ordinaire (13.32) et au lagrangien augmenté (13.39) sont définies en $\lambda \in \mathbb{R}^m$ respectivement par

$$\delta_0(\lambda) = -\inf_{x\in X} \ell_0(x, \lambda) \qquad \text{et} \qquad \delta_r(\lambda) = -\inf_{x\in X} \ell_r(x, \lambda). \tag{13.42}$$

La proposition 13.26 montre que δ_r est une régularisée de Moreau-Yosida de δ_0 sur $\mathbb{R}^m$ [464 ; 1973], une notion de régularisation introduite à la section 3.7.2.

Proposition 13.26 (fonction duale régularisée) *On suppose que* f *et les* $\{c_i\}_{i\in I}$ *sont convexes, que* c_E *est affine, que* f *et* c *sont à valeurs réelles et que* $r > 0$. *Alors, les propriétés suivantes ont lieu :*

1) δ_r *est convexe fermée et ne prend pas la valeur* $-\infty$,
2) δ_r *est la régularisée de Moreau-Yosida de* δ_0 *pour le produit scalaire* $(u, v) \mapsto \frac{1}{r}(u^{\mathsf T} v)$, *c.-à-d., pour tout* $\lambda \in \mathbb{R}^m$,

$$\delta_r(\lambda) = \inf_{\mu\in\mathbb{R}^m} \Big(\delta_0(\mu) + \frac{1}{2r}\|\mu - \lambda\|_2^2\Big), \tag{13.43}$$

3) *si, de plus,* $\delta_0 \not\equiv +\infty$, *alors* δ_r *prend des valeurs finies (elle est donc dans* $\overline{\mathrm{Conv}}(\mathbb{R}^m)$*) et est* $\mathcal{C}^{1,1}$ *sur* $\mathbb{R}^m$.

Démonstration. 1) Par sa définition (13.42) et l'expression (12.19) du lagrangien augmenté, δ_r est l'enveloppe supérieure en $(x,s) \in X \times \mathbb{R}^{m_I}_+$ de fonctions affines, si bien qu'elle est convexe, fermée (proposition 3.33) et ne prend pas la valeur $-\infty$.

2) La formule (13.42) de δ_r, le fait que ℓ_r est le lagrangien associé à la perturbation (13.38) de (P_{EI}) et (13.20) nous informent que $\delta_r = v_r^*$, où v_r est la fonction valeur définie en (13.38). De même $\delta_0 = v_0^*$. Comme v_r et v_0 sont reliés par la formule

$$v_r = v_0 + r\chi,$$

où χ la fonction autoconjuguée $p \mapsto \frac{1}{2}\|p\|_2^2$, on aura un lien entre δ_r et δ_0 en calculant v_r^* comme conjuguée d'une somme de fonctions (proposition 3.48).

Par la convexité de (P_{EI}), la fonction Φ_0 définie par (13.31) est convexe et donc aussi v_0 qui en est la fonction marginale (proposition 3.34). D'autre part $v_0 \not\equiv +\infty$ (quel que soit $x \in \mathbb{R}^n$, $v_0(-c(x)) \leqslant f(x) < +\infty$). Si v_0 prend la valeur $-\infty$, il en est de même de v_r (pour la même valeur de l'argument), auquel cas $\delta_0 = v_0^* \equiv +\infty$, $\delta_r = v_r^* \equiv +\infty$ et la formule (13.43) est vérifiée. Autrement $v_0 \in \mathrm{Conv}(\mathbb{R}^m)$ et en appliquant le point 2 de la proposition 3.48, on trouve également la formule (13.43) :

$$\begin{aligned}\delta_r(\lambda) &= v_r^*(\lambda)\\ &= \left(v_0^* \boxplus (r\chi)^*\right)(\lambda)\\ &= \inf_{\mu\in\mathbb{R}^m} \delta_0(\mu) + \frac{1}{2r}\|\mu - \lambda\|_2^2,\end{aligned}$$

où on a utilisé la formule (3.24) de l'inf-convolution et le fait que $(r\chi)^* = \chi/r$.

3) Observons d'abord que $\delta_0 \in \mathrm{C\overline{onv}}(\mathbb{R}^m)$ par le point 1 et par le fait que $\delta_0 \not\equiv +\infty$ par hypothèse. Pour tout λ, le problème de minimisation dans (13.43) a alors une solution unique dans $\operatorname{dom}\delta_0$, si bien que δ_r est à valeurs réelles. Comme régularisée de Moreau-Yosida, δ_r est dans $\mathrm{C\overline{onv}}(\mathbb{R}^m)$ et est $\mathcal{C}^{1,1}$ (proposition **??**). □

Le lagrangien augmenté a également un intérêt pour les *problèmes convexes*, car il a un effet régularisant sur la fonction duale ainsi qu'un effet stabilisateur sur les solutions primales.

La proposition suivante est au lagrangien augmenté ce que la proposition 13.22 est au lagrangien ordinaire. Elle est illustrée par la figure 13.3. La minorante de la fonction valeur v_0 qui se manifeste ici est quadratique par morceaux plutôt qu'affine.

Proposition 13.27 (minorante quadratique par morceaux de v_0) *Soient $r > 0$, $\bar\lambda \in \mathbb{R}^m$ et ℓ_r le lagrangien augmenté (13.39). Alors $\bar x \in \arg\min\{\ell_r(x,\bar\lambda) : x \in X\}$ si, et seulement si, la fonction quadratique par morceaux*

$$p \in \mathbb{R}^m \mapsto \ell_r(\bar x,\bar\lambda) + \bar\lambda_E^\mathsf{T} p_E - \frac{r}{2}\|p_E\|_2^2 - \frac{1}{2r}\left(\|(\bar\lambda_I - rp_I)^+\|_2^2 - \|\bar\lambda_I\|_2^2\right) \quad (13.44)$$

est une minorante de la fonction valeur v_0 définie en (13.30). Dans ce cas, cette minorante est exacte en $p = -c(\bar x)$ et on a $v_0(-c(\bar x)) = f(\bar x)$.

Démonstration. [Préliminaire] Soient $r > 0$ et $\bar\lambda \in \mathbb{R}^m$. Pour $p \in \mathbb{R}^m$, on note $X_p := \{x \in X : c_E(x) + p_E = 0,\ c_I(x) + p_I \leqslant 0\}$ l'ensemble admissible du problème

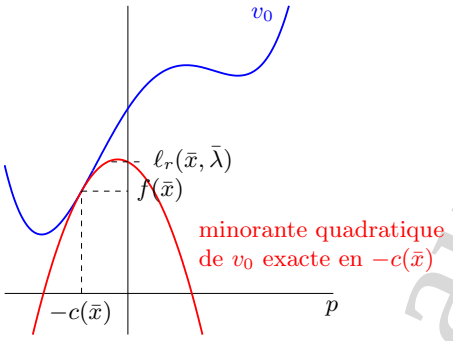


Fig. 13.3. Illustration de la proposition 13.27

perturbé dans (13.38). On note aussi $P := \{p \in \mathbb{R}^m : X_p \neq \varnothing\} = \operatorname{dom} v_0 = \operatorname{dom} v_r$. On note enfin $p \mapsto \chi(p)$ la fonction quadratique par morceaux définie en (13.44).

[$\Rightarrow$] Pour tout $\varepsilon > 0$ et $p \in P$, on peut trouver un $x \in X_p$ tel que $f(x) \leqslant v_0(p) + \varepsilon$. Dès lors

$$\begin{aligned}
\chi(p) &\leqslant \ell_r(x,\bar{\lambda}) + \bar{\lambda}_E^{\mathsf{T}} p_E - \frac{r}{2}\|p_E\|_2^2 - \frac{1}{2r}\left(\|(\bar{\lambda}_I - rp_I)^+\|_2^2 - \|\bar{\lambda}_I\|_2^2\right) \\
&\qquad [\bar{x} \in \arg\min\{\ell_r(x,\bar{\lambda}) : x \in X\}] \\
&= f(x) + \bar{\lambda}_E^{\mathsf{T}}(c_E(x) + p_E) + \frac{1}{2r}\left(\|(\bar{\lambda}_I + rc_I(x))^+\|_2^2 - \|(\bar{\lambda}_I - rp_I)^+\|_2^2\right) \\
&\qquad [\text{expressions (12.21) et (12.23) de } \ell_r] \\
&\leqslant f(x) \qquad [x \in X_p \text{ et donc } c_E(x) + p_E = 0 \text{ et } c_I(x) + p_I \leqslant 0] \\
&\leqslant v_0(p) + \varepsilon \qquad [\text{définition de } x].
\end{aligned}$$

Comme $\varepsilon > 0$ et $p \in P$ sont arbitraires, on en déduit que la fonction χ est une minorante de v_0 sur P, donc aussi sur $\mathbb{R}^m$ (v_0 vaut $+\infty$ en dehors de P).

[$\Leftarrow$] Quel que soit le couple $(x,p) \in X_p \times \mathbb{R}^m$, on a par hypothèse :

$$\chi(p) \leqslant v_0(p) \leqslant f(x). \tag{13.45}$$

Quel que soit $x \in X$, $(x,p) \in X_p \times \mathbb{R}^m$ en prenant $p = -c(x)$, si bien que l'inégalité entre les membres extrêmes de (13.45) conduit à $\chi(-c(x)) \leqslant v_0(p) \leqslant f(x)$ ou

$$\begin{aligned}
\ell_r(\bar{x},\bar{\lambda}) &\leqslant f(x) + \bar{\lambda}_E^{\mathsf{T}} c_E(x) + \frac{r}{2}\|c_E(x)\|_2^2 + \frac{1}{2r}\left(\|(\bar{\lambda}_I + rc_I(x))^+\|_2^2 - \|\bar{\lambda}_I\|_2^2\right) \\
&= \ell_r(x,\bar{\lambda}),
\end{aligned}$$

par les expressions (12.21) et (12.23) de ℓ_r. Dès lors $\bar{x} \in \arg\min\{\ell_0(x,\bar{\lambda}) : x \in X\}$.

[Conclusion] Enfin $(\bar{x},p) \in X_p \times \mathbb{R}^m$ si $p = -c(\bar{x})$, si bien que (13.45) devient $f(\bar{x}) = \chi(-c(\bar{x})) \leqslant v_0(-c(\bar{x})) \leqslant f(\bar{x})$, ce qui montre d'une part l'exactitude de χ en $p = -c(\bar{x})$ et $v_0(-c(\bar{x})) = f(\bar{x})$. □

13.6.2 Dualisation de contraintes générales

Voir le syllabus complet.

13.7 Méthodes numériques ▲

On s'intéresse dans cette section à des algorithmes de résolution du problème dual

$$\sup_{y\in Y}\ \inf_{x\in X}\ \varphi(x,y),$$

où $\varphi : X \times Y \to \overline{\mathbb{R}}$. Deux méthodes sont décrites. La première minimise directement la fonction duale, si bien qu'il faut résoudre complètement les problèmes de Lagrange pour chaque valeur prise par la variable duale. Il faut donc que le problème soit bien adapté à cette approche : la fonction φ doit être facile à minimiser en $x \in X$. La seconde est une version simplifiée de la première, dans laquelle le problème de Lagrange est résolu de manière très grossière, puisque l'on ne fait qu'un seul pas de minimisation.

Nous présentons ces algorithmes dans le cadre de la *relaxation lagrangienne*, c'est-à-dire lorsque la fonction φ ci-dessus est le lagrangien d'un problème d'optimisation avec contraintes.

13.7.1 Minimisation de la fonction duale

Nous allons introduire un algorithme minimisant la fonction duale lorsqu'il s'agit de résoudre un problème d'optimisation sous la forme suivante :

$$\begin{cases} \min\ f(x) \\ c(x) \leqslant 0 \\ x \in X, \end{cases} \tag{13.46}$$

où $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $c : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ et X est une partie non vide de $\mathbb{R}^n$ permettant d'exprimer les contraintes aisées à prendre en compte (typiquement des contraintes de borne). On note $\ell(x,\lambda) = f(x) + \lambda^{\mathsf{T}} c(x)$ le lagrangien qui « dualise » la contrainte d'inégalité. Le problème dual s'écrit

$$\inf_{\lambda\geqslant 0}\ \delta(\lambda), \tag{13.47a}$$

où $\delta : \mathbb{R}^m_+ \to \mathbb{R}$ est la *fonction duale*, qui est définie par

$$\delta(\lambda) := -\inf_{x\in X}\ \ell(x,\lambda). \tag{13.47b}$$

On rappelle que le problème de minimisation dans (13.47b) est appelé le *problème de Lagrange*.

Même en l'absence de convexité de f et c, la fonction duale est convexe. Cette propriété remarquable provient de l'infimum dans (13.47b) et de la structure du lagrangien, qui est affine par rapport au multiplicateur λ. La fonction duale n'est pas différentiable en général ; mais lorsque le problème de Lagrange a (au moins) une solution, on dispose d'un sous gradient de δ, dont on peut faire usage dans des algorithmes adaptés à la minimisation de fonctions non différentiables (par exemple la *méthode de faisceaux*, décrite dans [295 ; 1993, chapitres XIV et XV]).

Proposition 13.28 (convexité et sous-gradient de la fonction duale) *Si $\delta \not\equiv +\infty$, alors $\delta \in \overline{\mathrm{Conv}}(\mathbb{R}^n)$. De plus,*

$$-c\left(\arg\min_{x\in X} \ell(x,\lambda)\right) \subseteq \partial\delta(\lambda).$$

Démonstration. Supposons que $\delta \not\equiv +\infty$. Alors δ est propre car elle ne prend pas la valeur $-\infty$ (X est supposé non vide). D'autre part, comme enveloppe supérieure (de la famille paramétrée par $x \in X$) de fonctions affines (donc convexes et fermées) $\lambda \mapsto -\ell(x,\lambda)$, δ est convexe et fermée (proposition 3.33).

Soit à présent $\bar{x}_\lambda$ une solution du problème de Lagrange (13.47b). Pour tout $\mu \in \mathbb{R}^m$, on a

$$\delta(\mu) \geqslant -\ell(\bar{x}_\lambda, \mu) = \delta(\lambda) - (\mu - \lambda)^\mathsf{T} c(\bar{x}_\lambda).$$

Donc $-c(\bar{x}_\lambda) \in \partial\delta(\lambda)$. □

Voici à présent des conditions assurant la différentiabilité de la fonction duale. Dans ce cas et lorsqu'une solution $\bar{x}_\lambda$ du problème de Lagrange existe, d'après le résultat précédent, on doit avoir $\nabla\delta(\lambda) = -c(\bar{x}_\lambda)$.

Proposition 13.29 (différentiabilité de la fonction duale) *Supposons que le problème de Lagrange (13.47b) ait une solution unique, notée $\bar{x}_\lambda$, pour tout λ voisin d'un certain λ_0 et que l'application $\lambda \mapsto c(\bar{x}_\lambda)$ soit continue en λ_0 ; alors δ est Fréchet-différentiable en λ_0 et $\nabla\delta(\lambda_0) = -c(\bar{x}_{\lambda_0})$. Si de plus, $\lambda \mapsto c(\bar{x}_\lambda)$ est continue dans un voisinage de λ_0, alors δ est C^1 dans un voisinage de λ_0.*

Démonstration. Comme dans la démonstration de la proposition 13.28, pour λ et $\lambda' \in \operatorname{dom}\delta$ et pour une solution $\bar{x}_\lambda$ du problème de Lagrange en λ, on a $-\delta(\lambda')+\delta(\lambda) \leqslant (\lambda' - \lambda)^\mathsf{T} c(\bar{x}_\lambda)$. En inversant le rôle de λ et λ', on obtient

$$(\lambda' - \lambda)^\mathsf{T} c(\bar{x}_{\lambda'}) \leqslant -\delta(\lambda') + \delta(\lambda) \leqslant (\lambda' - \lambda)^\mathsf{T} c(\bar{x}_\lambda).$$

Fixons à présent $\lambda = \lambda_0$ et prenons $\lambda' = \lambda_0 + \mu$ avec μ petit, de telle sorte que $\bar{x}_{\lambda_0+\mu}$ existe et que $c(\bar{x}_{\lambda_0+\mu})$ dépende continûment de μ voisin de zéro. Alors

$$\mu^\mathsf{T}[c(\bar{x}_{\lambda_0+\mu}) - c(\bar{x}_{\lambda_0})] \leqslant -\delta(\lambda_0+\mu) + \delta(\lambda_0) - \mu^\mathsf{T} c(\bar{x}_{\lambda_0}) \leqslant 0.$$

Dès lors

$$-\delta(\lambda_0+\mu) + \delta(\lambda_0) - c(\bar{x}_{\lambda_0})^\mathsf{T}\mu = o(\|\mu\|), \quad \text{lorsque } \mu \to 0.$$

Ceci montre que δ est différentiable en λ_0 et que $\nabla\delta(\lambda_0) = -c(\bar{x}(\lambda_0))$. □

Il n'est pas surprenant que le gradient $\nabla\delta(\lambda)$ soit donné par $-c(\bar{x}_\lambda)$, si on prend le point de vue suivant. Supposons en effet des conditions un peu plus régulières que celles de la proposition ci-dessus : la solution $\bar{x}_\lambda \equiv \bar{x}(\lambda)$ du problème de Lagrange

dans (13.47b) est une fonction différentiable de λ et ℓ est différentiable. Alors $\delta(\lambda) = -\ell(\bar{x}(\lambda), \lambda)$ et on a

$$\delta'(\lambda) \cdot \mu = -\ell'_x(\bar{x}(\lambda), \lambda) \cdot (\bar{x}'(\lambda) \cdot \mu) - \ell'_\lambda(\bar{x}(\lambda), \lambda) \cdot \mu = -\ell'_\lambda(\bar{x}(\lambda), \lambda) \cdot \mu,$$

puisque $\ell'_x(\bar{x}(\lambda), \lambda) = 0$ par optimalité de $\bar{x}_\lambda$. On retrouve donc $\nabla\delta(\lambda) = -c(\bar{x}_\lambda)$.

On peut à présent énoncer l'algorithme, qui peut être vu comme une méthode du type gradient projeté (section 11.1) appliquée au problème dual. Le gradient projeté permet de prendre en compte la contrainte de positivité sur le multiplicateur dans (13.47a).

Algorithme 13.30 (minimisation de la fonction duale)

1. Initialisation : choix de $\lambda_1 \geqslant 0$;
2. Pour $k = 1, 2, \ldots$ faire :
   2.1. Trouver x_k solution du problème $\min_{x \in X} \ell(x, \lambda_k)$;
   2.2. Si x_k est satisfaisant, on s'arrête ;
   2.3. $\lambda_{k+1} = (\lambda_k + \alpha_k c(x_k))^+$, où $\alpha_k > 0$ est un pas bien choisi.

On retrouve le déplacement du gradient projeté à l'étape 2.3. On passe pour l'instant sous silence l'étape délicate du choix du pas $\alpha_k > 0$.

Nous allons montrer la convergence de cet algorithme dans le cas des problèmes (fortement) convexes, avec de petits pas α_k. En ce qui concerne la convergence, des contraintes d'égalité affines peuvent être prise en compte par c (on les remplace par deux contraintes d'inégalité opposées).

Proposition 13.31 *On considère le problème (13.46) dans lequel on suppose que $X = \mathbb{R}^n$, que $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ est différentiable et fortement convexe de module $\kappa > 0$ et que $c : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ est lipschitzienne de module $L > 0$ et convexe. On suppose également que le lagrangien ℓ a un point-selle $(\bar{x}, \bar{\lambda})$ sur $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m_+$. On considère l'algorithme 13.30 dans lequel α_k pris dans un compact de $]0, \frac{2\kappa}{L^2}[$. Alors l'algorithme génère une suite $\{x_k\}$ qui converge vers $\bar{x}$.*

Démonstration. Comme f est fortement convexe et l'ensemble admissible du problème (13.46) est convexe, ce dernier a une solution unique, qui n'est autre que $\bar{x}$. En effet $\bar{x}$ est solution du problème primal associé au lagrangien ℓ — théorème 13.3 — qui est le problème (13.46).

L'optimalité de $\bar{x}$ donne

$$\nabla f(\bar{x})^\mathsf{T}(x - \bar{x}) + \bar{\lambda}^\mathsf{T}\Big(c'(\bar{x}) \cdot (x - \bar{x})\Big) = 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

En utilisant la convexité de c et $\bar{\lambda} \geqslant 0$, on obtient

$$\nabla f(\bar{x})^\mathsf{T}(x - \bar{x}) + \bar{\lambda}^\mathsf{T}\Big(c(x) - c(\bar{x})\Big) \geqslant 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

De même pour l'optimalité en x_k :

$$\nabla f(x_k)^\mathsf{T}(x - x_k) + \lambda_k^\mathsf{T}\Big(c(x) - c(x_k)\Big) \geqslant 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

En prenant $x = x_k$ dans l'avant-dernière inégalité, $x = \bar{x}$ dans la dernière et en sommant, on obtient

$$(\nabla f(x_k) - \nabla f(\bar{x}))^\mathsf{T}(x_k - \bar{x}) \leqslant -(\lambda_k - \bar{\lambda})^\mathsf{T}\Big(c(x_k) - c(\bar{x})\Big).$$

On utilise alors la forte convexité de f et on note $\mu_k := \lambda_k - \bar{\lambda}$, ce qui conduit à

$$\kappa\|x_k - \bar{x}\|^2 \leqslant -\mu_k^\mathsf{T}\Big(c(x_k) - c(\bar{x})\Big). \tag{13.48}$$

Il reste à utiliser la récurrence sur λ_k. On a $\nabla_\lambda \ell(\bar{x}, \lambda) = c(\bar{x})$ et on se rappelle que $\ell(\bar{x}, \cdot)$ a un maximum en $\bar{\lambda}$ sur $\mathbb{R}^m_+$. Dès lors, pour tout $\lambda \in \mathbb{R}^m_+$:

$$0 \leqslant -\alpha_k c(\bar{x})^\mathsf{T}(\lambda - \bar{\lambda}) = \Big(\bar{\lambda} - (\bar{\lambda} + \alpha_k c(\bar{x}))\Big)^\mathsf{T}(\lambda - \bar{\lambda}),$$

ce qui s'écrit aussi

$$\bar{\lambda} = P_{\mathbb{R}^m_+}(\bar{\lambda} + \alpha_k c(\bar{x})).$$

D'autre part, la récurrence sur λ_k donne

$$\lambda_{k+1} = P_{\mathbb{R}^m_+}(\lambda_k + \alpha_k c(x_k)).$$

On utilise alors le fait que le projecteur $P_{\mathbb{R}^m_+}$ est 1-lipschitzien, la propriété de Lipschitz de c et (13.48) :

$$\begin{array}{rcl} \|\mu_{k+1}\| & \leqslant & \|\mu_k + \alpha_k(c(x_k) - c(\bar{x}))\| \\ \|\mu_{k+1}\|^2 & \leqslant & \|\mu_k\|^2 + 2\alpha_k\mu_k^\mathsf{T}(c(x_k) - c(\bar{x})) + \alpha_k^2\|c(x_k) - c(\bar{x})\|^2 \\ & \leqslant & \|\mu_k\|^2 + (\alpha_k L^2 - 2\kappa)\alpha_k\|x_k - \bar{x}\|^2 \\ & \leqslant & \|\mu_k\|^2 - \epsilon^2 L^2\|x_k - \bar{x}\|^2, \end{array}$$

si $\alpha_k \in [\epsilon, \frac{2\kappa}{L^2} - \epsilon]$, avec $\epsilon > 0$ petit. Dès lors $\{\|\mu_k\|\}$ est décroissante, donc converge. On en déduit que $x_k \to \bar{x}$. □

Le résultat précédent n'assure pas la convergence de la suite des multiplicateurs $\{\lambda_k\}$, alors que l'algorithme 13.30 s'intéresse principalement à cette suite ! En fait, sous les hypothèses de la proposition, il n'y a pas unicité du multiplicateur optimal $\bar{\lambda}$. Par contre, si l'on suppose que les gradients des contraintes actives sont linéairement indépendants, alors on peut montrer la convergence de λ_k vers l'unique multiplicateur optimal $\bar{\lambda}$ (voir l'exercice 13.9).

Les inconvénients de la relaxation lagrangienne sont les suivants.

- La fonction duale est non différentiable en λ si le problème de Lagrange $\inf_x \ell(x, \lambda)$ n'a pas de solution unique. Il faut donc utiliser des algorithmes non différentiables sophistiqués (souvent lents) pour minimiser la fonction duale.
- Le recouvrement de la solution primale par $\inf_x \ell(x, \bar{\lambda})$ ($\bar{\lambda}$ est une solution duale) n'est pas aisé.

13.7.2 Minimisation de la fonction duale régularisée

On considère le problème $(P_{X,EI})$ défini en (13.29) et on étudie le cas où l'approche duale se fait via le lagrangien augmenté associé (13.39).

L'approche duale considéré ici consiste à minimiser la fonction duale δ_r associée au lagrangien augmenté ℓ_r défini en (13.39), fonction duale dont on rappelle ici la définition :

$$\delta_r(\lambda) = -\inf_{x\in X} \ell_r(x,\lambda).$$

Dans la version la plus simple, l'algorithme prend

$$\lambda_+ = \lambda + r\,\tilde{c}_{\lambda,r}(x_\lambda), \tag{13.49}$$

où $\tilde{c}_{\lambda,r}$ est défini en (12.22) et x_λ est un minimiseur de $\ell_r(\cdot,\lambda)$. De manière plus précise, l'algorithme s'écrit comme suit.

Algorithme 13.32 (du lagrangien augmenté)

1. Initialisation : choix d'un multiplicateur initial $\lambda_1 \in \mathbb{R}^m$ et d'un facteur d'augmentation initial $r_1 > 0$;
2. Pour $k = 1, 2, \ldots$ faire :
   2.1. Trouver x_k solution du problème $\min_{x\in X} \ell_{r_k}(x,\lambda_k)$;
   2.2. Si $\tilde{c}_{\lambda_k,r_k}(x_k) \simeq 0$, on s'arrête ;
   2.3. $\lambda_{k+1} = \lambda_k + r_k\,\tilde{c}_{\lambda_k,r_k}(x_k)$.

La proposition suivante établit le fait remarquable selon lequel, pour les problèmes convexes, l'algorithme du lagrangien augmenté ci-dessus se confond avec l'algorithme proximal sur la fonction duale δ_0 [464 ; 1973], un algorithme étudié à la section 7.2.

Proposition 13.33 (interprétation proximale de l'algorithme du LA) *On suppose que f et les $\{c_i\}_{i\in I}$ sont convexes, que c_E est affine, que f et c sont à valeurs réelles et que $r > 0$. Soit $\lambda \in \mathbb{R}^m$. On suppose que $x_\lambda \in X$ réalise l'infimum dans la définition (13.42) de δ_r (c.-à-d., $\delta_r(\lambda) = -\ell_r(x_\lambda,\lambda)$) et que $\lambda_+ \in \mathbb{R}^m$ réalise l'infimum dans (13.43). Alors*

$$\nabla\delta_r(\lambda) = -\nabla_\lambda \ell_r(x_\lambda,\lambda) = -\tilde{c}_{\lambda,r}(x_\lambda), \tag{13.50}$$

où $\tilde{c}_{\lambda,r}(x_\lambda)$ est défini par (12.22). De plus, λ_+ et x_λ sont reliés par

$$\lambda_+ = \lambda + r\,\tilde{c}_{\lambda,r}(x_\lambda) \qquad \text{et} \qquad -\tilde{c}_{\lambda,r}(x_\lambda) \in \partial\delta_0(\lambda_+). \tag{13.51}$$

Démonstration. Soient $\lambda \in \mathbb{R}^m$, x_λ réalisant l'infimum dans la définition (13.42) de δ_r et $\lambda_+ \in \mathbb{R}^m$ réalisant l'infimum dans (13.43). On se rappelle que $\ell_r(x_\lambda,\cdot)$ est dérivable (proposition 12.17) et concave (par son expression (12.19)). Pour tout $\lambda' \in \mathbb{R}^m$ on a

$$\begin{aligned}\delta_r(\lambda') &\geqslant -\ell_r(x_\lambda,\lambda') \qquad \text{[définition (13.42) de } \delta_r\text{]}\\ &\geqslant -\ell_r(x_\lambda,\lambda) - \nabla_\lambda \ell_r(x_\lambda,\lambda)^{\mathsf{T}}(\lambda'-\lambda) \qquad \text{[concavité de } \ell_r(x_\lambda,\cdot)\text{]}\\ &= \delta_r(\lambda) - \nabla_\lambda \ell_r(x_\lambda,\lambda)^{\mathsf{T}}(\lambda'-\lambda).\end{aligned}$$

Comme δ_r est $\mathcal{C}^{1,1}$ par le point 3 de la proposition 13.26, on déduit de l'inégalité ci-dessus que $\nabla\delta_r(\lambda) = -\nabla_\lambda \ell_r(x_\lambda,\lambda) = -\tilde{c}_{\lambda,r}(x_\lambda)$, par (12.25).

Par ailleurs, comme δ_r est la régularisée de Moreau-Yosida de δ_0 pour le produit scalaire $(u,v) \mapsto \frac{1}{r}(u^{\mathsf{T}}v)$, son gradient en λ pour ce produit scalaire s'écrit $\lambda - \lambda_+$ (point (iv) de la proposition **??**) et celui pour le produit scalaire euclidien est donc $\frac{1}{r}(\lambda - \lambda_+)$, ce qui grâce à (13.50) donne la première relation de (13.51).

Enfin, par définition de λ_+ comme unique minimiseur du problème à droite dans (13.43), il vient $0 \in \partial\delta_0(\lambda_+) + \frac{1}{r}(\lambda_+ - \lambda)$. Comme $\frac{1}{r}(\lambda_+ - \lambda) = \tilde{c}_{\lambda,r}(x_\lambda)$, on obtient la seconde relation de (13.51). □

Concluons en donnant trois interprétations de l'algorithme 13.32.

1. L'algorithme 13.32 est identique à la *méthode des multiplicateurs* introduite à la section 12.4.4 comme heuristique dans une méthode de pénalisation : voir le schéma algorithmique 12.19.
2. La proposition 13.26 nous apprend que, si $(P_{X,EI})$ est convexe et si $\operatorname{dom}\delta_0 \neq \varnothing$, alors δ_r est différentiable et son gradient s'écrit $\nabla\delta_r(\lambda) = -\tilde{c}_{\lambda,r}(x_\lambda)$. Dès lors (13.49) peut déjà être vu comme une méthode de gradient sur δ_r avec le pas $r > 0$.
3. Enfin, la proposition 13.33 affirme que, si $(P_{X,EI})$ est convexe et si $\operatorname{dom}\delta_0 \neq \varnothing$, alors l'algorithme du lagrangien augmenté est identique à l'algorithme proximal pour minimiser δ_0 (section 7.2).

Le dernier point de vue implique que l'algorithme du lagrangien augmenté est monotone sur δ_0, puisque l'on a

$$\delta_r(\lambda) = \delta_0(\lambda_+) + \frac{1}{2r}\|\lambda_+ - \lambda\|^2 \leqslant \delta_0(\lambda).$$

Comme $\lambda_+ - \lambda = r\,\tilde{c}_{\lambda,r}(x_\lambda)$, on peut estimer la décroissance de δ_0 à chaque itération par la norme de $\tilde{c}_{\lambda,r}(x_\lambda)$:

$$\delta_0(\lambda_+) \leqslant \delta_0(\lambda) - \frac{r}{2}\|\tilde{c}_{\lambda,r}(x_\lambda)\|^2.$$

Si δ_0 est bornée inférieurement, cette inégalité implique la convergence de $\tilde{c}_{\lambda,r}(x_\lambda)$ vers zéro. Elle donne aussi une estimation de la vitesse de décroissance de $\|\tilde{c}_{\lambda,r}(x_\lambda)\|$, qui est en $O(r^{-1/2})$, d'où l'intérêt de prendre r grand. Une grande valeur de r rend par ailleurs la minimisation de ℓ_r souvent plus difficile, ce qui nécessite de trouver un compromis.

13.7.3 L'algorithme d'Arrow-Hurwicz

Algorithme 13.34 (Arrow-Hurwicz)

1. Initialisation : choix de $\lambda_1 \in \Lambda$ et de $x_1 \in X$;

2. Pour $k = 1, 2, \ldots$ faire :
   2.1. $x_{k+1} = P_X\left(x_k - \alpha_k^1 \nabla_x \ell(x_k, \lambda_k)\right)$;
   2.2. $\lambda_{k+1} = P_\Lambda\left(\lambda_k + \alpha_k^2 \nabla_\lambda \ell(x_{k+1}, \lambda_k)\right)$;
   2.3. Si (x_{k+1}, λ_{k+1}) est satisfaisant on s'arrête.

Cet algorithme est très semblable à l'algorithme 13.30 mais on ne fait plus qu'un seul pas de minimisation en x. Dans le cas convexe, on montre que l'on a convergence de la méthode si α_k^1 et α_k^2 sont pris assez petits.

Sans hypothèse de forte convexité-concavité, l'algorithme d'Arrow-Hurwicz a peu de chance de converger. En effet, si l'on cherche à trouver l'unique point-selle $(0, 0) \in \mathbb{E}^2$ de la fonction $(x, y) \in \mathbb{E}^2 \mapsto \varphi(x, y) = \langle x, y\rangle$, définie sur un espace euclidien $\mathbb{E}$ de produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle$, l'algorithme d'Arrow-Hurwicz avec pas infinitésimal devient l'équation différentielle suivante

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = -\alpha\, y \qquad \text{et} \qquad \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = \alpha\, x$$

où $\alpha > 0$. Comme $(\|x\|^2 + \|y\|^2)' = 2(\langle x, x'\rangle + \langle y, y'\rangle) = 0$, les trajectoires sont sur des sphères et ne convergent donc pas vers l'unique point-selle [15 ; 1992].

Notes

La dualité min-max (section 13.1) remonte au moins à l'*identité du minimax de von Neumann* [537 ; 1928] (exercice 15.12), qui considère le cas où φ est bilinéaire et les ensembles X et Y sont des simplexes de dimension finie. Le théorème 13.6 sur l'existence de point-selle est une généralisation de cette identité (voir Sion [494 ; 1958] pour une version plus générale, démontrée simplement par Komiya [336 ; 1988], et Brézis [78 ; 1973] dont nous avons suivi la démonstration). La dualité par perturbation (section 13.2) a été introduite par Rockafellar [461, 462 ; 1969-1970]. La dualité de Fenchel (section 13.3) a débuté avec le travail de Fenchel [188, 189 ; 1949-1951], puis étendue par Rockafellar [462, 467 ; 1970-1974]. La section 13.4 présentant la dualité de Toland est adaptée de [520 ; 1978].

Sur la dualité en général, on pourra consulter l'ouvrage d'Hiriart-Urruty et Lemaréchal [295 ; chapitre XII] (problèmes convexes) et les monographies de Rockafellar [467], de Walk [539] et Goh et Yang [237] qui considèrent aussi les inéquations variationnelles. La théorie est présentée en dimension infinie par Laurent [354 ; 1972] et Ekeland et Temam [177 ; 1974].

Nous l'avons déjà mentionné au chapitre 12 : le lagrangien augmenté (13.39), identique à (12.21), a été proposé par Rockafellar [463, 464 ; 1971-1973]. Nous avons suivi ici l'approche par perturbation de [464 ; 1973]. La proposition 13.25 est en partie due à Arrow, Gould et Howe [20 ; 1973] qui ont montré que, sous les conditions énoncées, $(\bar{x}, \bar{\lambda})$ est point-selle de $\ell_r(x, \lambda)$ sur $B(\bar{x}, \varepsilon) \times (\mathbb{R}^{m_E} \times \mathbb{R}_+^{m_I})$; la restriction $\lambda_I \geqslant 0$ n'est pas nécessaire comme l'avait déjà observé Rockafellar [464 ; 1973] dans le cas convexe. Comme autre contribution intéressante, citons [387 ; 2008].

Les algorithmes fondés sur la dualité n'ont été ici qu'esquissés. Pour leur utilisation dans la résolution de problèmes quadratiques, on pourra consulter la revue de Lin

et Pang [368 ; 1987], [146 ; 2005] (avec le lagrangien augmenté). Pour des problèmes plus généraux, la non-différentiabilité de la fonction duale, lorsqu'elle est présente, complique évidemment beaucoup cette approche et il faut alors recourir à des algorithmes adaptés. La *méthode de faisceaux* en est un exemple ; elle est étudiée en détail dans [295 ; 1993, chapitres XIV et XV]. L'utilisation de la dualité lagrangienne pour résoudre des problèmes variés est passée en revue par Lemaréchal [359 ; 2001]. Une autre possibilité est d'utiliser une fonction de couplage φ autre que le lagrangien, de manière à rendre la fonction duale différentiable. On l'a vu, le lagrangien augmenté a cette propriété (voir aussi [465 ; 1973]). D'autres fonctions partageant cette propriété et ayant divers avantages sont étudiées dans le livre de Gol'shtein et Treti'akov [247 ; 1996, section 2.5] et dans les articles d'Auslender, Ben-Tiba et Teboulle [27 ; 1999] et d'Auslender et Teboulle [25 ; 2000].

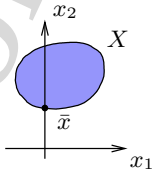
La présentation de la décomposition de Benders à la section **??**, qui remonte à [38 ; 1962], synthétise assez fidèlement [219 ; 1972].

Les techniques de dualité s'utilisent aussi pour résoudre des problèmes de grande taille décomposables. Par exemple l'algorithme du *recouvrement progressif* [472 ; 1991] est adapté aux problèmes d'*optimisation stochastique* discrétisés sur des *arbres de scénarios*.

Exercices

13.1. *Dualisation d'un problème dans* $\mathbb{R}^2$ [46]. Soit X une partie quelconque de $\mathbb{R}^2$. On considère le problème :

$$(P) \quad \begin{cases} \inf\ x_2 \\ x \in X \\ x_1 = 0. \end{cases}$$



1) En dualisant la contrainte d'égalité par le lagrangien ordinaire, montrez que le problème dual consiste à trouver la droite de $\mathbb{R}^2$ qui est en-dessous de X et qui rencontre l'axe des ordonnées le plus haut possible.
2) Montrez que si X est un convexe fermé, si $\{x_2 \in \mathbb{R}\colon (0, x_2) \in X\}$ est borné inférieurement et si X a un point d'abscisse < 0 et un point d'abscisse > 0, alors le lagrangien a un point-selle.
3) En choisissant des ensembles X particuliers, montrez que l'on peut rencontrer les situations suivantes.
   (a) Il y a un saut de dualité et les solutions du problème interne $\inf_{x\in X}(\bar{\lambda}x_1 + x_2)$, où $\bar{\lambda}$ est une solution duale, ne sont pas solutions de (P).
   (b) Le lagrangien a un point-selle, mais certaines solutions du problème interne $\inf_{x\in X}(\bar{\lambda}x_1 + x_2)$, où $\bar{\lambda}$ est une solution duale, ne sont pas solutions de (P).
   (c) Tout point de $\mathbb{R}$ est solution duale.
   (d) Le problème primal a une (ou n'a pas de) solution, la valeur optimale primale est finie, le problème dual n'a pas de solution et il n'y a pas de saut de dualité.
4) Dualisez la contrainte « $x_1 = 0$ » par le lagrangien augmenté et donnez une interprétation géométrique du problème dual. Donnez un exemple d'ensemble X

pour lequel il n'y a pas de saut de dualité avec cette dualisation par le lagrangien augmenté, alors qu'il y en aurait un avec la dualisation par le lagrangien ordinaire.

Remarque. Cet exercice décrit bien ce qui peut se passer lors de la dualisation de contraintes d'égalité. C'est alors l'épigraphe de la fonction valeur primale qui tient lieu d'ensemble X.

13.2. *Dualisation lagrangienne de problèmes classiques.* Écrire le dual lagrangien des problèmes suivants.

1) Le problème d'optimisation linéaire en $x \in \mathbb{R}^n$:

$$\begin{cases} \inf\ c^\mathsf{T} x \\ Ax = b \\ x \geqslant 0, \end{cases}$$

où $c \in \mathbb{R}^n$, A est une matrice $m \times n$ et $b \in \mathbb{R}^m$.

2) Un dual du dual du problème linéaire défini au point 1.

3) Le problème généralisant le problème linéaire défini au point 1 : on se donne deux espaces euclidiens $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$, $c \in \mathbb{E}$, un cône non vide K de $\mathbb{E}$, $b \in \mathbb{F}$, une application linéaire $A : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ et on considère le problème $\inf\{\langle c, x\rangle : x \in \mathbb{R}^n,\ Ax = b,\ x \in K\}$. On dualisera soit la contrainte d'égalité, soit les deux contraintes (on suppose alors que K est aussi convexe et fermé), pour retrouver le même problème dual.

4) Les problèmes d'optimisation quadratique

$$\inf\{g^\mathsf{T} x + \tfrac{1}{2} x^\mathsf{T} H x : x \in \mathbb{R}^n,\ Ax = b\},$$
$$\inf\{g^\mathsf{T} x + \tfrac{1}{2} x^\mathsf{T} H x : x \in \mathbb{R}^n,\ Ax = b,\ x \geqslant 0\},$$

où $g \in \mathbb{R}^n$, H est une matrice d'ordre n symétrique semi-définie positive, A est une matrice $m \times n$ et $b \in \mathbb{R}^m$.

13.3. *Dualisation lagrangienne de la projection sur un polyèdre convexe* (inspiré de [366]). On considère le problème de la projection sur un polyèdre convexe, qui peut s'écrire de la manière suivante

$$\begin{cases} \inf_{x \in \mathbb{R}^n}\ \frac{1}{2}\|x - z\|^2 \\ Ax = b \\ x \geqslant 0, \end{cases} \tag{13.52}$$

où $z \in \mathbb{R}^n$ est donné, $\|\cdot\|$ est la norme euclidienne, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ et $b \in \mathbb{R}^m$. On suppose que l'ensemble admissible du problème est non vide : il existe un $x_0 \geqslant 0$ tel que $Ax_0 = b$.

1) Dans quel sens peut on dire que le dual lagrangien du problème (13.52) est le problème suivant :

$$\sup_{y \in \mathbb{R}^m} \left(-\frac{1}{2}\|(A^\mathsf{T} y + z)^+\|^2 + b^\mathsf{T} y + \frac{1}{2}\|z\|^2 \right). \tag{13.53}$$

2) Montrez qu'il n'y a pas de saut de dualité entre (13.52) et (13.53).

3) Montrez que les propriétés suivantes sont équivalentes :
   (a) l'ensemble des solutions de (13.53) est borné,
   (b) $\forall\, p \neq 0$ tel que $A^\mathsf{T} p \leqslant 0$, on a $b^\mathsf{T} p < 0$,
   (c) A est surjective et il existe un $x > 0$ tel que $Ax = b$.

4) Le but de ce numéro est d'examiner un dual de (13.52) de la forme (13.53) mais avec y restreint à l'image de A.

4.1) Montrez que l'on peut aussi prendre comme dual de (13.52) le problème

$$\sup_{y\in\mathcal{R}(A)} \left(-\frac{1}{2}\|(A^\mathsf{T}y+z)^+\|^2 + b^\mathsf{T}y + \frac{1}{2}\|z\|^2\right). \tag{13.54}$$

4.2) Montrez qu'il n'y a pas non plus de saut de dualité entre (13.52) et (13.54).

4.3) Montrez que les propriétés suivantes sont équivalentes :

(a) l'ensemble des solutions de (13.54) est borné,

(b) $\forall\, p \in \mathcal{R}(A) \setminus \{0\}$ tel que $A^\mathsf{T}p \leqslant 0$, on a $b^\mathsf{T}p < 0$,

(c) il existe un $x > 0$ tel que $Ax = b$.

13.4. *Dualité lagrangienne en optimisation conique.* Soient $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ deux espaces euclidiens, dont on note $\langle\cdot,\cdot\rangle$ les produits scalaires. Soit K un cône non vide de $\mathbb{E}$, $c \in \mathbb{E}$, $b \in \mathbb{F}$ et A une application linéaire de $\mathbb{E}$ dans $\mathbb{F}$. On note K^+ le cône dual de K et $A^* : \mathbb{F} \to \mathbb{E}$ l'application linéaire adjointe de A. On considère le problème en $x \in \mathbb{E}$ suivant :

$$\begin{cases} \inf \langle c, x\rangle \\ Ax = b \\ x \in K. \end{cases} \tag{13.55}$$

1) *Dualisation de la contrainte d'égalité.* En dualisant la contrainte d'égalité avec le lagrangien classique $\ell(x,y) = \langle c,x\rangle - \langle y, Ax-b\rangle$, montrez que l'on obtient comme problème dual

$$\begin{cases} \sup \langle b, y\rangle \\ A^*y + s = c \\ s \in K^+, \end{cases} \tag{13.56}$$

où $K^+ := \{s \in \mathbb{R}^n : \langle s, x\rangle \geqslant 0,\ \forall x \in K\}$ est le cône dual de K.

2) *Dualisation de la contrainte d'appartenance au cône.* Supposons que K soit un cône convexe fermé non vide. Montrez que l'on retrouve le dual (13.56) si l'on dualise la contrainte linéaire *et* la contrainte d'appartenance au cône.

3) On suppose à présent que $\mathbb{E} = \mathbb{R}^3$, $\mathbb{F} = \mathbb{R}$, $A(x) = x_1 - 1$ et $K = \mathbb{R}^3_\triangledown := \{x \in \mathbb{R}^3 : x_1^2 + x_2^2 \leqslant x_3^2,\ x_3 \geqslant 0\}$ (voir l'exercice 2.32). Montrez que dans ce cas (13.55) n'a pas de solution, que son dual (13.56) en a une et qu'il n'y a pas de saut de dualité [457].

13.5. *Dualisation lagrangienne du problème de région de confiance.* On considère le problème de région de confiance (**??**), c'est-à-dire $\min\{g^\mathsf{T}x + \frac{1}{2}x^\mathsf{T}Hx : x \in \mathbb{R}^n,\ \|x\|_2 \leqslant \Delta\}$, dans lequel $g \in \mathbb{R}^n$, la matrice symétrique $H \in \mathcal{S}^n$ n'est pas nécessairement semi-définie positive (le problème peut être non convexe) et le rayon de confiance $\Delta > 0$. Écrivez le dual lagrangien de ce problème et montrez que

$$\min_{\|x\|\leqslant\Delta} \left(g^\mathsf{T}x + \frac{1}{2}x^\mathsf{T}Hx\right) = \max_{\substack{\lambda\geqslant 0 \\ H+\lambda I\succcurlyeq 0 \\ g\in\mathcal{R}(H+\lambda I)}} -\left(g^\mathsf{T}(H+\lambda I)^\dagger g + \frac{\Delta}{2}\lambda\right). \tag{13.57}$$

Observez que cette identité n'est plus nécessairement vraie si $\Delta = 0$.

13.6. *Dualisation wolfienne d'un problème convexe différentiable.* On considère les problèmes (P) et (D) suivants :

$$(P)\quad \begin{cases} \inf_{x\in\mathbb{R}^n} f(x) \\ c(x) \leqslant 0 \end{cases} \qquad \text{et} \qquad (D)\quad \begin{cases} \sup_{(x,\lambda)\in\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^m} \ell(x,\lambda) \\ \lambda \geqslant 0 \\ \nabla_x \ell(x,\lambda) = 0, \end{cases}$$

dans lesquels $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ est une fonction convexe différentiable, les composantes de $c : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ sont convexes différentiables et $\ell : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m : (x,\lambda) \mapsto \ell(x,\lambda) =$

$f(x)+\lambda^{\mathsf{T}}c(x)$ est le lagrangien du problème (P). On note $\mathrm{val}(P)$ et $\mathrm{val}(D)$ les valeurs optimales de (P) et de (D), respectivement.

1) *Dualité faible.* Montrez que $\mathrm{val}(D) \leqslant \mathrm{val}(P)$.
2) *Dualité forte I.* Montrez que si la contrainte de (P) est qualifiée au sens de la définition 4.28 en une solution x_* de (P), alors
   - il existe $\lambda_* \in \mathbb{R}^m$ tel que (x_*, λ_*) est solution de (D),
   - $\mathrm{val}(D) = \mathrm{val}(P)$.
3) *Dualité forte II.* Montrez que si la contrainte c de (P) est affine mais non réalisable (donc $\mathrm{val}(P) = +\infty$) et si les contraintes de (D) sont réalisables (donc $\mathrm{val}(D) > -\infty$), alors $\mathrm{val}(D) = +\infty$.
4) *Certificat d'inconsistance.* Montrez que si l'on peut trouver un couple $(x, \lambda) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$ tel que $\lambda \geqslant 0$, $\lambda^{\mathsf{T}}c(x) > 0$ et $c'(x)^{\mathsf{T}}\lambda = 0$, alors il n'existe pas de x tel que $c(x) \leqslant 0$.

Remarques.

1) Le dual de Wolfe (D) se distingue du dual de Lagrange (13.47) par un critère à minimiser explicite (alors que la fonction duale δ peut n'être connue que numériquement et évaluable algorithmiquement, pas analytiquement avec évaluation rapide), mais avec une contrainte d'égalité non linéaire « $\nabla_x \ell(x, \lambda) = 0$ », qui peut être compliquée à prendre en compte numériquement (elle est non linéaire, non convexe, et sa dérivée fait intervenir les dérivées secondes de f et c). Il se peut d'ailleurs que (P) soit plus simple à résoudre numériquement que (D).
2) Cette dualisation permet d'avoir une *borne inférieure* sur $\mathrm{val}(P)$, puisqu'elle nous apprend que, *pour les problèmes convexes*, $\ell(x, \lambda)$ est une telle borne inférieure lorsque $\lambda \geqslant 0$ et $\nabla_x \ell(x, \lambda) = 0$.
3) En présence de contraintes de borne additionnelles dans (P), on peut éliminer la contrainte d'égalité du problème dual et obtenir ainsi une borne inférieure sur la valeur optimale primal par simple évaluation de l'objectif dual. Cette borne inférieure de $\mathrm{val}(P)$ peut toutefois aussi s'obtenir en utilisant les bornes sur x et des minorantes affines exactes de f. [72]

13.7. *Dualisation lagrangienne d'un problème homogène* (inspiré de [351]). On rappelle qu'une fonction $\varphi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ est dite *positivement homogène* de degré $p \in \mathbb{R}$ si pour tout $x \in \mathbb{R}^n$ et pour tout réel $t \geqslant 0$, on a $\varphi(tx) = t^p \varphi(x)$. On considère le problème d'optimisation en $x \in \mathbb{R}^n$ suivant :

$$(P) \quad \begin{cases} \inf\ f(x) \\ c(x) \leqslant b, \end{cases}$$

où $b \in \mathbb{R}^m$ et les fonctions $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ et $c : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ sont différentiables et homogènes de degré $p > 0$ (le même degré strictement positif pour les deux fonctions). On note $(x, \lambda) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \mapsto \ell(x, \lambda) := f(x) + \lambda^{\mathsf{T}}(c(x) - b)$ le lagrangien du problème. Montrez que le dual lagrangien de (P) est le problème en $\lambda \in \mathbb{R}^m$ *convexe* suivant :

$$(D) \quad \begin{cases} \sup\ -b^{\mathsf{T}}\lambda \\ \lambda \geqslant 0 \\ \ell_h(x, \lambda) \geqslant 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n, \end{cases}$$

où $(x, \lambda) \mapsto \ell_h(x, \lambda) = f(x) + \lambda^{\mathsf{T}}c(x)$ est la partie homogène en x de ℓ.

13.8. *Théorème d'Everett.* On considère le problème

$$(P_{EI}) \quad \begin{cases} \min\ f(x) \\ c_E(x) = 0 \\ c_I(x) \leqslant 0, \end{cases}$$

où les fonctions $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $c_E : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^{m_E}$ et $c_I : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^{m_I}$ n'ont pas de propriété particulière (de différentiabilité ou de convexité). On note $c(x) := (c_E(x), c_I(x)) \in \mathbb{R}^m$ ($m := m_E + m_I$), $(x, \lambda) \mapsto \ell(x, \lambda) = f(x) + \lambda^\mathsf{T} c(x)$ le lagrangien,

$$\lambda \mapsto \delta(\lambda) := -\inf_{x \in \mathbb{R}^n} \ell(x, \lambda) \tag{13.58}$$

la fonction duale et $\inf\{\delta(\lambda) : \lambda \in \mathbb{R}^m,\ \lambda_I \geqslant 0\}$ le problème dual. Le problème à droite dans (13.58) est appelé problème de Lagrange. Démontrez les affirmations suivantes.

1) Si $\lambda_I \geqslant 0$ et si x_λ est solution du problème de Lagrange, alors x_λ est solution du problème (P_{EI}) perturbé suivant

$$\begin{cases} \min f(x) \\ c_E(x) = c_E(x_\lambda) \\ c_i(x) \leqslant c_i(x_\lambda), \quad \forall i \in I \text{ tel que } \lambda_i > 0. \end{cases} \tag{13.59}$$

2) Si $\bar{x}$ est solution du problème de Lagrange avec un $\lambda = \bar{\lambda}$ et si $c_E(\bar{x}) = 0$ et $0 \leqslant \bar{\lambda}_I \perp (-c_I(\bar{x})) \geqslant 0$, alors $\bar{x}$ est solution de (P_{EI}).

13.9. *Convergence des multiplicateurs dans l'algorithme 13.30.* On reprend le cadre défini par la proposition 13.31 en supposant en plus que les gradients des contraintes actives en $\bar{x}$ sont linéairement indépendants. Alors il y a un unique point-selle $(\bar{x}, \bar{\lambda})$ du lagrangien et la suite $\{\lambda_k\}$ générée par l'algorithme 13.30 converge vers $\bar{\lambda}$.

13.10. *Norme nucléaire et rang* [455]. On considère l'espace vectoriel $\mathbb{R}^{m\times n}$ des matrices réelles de type $m \times n$, muni de différentes normes :

- la norme de Frobenius (B.8), notée $\|\cdot\|_F$, qui est associée au produit scalaire (B.7), noté $\langle \cdot, \cdot \rangle$,
- la norme d'opérateur de $(\mathbb{R}^n, \|\cdot\|_2)$ dans $(\mathbb{R}^m, \|\cdot\|_2)$, où $\|\cdot\|_2$ est la norme euclidienne, dont la valeur en $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ est notée ici

$$\|A\| := \sup_{\|x\|_2 \leqslant 1} \|Ax\|_2,$$

- la *norme nucléaire*, qui est la norme duale de la norme d'opérateur pour le produit scalaire (B.7) de $\mathbb{R}^{m\times n}$ et dont la valeur en $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ est notée et définie par

$$\|A\|_* := \sup_{\|B\| \leqslant 1} \langle A, B \rangle. \tag{13.60}$$

On note $\sigma(A)$ le vecteur formé des valeurs singulières de A (section B.5.4), rangées par ordre décroissant : $\sigma_1(A) \geqslant \sigma_2(A) \geqslant \cdots \geqslant 0$.

1) Montrez que

$$\|A\| = \|\sigma(A)\|_\infty, \qquad \|A\|_F = \|\sigma(A)\|_2 \qquad \text{et} \qquad \|A\|_* = \|\sigma(A)\|_1. \tag{13.61}$$

2) Montrez que

$$\|A\| \leqslant \|A\|_F \leqslant \|A\|_* \leqslant \mathrm{rg}(A)^{1/2} \|A\|_F \leqslant \mathrm{rg}(A) \|A\|. \tag{13.62}$$

L'inégalité $\|A\|_* \leqslant \mathrm{rg}(A)\|A\|$ du point 2 montre que le rang de A est minoré par $\|A\|_*$ sur la boule unité $\mathcal{B} := \{A \in \mathbb{R}^{m\times n} : \|A\| \leqslant 1\}$. Nous allons montrer que $\|\cdot\|_*$ est en réalité la plus grande fonction convexe fermée minorant le rang sur $\mathcal{B}$. On est obligé de restreindre le rang à une partie de $\mathbb{R}^{m\times n}$, car sinon sa biconjuguée est nulle et donc de peu d'intérêt.

3) Montrez que $\mathrm{rg}^{**} = 0$.

On introduit donc la fonction $f = \mathrm{rg} + \mathcal{I}_{\mathcal{B}} : \mathbb{R}^{m\times n} \to \overline{\mathbb{R}}$, où $\mathcal{I}_{\mathcal{B}}$ est l'indicatrice de $\mathcal{B}$.

4) Montrez que $f^*(A^*) = \|(\sigma(A^*) - e)^+\|_1$.

5) Montrez que $f^{**} = \|\cdot\|_* + \mathcal{I}_{\mathcal{B}}$.

13.11. *Poursuite de base ou recouvrement ℓ_1* [104]. La *poursuite de base* ou problème de *recouvrement ℓ_1* consiste à recouvrer un vecteur $x \in \mathbb{R}^n$ satisfaisant une contrainte affine et de *norme ℓ_1* minimale. Il s'écrit donc

$$\begin{cases} \inf_{x\in\mathbb{R}^n} \ \|x\|_1 \\ Ax = b, \end{cases} \tag{13.63}$$

où $A : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ est linéaire et $b \in \mathbb{R}^m$. On munit $\mathbb{R}^n$ et $\mathbb{R}^m$ du produit scalaire euclidien. Montrez que le dual lagrangien de ce problème s'écrit

$$\begin{cases} \sup_{y\in\mathbb{R}^m} \ b^{\mathsf{T}} y \\ \|A^{\mathsf{T}} y\|_\infty \leqslant 1. \end{cases} \tag{13.64}$$

13.12. *Recouvrement nucléaire* [101]. Le problème de *recouvrement nucléaire* consiste à recouvrer une matrice $X \in \mathbb{R}^{m\times n}$ satisfaisant une contrainte affine et de *norme nucléaire* minimale. Il s'écrit donc

$$\begin{cases} \inf_{X\in\mathbb{R}^{m\times n}} \ \|X\|_* \\ \mathcal{A}(X) = b, \end{cases} \tag{13.65}$$

où $\|\cdot\|_*$ est la norme nucléaire (13.60), $\mathcal{A} : \mathbb{R}^{m\times n} \to \mathbb{R}^p$ est linéaire et $b \in \mathbb{R}^p$. Montrez que le dual lagrangien de ce problème s'écrit

$$\begin{cases} \sup_{y\in\mathbb{R}^p} \ \langle b, y\rangle \\ \|\mathcal{A}^*(y)\| \leqslant 1, \end{cases} \tag{13.66}$$

où $\mathcal{A}^*$ est l'adjointe de $\mathcal{A}$ lorsque $\mathbb{R}^{m\times n}$ est muni du produit scalaire (B.7) et $\mathbb{R}^p$ est muni du produit scalaire aussi noté $\langle\cdot,\cdot\rangle$ dans (13.66).

14 Optimisation quadratique successive

Dans ce chapitre, nous étudions une famille d'*algorithmes newtoniens*, qui procèdent donc par linéarisation de fonctions, pour résoudre les problèmes d'optimisation avec contraintes d'égalité et d'inégalité. Les algorithmes requièrent la résolution de problèmes d'optimisation quadratique à chaque itération, de problèmes non linéaires donc, mais qui sont plus simples que le problème original. On s'écarte ainsi des méthodes de Newton en résolution de systèmes d'équations différentiables ou de problèmes d'optimisation, décritent au chapitre 9, qui ne requièrent que la résolution d'un système linéaire à chaque itération.

L'approche étudiée est suffisamment générale pour pouvoir considérer les problèmes qui s'écrivent sous la forme suivante

$$(P_{EI}) \quad \begin{cases} \min\ f(x) \\ c_i(x) = 0, \quad i \in E \\ c_i(x) \leqslant 0, \quad i \in I, \end{cases}$$

où les ensembles d'indices E et I forment une partition de $[1:m] = E \cup I$ ($E \cap I = \varnothing$). Les paramètres x à optimiser sont dans un espace euclidien $\mathbb{E}$ et les fonctions $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R}$ et $c_i : \mathbb{E} \to \mathbb{R}$ définissant le critère et les contraintes sont supposées régulières. Les versions quasi-newtoniennes seront aussi étudiées (section 14.5).

Les notations sont celles déjà introduites à la section 4. On rassemble les contraintes d'égalité et d'inégalité en une seule fonction $c : \mathbb{E} \to \mathbb{R}^m$. Si $v \in \mathbb{R}^m$, on note v_E (resp. v_I) le vecteur de $\mathbb{R}^{|E|}$ (resp. $\mathbb{R}^{|I|}$) formé des composantes v_i de v avec $i \in E$ (resp. $i \in I$). Les fonctions définissant les contraintes d'égalité et d'inégalité seront donc notées c_E et c_I, respectivement. À un vecteur $v \in \mathbb{R}^m$, on associe le vecteur $v^\# \in \mathbb{R}^m$, défini par

$$(v^\#)_i = \begin{cases} v_i & \text{si } i \in E \\ v_i^+ & \text{si } i \in I, \end{cases}$$

où $v_i^+ = \max(0, v_i)$. Avec cette notation, les contraintes de (P_{EI}) s'écrivent $c(x)^\# = 0$, qui n'a d'intérêt que par sa compacité, car la fonction $x \mapsto c(x)^\#$ est en général non différentiable.

Si la présence de contraintes d'égalité dans (P_{EI}) rend ce problème plus difficile à résoudre qu'un problème sans contrainte. Le saut de complexité apporté par la présence des contraintes d'inégalité est incomparablement plus important que celui dû aux contraintes d'égalité.

14.1 L'algorithme OQS et sa convergence locale

Nous présentons l'algorithme OQS comme un algorithme de Josephy-Newton sur le système d'optimalité, lequel peut en effet s'écrire comme un problème d'inclusion, et même de complémentarité non linéaire (section 14.1.1). Sa convergence locale peut alors se déduire de celle de l'algorithme de Josephy-Newton (théorème **??**), pourvu que le point stationnaire considéré soit semi-stable et hémi-stable. On montre que c'est effectivement le cas lorsque celui-ci correspond à un minimum local de (P_{EI}) vérifiant les conditions d'optimalité du second ordre semi-fortes (section 14.1.2).

14.1.1 L'algorithme OQS

Par définition, un couple stationnaire de (P_{EI}) est un couple (x,λ) qui vérifie le système d'optimalité (4.32), c'est-à-dire

$$\begin{cases} \nabla f(x) + c'(x)^*\lambda = 0 \\ c_E(x) = 0 \\ 0 \leqslant \lambda \perp c_I(x) \leqslant 0. \end{cases} \tag{14.1}$$

On peut récrire ce système comme l'inclusion ou le problème de complémentarité en $z := (x,\lambda)$ ci-dessous

$$F(z) + \mathrm{N}_K(z) \ni 0 \qquad \text{ou} \qquad K \ni z \perp F(z) \in K^+, \tag{14.2a}$$

avec

$$F(z) = \begin{pmatrix} \nabla f(x) + c'(x)^*\lambda \\ -c(x) \end{pmatrix} \qquad \text{et} \qquad K = \mathbb{E} \times (\mathbb{R}^{m_E} \times \mathbb{R}^{m_I}_+). \tag{14.2b}$$

En effet, alors $K^+ = \{0_{\mathbb{E}}\} \times (\{0_{\mathbb{R}^{m_E}}\} \times \mathbb{R}^{m_I}_+)$ et

- $(x,\lambda) \in K$ s'écrit $\lambda_I \geqslant 0$,
- $F(x,\lambda) \in K^+$ s'écrit $\nabla_x \ell(x,\lambda) = 0$, $c_E(x) = 0$ et $c_I(x) \leqslant 0$,
- $(x,\lambda) \perp F(x,\lambda)$ se ramène alors à la relation de complémentarité $\lambda_I \perp c_I(x)$.

On retrouve donc bien (14.1).

L'algorithme de Josephy-Newton (**??**) appliqué à l'inclusion ou au problème de complémentarité (14.2) consiste à déterminer l'itéré suivant $z_{k+1} := (x_{k+1},\lambda_{k+1})$ à partir de l'itéré courant $z_k := (x_k,\lambda_k)$ en résolvant l'inclusion linéarisée en $z := (x,\lambda)$ ci-dessous

$$F(z_k) + F'(z_k)(z - z_k) + \mathrm{N}_K(z) \ni 0 \tag{14.3a}$$

ou son problème de complémentarité équivalent

$$K \ni z \perp \big(F(z_k) + F'(z_k)(z - z_k)\big) \in K^+. \tag{14.3b}$$

Voyons comment s'écrit cet algorithme lorsque (F,K) est donné par (14.2b). Observons que

$$F'(x,\lambda) = \begin{pmatrix} L(x,\lambda) & c'(x)^* \\ -c'(x) & 0 \end{pmatrix}, \tag{14.4}$$

où l'on a simplifié l'écriture en introduisant

$$L(x,\lambda) := \nabla^2_{xx}\ell(x,\lambda).$$

La condition $(x,\lambda) \in K$ s'écrit comme précédemment

$$\lambda_I \geqslant 0. \tag{14.5a}$$

La condition $F(z_k) + F'(z_k)(z - z_k) \in K^+$ se traduit par

$$\nabla f(x_k) + c'(x_k)^*\lambda_k + L(x_k,\lambda_k)(x - x_k) + c'(x_k)^*(\lambda - \lambda_k) = 0, \tag{14.5b}$$
$$c_E(x_k) + c'_E(x_k)(x - x_k) = 0, \tag{14.5c}$$
$$c_I(x_k) + c'_I(x_k)(x - x_k) \leqslant 0. \tag{14.5d}$$

Enfin, la relation d'orthogonaité $(x,\lambda) \perp (F(z_k) + F'(z_k)(z - z_k))$ s'exprime alors par

$$\lambda_I \perp [c_I(x_k) + c'_I(x_k)(x - x_k)]. \tag{14.5e}$$

Si l'on élimine λ_k de (14.5b), ce système peut se récrire

$$\begin{cases} \nabla f(x_k) + L(x_k,\lambda_k)(x - x_k) + c'(x_k)^*\lambda = 0, \\ c_E(x_k) + c'_E(x_k)(x - x_k) = 0, \\ 0 \leqslant \lambda_I \perp [c_I(x_k) + c'_I(x_k)(x - x_k)] \leqslant 0. \end{cases} \tag{14.6}$$

Le point important est maintenant de constater que le système (14.6) est formé des conditions d'optimalité de ce que l'on appelle le *problème quadratique osculateur* de (P_{EI}), à savoir

$$\boxed{\begin{cases} \min_x \ \nabla f(x_k)^{\mathsf{T}}(x - x_k) + \frac{1}{2}(x - x_k)^{\mathsf{T}}\nabla^2_{xx}(x_k,\lambda)(x - x_k) \\ c_E(x_k) + c'(x_k)_E(x - x_k) = 0 \\ c_I(x_k) + c'(x_k)_I(x - x_k) \leqslant 0. \end{cases}} \tag{14.7}$$

On peut à présent préciser l'itération de l'algorithme OQS local (c'est-à-dire sans technique de globalisation de la convergence).

Algorithme 14.1 (OQS local) Une itération passe de l'itéré courant $(x_k,\lambda_k) \in \mathbb{E} \times \mathbb{R}^m$ à l'itéré suivant (x_{k+1},λ_{k+1}) par les étapes suivantes :
1. *Test d'arrêt* : si le couple (x_k,λ_k) est satisfaisant, on s'arrête.
2. *Nouvel itéré* : On prend comme nouvel itéré (x_{k+1},λ_{k+1}) une solution primale duale du problème quadratique osculateur (14.7).

L'algorithme OQS décompose donc la réslution du problème d'optimisation non-linéaire (P_{EI}) en une suite de problème d'optimisation quadratique, plus imples à résoudre que le problème original.

14.1.2 Convergence locale

Définition 14.2 On dit qu'un couple stationnaire (x_*,λ_*) de (P_{EI}) est *semi-stable* (resp. *hémi-stable*) si ce couple est une solution semi-stable (resp. hémi-stable) de l'inclusion dans (14.2a) avec F et K donnés par (14.2b).

Si (x_*, λ_*) vérifie les conditions de KKT, on a

$$F(x_*, \lambda_*) = \begin{pmatrix} 0_{\mathbb{E}} \\ 0_{\mathbb{R}^{m_E}} \\ -c_I(x_*) \end{pmatrix}, \tag{14.8}$$

$$F(x_*, \lambda_*) + F'(x_*, \lambda_*)(d, \mu) = \begin{pmatrix} L_* d + c'(x_*)^* \mu \\ -c'_E(x_*) d \\ -c_I(x_*) - c'_I(x_*) d \end{pmatrix}. \tag{14.9}$$

où l'on a utilisé (14.4) et posé $L_* := L(x_*, \lambda_*) := \nabla^2_{xx} \ell(x_*, \lambda_*)$. La condition $F(x_*, \lambda_*) + F'(x_*, \lambda_*)(d, \mu) + \mathrm{N}_K(x_*, \lambda_*) \ni 0$ s'écrit

$$\begin{gathered} L_* d + c'(x_*)^* \mu = 0, \\ c'_{E \cup I_*^{0+}}(x_*) d = 0, \quad c'_{I_*^{00}}(x_*) d \leqslant 0, \quad c_{I \setminus I_*^0}(x_*) + c'_{I \setminus I_*^0}(x_*) d \leqslant 0. \end{gathered}$$

Le résultat suivant analyse la semi-stabilité d'un couple stationnaire pour cette inclusion.

Proposition 14.3 (semi-stabilité d'une solution primale-duale) *Si $z_* := (x_*, \lambda_*)$ est une solution primale-duale de (P_{EI}), les propriétés suivantes sont équivalentes :*
(i) z_* est une solution primale-duale semi-stable,
(ii) $(d, \mu) = 0$ est l'unique solution du système

$$L_* d + c'(x_*)^* \mu = 0, \tag{14.10a}$$

$$c'_{E \cup I_*^{0+}}(x_*) d = 0, \tag{14.10b}$$

$$\mu_{I_*^{0+}} \geqslant 0, \quad 0 \leqslant \mu_{I_*^{00}} \perp c'_{I_*^{00}}(x_*) d \leqslant 0 \quad \textit{et} \quad \mu_{I \setminus I_*^0} = 0. \tag{14.10c}$$

Démonstration. Par l'équivalence $(i) \Leftrightarrow (ii)$ de la proposition **??**, la semi-stabilité de (x_*, λ_*) est équivalente à

$$\begin{gathered} (d, \mu) = 0 \text{ est solution isolée de} \\ L_* d + c'(x_*)^* \mu = 0 \\ c'_E(x_*) d = 0 \\ c_I(x_*) + c'_I(x_*) d \in \mathrm{N}_{\mathbb{R}^{m_I}_+}(\lambda_* + \mu), \end{gathered} \tag{14.11}$$

où l'on a tenu compte du fait que $\nabla_x \ell(x_*, \lambda_*) = 0$ et $c_E(x_*) = 0$. Il revient au même de dire que les *petites* solutions du système ci-dessus sont nulles. Observons que la dernière condition ci-dessus, celle qu'il faut exprimer autrement, s'écrit aussi

$$0 \leqslant \big(\lambda_* + \mu\big) \perp \big(c_I(x_*) + c'_I(x_*) d\big) \leqslant 0. \tag{14.12}$$

Exploitons cette condition.

- Si $i \in I_*^{0+}$, $c_i(x_*) = 0$ et $(\lambda_*)_i > 0$, si bien que $(\lambda_* + \mu)_i > 0$ pour μ petit et la complémentarité dans (14.12) implique que $c'_i(x_*) d = 0$

- Pour les indices dans I_*^{00}, $c_i(x_*) = 0$ et $(\lambda_*)_i = 0$, si bien que (14.12) implique que $0 \leqslant \mu_{I_*^{00}} \perp c'_{I_*^{00}}(x_*)d \leqslant 0$.
- Si $i \in I \setminus I_*^0$, $c_i(x_*) < 0$ et $(\lambda_*)_i = 0$, si bien que pour d suffisamment petit $c_i(x_*) + c'_i(x_*)d < 0$ et donc la complémentarité dans (14.12) implique que $\mu_i = 0$.

On a donc montré qu'une *petite* solution du système dans (14.11) est solution de (14.10). On montre de la même manière qu'une *petite* solution de (14.10) est solution du système dans (14.11). Dès lors (14.11) revient à dire que $(d, \mu) = 0$ est solution isolée de (14.10).

On conclut en observant que l'ensemble des solutions de (14.10) est un cône, si bien qu'il revient au même de dire que $(d, \mu) = 0$ est solution isolée de (14.10) ou que $(d, \mu) = 0$ est l'unique solution de (14.10). □

On rappelle que le cône critique C_* en une solution locale de (P_{EI}) a été défini en (4.44a) et que L_* est une écriture simplifiée pour la hessienne $\nabla^2_{xx}\ell(x_*, \lambda_*)$ du lagrangien ℓ évaluée en $(x_*, \lambda_*) \in \mathbb{E} \times \mathbb{R}^m$.

Proposition 14.4 (semi-stabilité d'un minimum local) *Si x_* est un minimum local de (P_{EI}) et λ_* est un multiplicateur optimal associé, alors les propriétés suivantes sont équivalentes :*

(i) (x_*, λ_*) est semi-stable,

(ii) λ_* est l'unique multiplicateur associé à x_* et les conditions suffisantes du second ordre sont satisfaites, c'est-à-dire, $\forall\, d \in C_* \setminus \{0\}$, on a $\langle L_* d, d\rangle > 0$.

Démonstration. 1) On exploite l'équivalence $(i) \Leftrightarrow (iii)$ de la proposition **??** pour obtenir une autre expression de la semi-stabilité de (x_*, λ_*). Dans ce but, on pose

$$(d, \mu) := z - z_* = (x, \lambda) - (x_*, \lambda_*)$$

et on observe qu'avec F définie en (14.2b), (14.8) et (14.9), on a

$$\begin{aligned} \langle F'(x_*, \lambda_*)(d, \mu), (d, \mu)\rangle &= \langle L_* d, d\rangle, \\ \langle F(x_*, \lambda_*), (d, \mu)\rangle = 0 \quad &\Longleftrightarrow \quad \mu_{I \setminus I_*^0} = 0. \end{aligned}$$

Par l'équivalence $(i) \Leftrightarrow (iii)$ de la proposition **??**, la semi-stabilité de (x_*, λ_*) est équivalente à

$$\text{on a } \langle L_* d, d\rangle > 0 \text{ pour tout } (d, \mu) \in \mathbb{E} \times \mathbb{R}^m \text{ non nul tel que} \tag{14.13a}$$

$$(\mu + \lambda_*)_I \geqslant 0, \quad \mu_{I \setminus I_*^0} = 0, \tag{14.13b}$$

$$L_* d + c'_{E \cup I_*^0}(x_*)^* \mu = 0, \tag{14.13c}$$

$$d \in C_*, \quad c_{I \setminus I_*^0}(x_*) + c'_{I \setminus I_*^0}(x_*)d \leqslant 0. \tag{14.13d}$$

où $C_* := \{d \in \mathbb{E} : c'_{E \cup I_*^{0+}}(x_*)d = 0,\ c'_{I_*^{00}}(x_*)d \leqslant 0\}$ est le cône critique.

2) $[(i) \Rightarrow (ii)]$ Comme (x_*, λ_*) est semi-stable, c'est une solution *isolée* du système d'optimalité 4.32 (proposition **??**). Par ailleurs, l'ensemble des multiplicateurs associé à x_* est convexe, λ_* est nécessairement l'unique multiplicateur associé à x_*.

L'ensemble des multiplicateurs associés à x_* étant borné (c'est un singleton), les conditions de qualification (QC-MF) ont lieu. On déduit alors de l'optimalité locale de x_* que $\langle L_* d, d\rangle \geqslant 0$ pour toute direction critique $d \in C_*$ (théorème 4.46). Donc si la conclusion n'a pas lieu, il existe une direction $d_1 \in C_* \setminus \{0\}$ telle que $\langle L_* d_1, d_1\rangle = 0$. Cette direction d_1 est donc solution de

$$\begin{cases} \min \langle L_* d, d\rangle \\ c'_{E\cup I_*^{0+}}(x_*)d = 0 \\ c'_{I_*^{00}}(x_*)d \leqslant 0, \end{cases}$$

problème dont les contraintes définissent les directions critiques. Les conditions d'optimalité de ce problème, aux contraintes qualifiées par (QC-A), affirment l'existence d'un multiplicateur $\mu_1 \in \mathbb{R}^m$ tel que l'on ait

$$\begin{gathered} (\mu_1)_{I\setminus I_*^0} = 0, \\ L_* d_1 + c'(x_*)^* \mu_1 = 0, \\ c'_{E\cup I_*^{0+}}(x_*)d_1 = 0, \\ 0 \leqslant (\mu_1)_{I_*^{00}} \perp c'_{I_*^{00}}(x_*)d_1 \leqslant 0. \end{gathered}$$

Alors $(d, \mu) = t(d_1, \mu_1)$, avec $t > 0$ suffisamment petit, vérifie (14.13b)-(14.13d) mais pas la conclusion $\langle L_* d, d\rangle > 0$ dans (14.13a). Cette contradiction montre que les CS2 sont vérifiées.

3) [$(i) \Leftarrow (ii)$] Évidemment, si les CS2 ont lieu, x_* est un minimum local de (P_{EI}) (théorème 4.47).

Pour montrer la semi-stabilité de (x_*, λ_*), on montre que (14.13) a lieu. Soit (d, μ) non nul vérifiant (14.13b)-(14.13d). Il suffit de montrer que $d \neq 0$, car alors $d \in C_* \setminus \{0\}$ et la conclusion $\langle L_* d, d\rangle > 0$ de (14.13a) s'obtient par la CS2 supposée dans (ii). Raisonons par l'absurde en supposant que $d = 0$. Alors $\mu \neq 0$ et il est facile de voir que $\lambda_* + \mu$ serait un autre multiplicateur optimal associé à x_*, ce qui contredirait l'unicité supposée de celui-ci. □

Proposition 14.5 (condition suffisante d'hémi-stabilité) *Si x_* est un minimum local de (P_{EI}) et si (x_*, λ_*) est une solution semi-stable du système d'optimalité (4.32), alors (x_*, λ_*) est hémi-stable.*

Démonstration. Il s'agit de montrer que, pour tout $\alpha > 0$ donné, on peut trouver une constante $\beta > 0$, telle que, quel que soit $(x_0, \lambda_0) \in \bar{B}((x_*, \lambda_*), \beta)$, l'inclusion en (x, λ) suivante

$$\begin{pmatrix} \nabla f(x_0) + c'(x_0)^* \lambda_0 \\ -c(x_0) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} L(x_0, \lambda_0) & c'(x_0)^* \\ -c'(x_0) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x - x_0 \\ \lambda - \lambda_0 \end{pmatrix} + \mathrm{N}_K(x, \lambda) \ni 0$$

a une solution dans $\bar{B}((x_*, \lambda_*), \alpha)$. Cette inclusion est le système d'optimalité du premier ordre du problème quadratique en $x \in \mathbb{E}$ suivant

$$\begin{cases} \min \langle \nabla f(x_0), x - x_0 \rangle + \frac{1}{2} \langle L(x_0, \lambda_0)(x - x_0), x - x_0 \rangle \\ c_E(x_0) + c'_E(x_0)(x - x_0) = 0 \\ c_I(x_0) + c'_I(x_0)(x - x_0) \leqslant 0. \end{cases} \tag{14.14}$$

Celui-ci est une perturbation du problème quadratique que l'on obtient en prenant $(x_0, \lambda_0) = (x_*, \lambda_*)$, à savoir

$$\begin{cases} \min \langle \nabla f(x_*), x - x_* \rangle + \frac{1}{2} \langle L_*(x - x_*), x - x_* \rangle \\ c_E(x_*) + c'_E(x_*)(x - x_*) = 0 \\ c_I(x_*) + c'_I(x_*)(x - x_*) \leqslant 0. \end{cases} \tag{14.15}$$

Observons que le problème non perturbé (14.15) admet (x_*, λ_*) comme solution primale-duale, parce que son système d'optimalité du premier ordre en $x = x_*$ n'est autre que celui de (P_{EI}), vérifié par (x_*, λ_*), et parce que ses conditions d'optimalité du deuxième ordre sont également celles de (P_{EI}), qui sont satisfaites par hypothèses. Par ailleurs, la semi-stabilité entraîne l'unicité du multiplicateur (convexité de l'ensemble des multiplicateurs optimaux et remarque **??**(3)) et donc aussi les conditions de qualification de Mangasarian-Fromovitz (QC-MF) (proposition 4.43). On sait alors [459 ; théorème 4.2 et corollaire 4.3] que l'on peut trouver une solution du système perturbé (14.14) dont l'écart à (x_*, λ_*) est majoré par une constante fois la grandeur de la perturbation. □

Théorème 14.6 (convergence de l'algorithme SQP) *Si f et c sont $C^{2,1}$ dans la voisinage d'un minimum local x_* de (P_{EI}), s'il existe un unique multiplicateur optimal associé à x_*, et si les conditions suffisantes du second ordre sont vérifiées, alors il existe un voisinage V de (x_*, λ_*) tel que si le premier itéré $(x_1, \lambda_1) \in V$,*

1) *l'algorithme SQP peut générer une suite $\{(x_k, \lambda_k)\}$ dans V,*
2) *$\{(x_k, \lambda_k)\}$ converge quadratiquement vers (x_*, λ_*).*

Démonstration. Par la proposition 14.4, l'unicité du multiplicateur optimal et les conditions suffisantes du deuxième ordre, (x_*, λ_*) est une solution semi-stable de (14.2). Par la proposition 14.5, c'est aussi une solution hémi-stable. On peut alors appliquer le théorème **??** qui donne le résultat. □

14.2 L'algorithme local

14.2.1 Un algorithme non convergent

Considérons d'abord le problème avec contraintes d'égalité seulement

$$(P_E) \quad \begin{cases} \min f(x) \\ c(x) = 0, \end{cases}$$

où $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R}$ et $c : \mathbb{E} \to \mathbb{R}^m$.

On a vu au chapitre 9 comment on pouvait introduire la méthode de Newton pour résoudre des équations non linéaires (voir (9.3)) et pour minimiser une fonction (voir (9.7)). Pour résoudre le problème (P_E), on pourrait donc être tenté d'obtenir le déplacement d_k en x_k en prenant une approximation quadratique du critère et en linéarisant les contraintes en x_k. Avec cette méthode, on calculerait d_k comme solution du problème quadratique

$$\begin{cases} \min \nabla f(x_k)^\mathsf{T} d + \frac{1}{2} d^\mathsf{T} \nabla^2 f(x_k) d \\ c_E(x_k) + c'_E(x_k) \cdot d = 0 \end{cases} \tag{14.16}$$

et on prendrait $x_{k+1} = x_k + d_k$. Attention, **cet algorithme n'est pas nécessairement convergent** ! On connaît des exemples (voir l'exercice 14.1) dans lesquels la solution est répulsive pour cet algorithme : on peut trouver des itérés aussi proches que l'on veut de la solution (mais différents de la solution), tels que l'itéré suivant est plus éloigné de la solution que l'itéré en question. En fait, si on écrit l'algorithme comme un processus de point fixe, $x_{k+1} = \Phi(x_k)$ pour une certaine fonction Φ, l'application Φ n'est pas *strictement contractante* proche de la solution. Hélas, on voit encore parfois cette approche utilisée de nos jours !

Pourtant il doit bien exister une *méthode newtonienne*, c'est-à-dire qui procède par linéarisations, pour résoudre les problèmes avec contraintes ! Les chercheurs en optimisation numérique se sont posés la question bien longtemps et ce n'est qu'au milieu des années 1970, soit 30 ans après l'invention de l'algorithme du simplexe, que la situation s'est éclaircie. Ce qui ne fonctionne pas dans l'approche qui a conduit à (14.16), c'est qu'en traitant séparément les problèmes contradictoires « $\min f(x)$ » et « $c(x) = 0$ » (le minimum de f ne vérifie en général pas la contrainte $c(x) = 0$, sinon pourquoi la spécifier), on a mis en place deux algorithmes qui ne se concertent pas et tirent à hue et à dia. Cela paraît à présent évident, la bonne démarche est de résoudre un seul système qui détermine les solutions de (P_E) et cela par un unique algorithme. Ce système est celui formé par les conditions d'optimalité de (P_E) et l'algorithme est celui de Newton. Ce système comporte en effet $n+m$ équations et $n+m$ inconnues (x_*, λ_*), ce qui en fait un candidat convenable pour être résolu par des itérations de Newton. Nous n'allons pas écrire cet algorithme, qui est en fait un cas particulier de celui que nous introduisons à la section suivante.

14.2.2 L'algorithme OQS

La discussion de la section 14.2.1 nous a montré qu'il était judicieux de faire des itérations de Newton sur le système d'optimalité de (P_{EI}). Rappelons (théorème 4.30) que celui-ci détermine les points stationnaires (x_*, λ_*) du problème comme solution du système de Karush, Kuhn et Tucker :

$$\text{(KKT)} \quad \begin{cases} (a) & \nabla f(x_*) + A(x_*)^\mathsf{T} \lambda_* = 0 \\ (b) & c_E(x_*) = 0, \quad c_I(x_*) \leqslant 0 \\ (c) & (\lambda_*)_I \geqslant 0 \\ (d) & (\lambda_*)_I^\mathsf{T} c_I(x_*) = 0. \end{cases} \tag{14.17}$$

Travailler sur ce système d'optimalité n'allait pas de soi et l'on peut dire qu'il a fallu franchir un saut conceptuel pour y arriver.

- D'abord, ces relations forment un système en (x_*, λ_*), pas seulement en x_*. Il faut donc les linéariser par rapport à (x, λ), pas seulement par rapport à x comme dans l'algorithme qui a conduit à (14.16). L'algorithme de Newton qui en résultera sera donc une *méthode primale-duale*, générant à la fois des itérés primaux x_k et duaux λ_k.
- Une autre difficulté provient de la présence d'inégalités dans (14.17). La linéarisation de l'inégalité $F(x) \leqslant 0$ en x, pour un accroissement d, se fera par $F(x) + F'(x) \cdot d \leqslant 0$. On verra par les résultats de convergence locale obtenus qu'il s'agit d'un bon choix.

Soit $(x, \lambda) \in \mathbb{E} \times \mathbb{R}^m$ le point courant auquel on linéarise (14.17) et $(d, \mu) \in \mathbb{E} \times \mathbb{R}^m$ l'accroissement, la correction, que l'on désire apporter au point courant. L'itéré suivant (x_+, λ_+) s'obtiendra donc par

$$x_+ := x + d \qquad \text{et} \qquad \lambda_+ := \lambda + \mu.$$

On obtient le système suivant :

$$\begin{cases} L(x,\lambda)d + A(x)^{\mathsf{T}}\mu = -\nabla_x \ell(x,\lambda) \\ (c(x) + A(x)d)^{\#} = 0 \\ (\lambda + \mu)_I \geqslant 0 \\ (\lambda + \mu)_I^{\mathsf{T}} c_I(x) + \lambda_I^{\mathsf{T}} (A(x)d)_I = 0. \end{cases} \tag{14.18}$$

On a noté $A(x) := c'(x)$ la jacobienne des contraintes et

$$L(x, \lambda) := \nabla^2_{xx} \ell(x, \lambda)$$

la hessienne du lagrangien. Bien que linéaire, le système (14.18) a l'inconvénient d'être très difficile à résoudre. On y trouve en effet des égalités *et* des inégalités. De plus, on ne voit plus le problème d'optimisation dont il est issu. On se rappelle, en effet, que dans le cas de l'optimisation sans contrainte, le pas de Newton pouvait se voir comme un point stationnaire d'un problème d'optimisation quadratique sans contrainte. On aimerait pouvoir faire de même ici.

Dans ce but, on modifie le système (14.18), de manière à ce qu'il soit le système d'optimalité d'un problème quadratique avec contraintes linéaires. Si on ajoute le terme $\mu^{\mathsf{T}} A(x)d$ à la dernière équation, celle-ci ressemble davantage à des conditions de complémentarité (c'est alors un produit de deux facteurs). On observera par ailleurs, que dans le voisinage d'une solution primale-duale, le terme $\mu^{\mathsf{T}} A(x)d$ est formé d'un produit de deux grandeurs très petites, les accroissements μ et d. L'ajout du terme $\mu^{\mathsf{T}} A(x)d$ apporte donc une perturbation insignifiante au système (14.18), qui ne devrait pas modifier les propriétés de convergence rapide de l'algorithme (cette intuition s'avérera correcte). Le système devient alors

$$\begin{cases} L(x,\lambda)d + A(x)^{\mathsf{T}}\mu = -\nabla_x \ell(x,\lambda) \\ (c(x) + A(x)d)^{\#} = 0 \\ (\lambda + \mu)_I \geqslant 0 \\ (\lambda + \mu)_I^{\mathsf{T}} (c(x) + A(x)d)_I = 0. \end{cases} \tag{14.19}$$

On vérifie aisément le fait remarquable suivant : (14.19) est formé des conditions de KKT du problème d'optimisation quadratique

$$\begin{cases} \min_d \nabla f(x)^\mathsf{T} d + \frac{1}{2} d^\mathsf{T} L(x,\lambda) d \\ c_E(x) + A_E(x) d = 0 \\ c_I(x) + A_I(x) d \leqslant 0. \end{cases} \tag{14.20}$$

Plus précisément, le lien entre l'accroissement μ de λ et le multiplicateur λ^{PQ} associé aux contraintes de (14.20) s'écrit $\lambda^{\text{PQ}} = \lambda + \mu$. Dès lors la mise à jour du couple (x, λ) se fait par

$$x_+ := x + d \qquad \text{et} \qquad \lambda_+ := \lambda^{\text{PQ}}. \tag{14.21}$$

L'algorithme qui met à jour (x, λ) par ces formules est appelé l'*algorithme OQS* (pour Sequential Quadratic Programming). Le problème (14.20) que l'on doit résoudre à chaque itération pour déterminer (d, λ^{PQ}) est appelé le *problème quadratique osculateur* (PQO) au problème (P_{EI}) en (x, λ). On le déduit aisément de (P_{EI}). Ses contraintes sont celles de (P_{EI}), linéarisées en x. Son critère est hybride, avec $\nabla f(x)$ dans la partie linéaire et la hessienne du lagrangien dans la partie quadratique. Ce qui manque au problème quadratique (14.16) est maintenant manifeste : ce problème ne fait pas intervenir la courbure des contraintes (les dérivées secondes de c sont absentes). Dans le problème quadratique osculateur (14.20), cette courbure intervient dans la hessienne du lagrangien, pas par une approximation quadratique des contraintes.

On peut à présent résumer l'algorithme OQS local.

Algorithme 14.7 (OQS local — une itération)

On suppose que l'on dispose au début de l'itération d'un couple $(x, \lambda) \in \mathbb{E} \times \mathbb{R}^m$.

1. *Test d'arrêt* : si (x, λ) vérifie les conditions d'optimalité (14.17), arrêt de l'algorithme.
2. *Déplacement* : calculer (d, λ^{PQ}) comme point stationnaire du problème quadratique osculateur (14.20).
3. *Mise à jour des variables* : le nouvel itéré (x_+, λ_+) est donné par (14.21).

Le coût d'une itération est essentiellement dû à la résolution du problème quadratique osculateur. On a donc reporté la *combinatoire* du problème (P_{EI}) sur des problèmes quadratiques, dans lesquels elle est plus facilement prise en compte. Cependant, plusieurs difficultés peuvent se présenter :

- La hessienne du lagrangien n'est pas nécessairement semi-définie positive, si bien que le PQO est NP-ardu (voir le chapitre **??**) et peut présenter des *solutions importunes* (indésirables car trop grandes, nous reviendrons sur cette question à la section 14.2.3). Pour cette raison, les implémentations de cet algorithmes utilisent souvent une modification ou une approximation définie positive M_k de la hessienne de $L(x_k, \lambda_k)$. S'il est réalisable, c'est-à-dire si ses contraintes sont compatibles, le PQO peut alors être résolu en un nombre polynomial d'itérations et n'a plus de solutions indésirables.
- Le PQO peut ne pas être borné (donc ne pas avoir de solution). L'introduction de l'algorithme nous a montré qu'un point stationnaire suffirait, mais il n'y a pas

d'algorithme évident pour trouver un point stationnaire d'un problème quadratique autre qu'un minimum local.

- Les contraintes linéarisées du PQO peuvent être *incompatibles*. Diverses techniques permettent de faire face à cette difficulté : relaxation des contraintes linéarisées dans la globalisation de la convergence par recherche linéaire; la globalisation de la convergence par régions de confiance prend directement en compte cette difficulté.

14.2.3 Convergence locale ▲

Nous présentons ci-dessous le résultat de convergence le plus simple, celui qui se démontre en se ramenant au cas des problèmes avec contraintes d'égalité. Pour un résultat plus fin, nous renvoyons le lecteur à [63, 65, 66].

Commençons donc par considérer le problème où il n'y a que des contraintes d'égalité :

$$(P_E) \quad \begin{cases} \min\ f(x) \\ c(x) = 0. \end{cases}$$

Dans ce cas, l'algorithme OQS est l'algorithme de Newton (9.2)–(9.3) appliqué au système d'optimalité

$$F(z) = 0, \quad \text{où} \quad z = (x, \lambda) \quad \text{et} \quad F(z) = \begin{pmatrix} \nabla_x \ell(x, \lambda) \\ c(x) \end{pmatrix}.$$

On a noté $(x, \lambda) \mapsto \ell(x, \lambda) = f(x) + \lambda^{\mathsf{T}} c(x)$ le lagrangien associé au problème (P_E). Le résultat de convergence locale est alors un corrolaire immédiat du théorème 9.2, qui requiert une hypothèse de différentiabilité de F et d'inversibilité de $F'(x_*, \lambda_*)$, ce qui conduit à la définition suivante.

Définition 14.8 (point stationnaire régulier) Un point stationnaire (x_*, λ_*) de (P_E) est dit *régulier* si la matrice d'ordre $n + m$

$$\begin{pmatrix} \nabla^2_{xx} \ell(x_*, \lambda_*) & c'(x_*)^* \\ c'(x_*) & 0 \end{pmatrix} \tag{14.22}$$

est inversible.

Un point stationnaire (x_*, λ_*) de (P_E) vérifiant les conditions d'optimalité du second ordre de la proposition 4.23 et tel que $c'(x_*)$ est surjective est régulier. En effet, il suffit de montrer que la matrice carrée (14.22) est injective pour en conclure qu'elle est inversible. Or si (d, μ) est dans son noyau, alors $d \in \mathcal{N}(c'(x_*))$ et $d^{\mathsf{T}} \nabla^2_{xx} \ell(x_*, \lambda_*) d = 0$. Donc $d = 0$ par les conditions du second ordre. Ensuite $\mu = 0$ par l'injectivité de $c'(x_*)^*$.

Théorème 14.9 (convergence quadratique locale de l'algorithme de Newton pour (P_E)) *Supposons que f et c soient de classe C^2 dans un voisi-*

nage d'un point stationnaire régulier x_* de (P_E), avec multiplicateur associé λ_*. Alors, il existe un voisinage V de (x_*, λ_*) tel que, si le premier itéré $(x_1, \lambda_1) \in V$, l'algorithme de Newton 14.7 est bien défini et génère une suite $\{(x_k, \lambda_k)\}$ convergeant superlinéairement vers (x_*, λ_*). Si f'' et c'' est lipschitzienne dans un voisinage de x_*, la convergence de la suite est quadratique.

DÉMONSTRATION. On applique le théorème 9.2 avec F définie ci-dessus, $z = (x, \lambda)$ et $z_* = (x_*, \lambda_*)$. La jacobienne $F'(z_*)$ est inversible par la régularité de z_*. La convergence superlinéaire de $\{(x_k, \lambda_k)\}$ vers (x_*, λ_*) a lieu si (x_1, λ_1) est suffisamment proche de (x_*, λ_*). Si f'' et c'' son lipschitzienne proche de x_*, il en est de même de F' proche de z_*, et le convergence quadratique de $\{(x_k, \lambda_k)\}$ s'en suit. □

Une propriété minimale d'un algorithme convergent est de générer un déplacement nul lorsque l'itéré courant est une solution. Cette propriété élémentaire n'a pourtant pas nécessairement lieu lorsque le déplacement de l'algorithme OQS est une solution *arbitraire* du PQO, comme le montre l'exemple suivant.

Exemple 14.10 On cherche à minimiser le logarithme de $(1 + x)$ lorsque x est restreint à l'intervalle $[0, 3]$:

$$\begin{cases} \min_x \log(1 + x) \\ 0 \leqslant x \leqslant 3. \end{cases}$$

Le logarithme a été utilisé de manière à introduire de la non-convexité dans le problème (par la monotonicité du logarithmie, il aurait été équivalent de minimiser $(1+x)$ et le problème serait devenu linéaire). On vérifie aisément que le problème a une unique solution primale-duale $(x_*, \lambda_*) = (0, (1, 0))$, qui satisfait les conditions suffisantes d'optimalité, la complémentarité stricte et la qualification des contraintes (QC-IL). On peut donc arguer qu'il s'agit d'une « bonne » solution. Cependant, le problème quadratique osculateur (14.20) en cette solution s'écrit

$$\begin{cases} \min_d d - \frac{1}{2}d^2 \\ 0 \leqslant d \leqslant 3. \end{cases}$$

Ce PQO a trois points stationnaires primaux-duaux (d, λ) : à savoir un minimum local $(0, (1, 0))$, un maximum $(1, (0, 0))$ et un minimum global $(3, (0, 2))$. Parmi ces points stationnaires, seul le premier est satisfaisant puisqu'il donne un déplacement nul et le multiplicateur optimal. Les deux autres points stationnaires sont dits *importuns*, indésirables. □

Le phénomène qui se produit dans cet exemple ne peut avoir lieu que si $L(x, \lambda)$ n'est pas définie positive. Sinon, le PQO est strictement convexe et a donc une unique solution dès que ses contraintes sont compatibles. Les résultats de convergence de l'algorithme OQS doivent donc faire une hypothèse sur la solution du PQO qui est sélectionnée par l'algorithme à chaque itération. Dans le résultat donné ci-dessous, il est supposé que d est une *solution de norme minimale*.

The next lemma is useful for proving theorem 14.12. We use the notation that is suitable for the present framework. Its proof is proposed in exercise **??**.

Lemme 14.11 (propriété de la surjectivité) *Let A be an $m \times n$ surjective matrix and $\mu \in \mathbb{R}^m$. Then, $\forall \varepsilon > 0$, $\exists \delta > 0$, such that when the $m \times n$ matrix $\tilde{A}$ and the point $\tilde{\mu} \in \mathbb{R}^m$ satisfy $\|\tilde{A} - A\| \leqslant \delta$ and $\|\tilde{A}^\mathsf{T}\tilde{\mu} - A^\mathsf{T}\mu\| \leqslant \delta$, there must hold $\|\tilde{\mu} - \mu\| \leqslant \varepsilon$.*

Théorème 14.12 (convergence quadratique primale-duale de l'algorithme OQS) *Suppose that f and c are of class C^2 in a neighborhood of a stationary point x_* of (P_{EI}), with associated multiplier λ_*. Suppose also that strict complementarity holds and that $(x_*, (\lambda_*)_{E \cup I_*^0})$ is a regular stationary point of the equality constrained problem*

$$\begin{cases} \min_x \ f(x) \\ c_i(x) = 0, \quad \text{for } i \in E \cup I_*^0, \end{cases} \tag{14.23}$$

*in the sense of definition **??**. Consider the OQS algorithm, in which d_k is a minimum-norm stationary point of the osculating quadratic problem (14.20). Then there is a neighborhood V of (x_*, λ_*) such that, if the first iterate $(x_1, \lambda_1) \in V$:*

(i) the OQS algorithm is well defined and generates a sequence $\{(x_k, \lambda_k)\}$ that converges superlinearly to (x_*, λ_*);

(ii) the active constraints of the osculating quadratic problem (14.20) are those of problem (P_{EI});

(iii) if, in addition, f and c are of class $C^{2,1}$ in a neighborhood of x_*, the convergence of $\{(x_k, \lambda_k)\}$ is quadratic.

Démonstration. The idea of the proof is to show that, close to (x_*, λ_*), the selected minimum-norm stationary point of the osculating quadratic problem (14.20) is actually the primal-dual Newton step on (14.23). The result then follows from theorem 14.9.

Suppose that (x, λ) is close enough to (x_*, λ_*). Since $(x_*, (\lambda_*)_{E \cup I_*^0})$ is a regular stationary point of (14.23), $c'_{E \cup I_*^0}(x_*)$ is surjective and the osculating QP associated with (14.23), namely

$$\begin{cases} \min_{\mathrm{d}t} \ \nabla f(x)^\mathsf{T} \mathrm{d}t + \frac{1}{2} \mathrm{d}t^\mathsf{T} L(x, \lambda) \mathrm{d}t \\ c_i(x) + c_i'(x) \cdot \mathrm{d}t = 0, \quad \text{for } i \in E \cup I_*^0, \end{cases} \tag{14.24}$$

has a unique primal-dual stationary point. We denoted it by $(\mathrm{d}t, \tilde{\ell}_{E \cup I_*^0})$ and form with $\tilde{\ell}_{E \cup I_*^0}$ a vector $\tilde{\ell} \in \mathbb{R}^m$, by setting $\tilde{\ell}_i = 0$ for $i \in I \setminus I_*^0$.

Let us show that $(\mathrm{d}t, \tilde{\ell})$ is a stationary point of the osculating quadratic problem (14.20), if $(x, \lambda) := (x_k, \lambda_k)$ is in some neighborhood of (x_*, λ_*); this will imply that, for (x, λ) close to (x_*, λ_*), the OQS algorithm is well defined and that d is small (it is a minimum-norm stationary point and $\mathrm{d}t$ is small by theorem 14.9). We only need to show that

$$c_i(x) + c_i'(x) \cdot \mathrm{d}t \leqslant 0 \text{ for } i \in I \setminus I_*^0, \tag{14.25}$$

$$\lambda_i \geqslant 0 \text{ for } i \in I_*^0. \tag{14.26}$$

From theorem 14.9, $(x + \mathrm{d}t, \tilde{\ell})$ is close to (x_*, λ_*), when (x, λ) is close to (x_*, λ_*), so that $\mathrm{d}t$ is small. Now (14.25) follows when (x, λ) close enough to (x_*, λ_*), since $c_i(x_*) < 0$ for $i \in I \setminus I_*^0$. On the other hand, to prove (14.26), observe that, for $i \in I_*^0$, $(\lambda_*)_i > 0$ by strict complementarity. Therefore $\tilde{\ell}_i \geqslant 0$ since, by theorem 14.9, $\tilde{\ell}$ is close to λ_* when (x, λ) is close to (x_*, λ_*).

Let us now show that the pair $(d, \lambda^{\mathrm{PQ}}) := (d_k, \lambda_k^{\mathrm{PQ}})$ formed of the selected minimum-norm stationary point of the osculating QP and its associated multiplier is in fact $(\mathrm{d}t, \tilde{\ell})$, if (x, λ) is in some neighborhood of (x_*, λ_*). Since (14.24) has a single stationary point, for (x, λ) close to (x_*, λ_*), we have to show that $(d, \lambda^{\mathrm{PQ}})$ satisfies its optimality conditions. Knowing that $(d, \lambda^{\mathrm{PQ}})$ satisfies the optimality conditions of the osculating quadratic problem (14.20), we just have to show that

$$\lambda_i = 0 \text{ for } i \in I \setminus I_*^0, \tag{14.27}$$

$$c_i(x) + c_i'(x) \cdot d = 0 \text{ for } i \in I_*^0. \tag{14.28}$$

Condition (14.27) is a consequence of the complementarity in (14.20) and of the fact that, for (x, λ) close to (x_*, λ_*) and $i \in I \setminus I_*^0$, $c_i(x) + c_i'(x) \cdot d < 0$ (since $c_i(x_*) < 0$ and d is small). Condition (14.28) results from the complementarity in (14.20) and the fact that $\lambda_i > 0$ for $i \in I_*^0$. For the latter claim, observe indeed that

$$\nabla f(x) + L(x, \lambda)d + \sum_{i \in E \cup I_*^0} \lambda_i \nabla c_i(x) = 0.$$

Since $\nabla f(x) + L(x, \lambda)d$ is close to $\nabla f(x_*)$ and the gradients $\{\nabla c_i(x) : i \in E \cup I_*^0\}$ are close to the linearly independent gradients $\{\nabla c_i(x_*) : i \in E \cup I_*^0\}$, lemma 14.11 implies that $\lambda_{I_*^0}$ is close to $(\lambda_*)_{I_*^0} > 0$.

Because of (14.28) and the fact that $c_i(x) + c_i'(x) \cdot d < 0$ for $i \in I \setminus I_*^0$ (see the reasonning after (14.28)), we have also proven the claim (ii) of the theorem. □

14.3 Globalisation de la convergence par recherche linéaire

On écrit le problème quadratique osculateur en l'itéré (x_k, λ_k) de l'itération k comme suit

$$\begin{cases} \min_d \ g_k^{\mathsf{T}} d + \frac{1}{2} d^{\mathsf{T}} M_k d \\ (c_k + A_k d)^{\#} = 0. \end{cases} \tag{14.29}$$

Nous avons abrégé les écritures en posant

$$g_k = \nabla f(x_k), \quad c_k = c(x_k) \quad \text{et} \quad A_k = A(x_k) = c'(x_k).$$

La matrice M_k est soit $L(x_k, \lambda_k)$ ou une approximation de cette hessienne (version quasi-newtonienne). Un point stationnaire d_k de ce problème vérifie, pour un certain multiplicateur $\lambda_k^{\mathrm{PQ}} \in \mathbb{R}^m$, les conditions d'optimalité suivantes

$$\begin{cases} (a) & g_k + M_k d_k + A_k^{\mathsf{T}} \lambda_k^{\mathrm{PQ}} = 0 \\ (b) & (c_k + A_k d_k)^{\#} = 0 \\ (c) & (\lambda_k^{\mathrm{PQ}})_I \geqslant 0 \\ (d) & (\lambda_k^{\mathrm{PQ}})_I^{\mathsf{T}} (c_k + A_k d_k)_I = 0. \end{cases} \tag{14.30}$$

14.3.1 Fonction de mérite

Afin de globaliser la méthode de Newton, on introduit la fonction de mérite (ou fonction de pénalisation) suivante

$$\Theta_\sigma(x) = f(x) + \sigma\|c(x)\|_{\mathrm{P}}, \tag{14.31}$$

où $\|\cdot\|_{\mathrm{P}}$ est une norme sur $\mathbb{R}^m$ et $\sigma > 0$ est un paramètre. On supposera que la norme $\|\cdot\|_{\mathrm{P}}$ vérifie

$$v \mapsto \|v^{\#}\|_{\mathrm{P}} \text{ est convexe.} \tag{14.32}$$

C'est le cas des normes ℓ_p définies par (A.5), avec $p \in [1, +\infty]$. On note $\|\cdot\|_{\mathrm{D}}$, la norme duale de $\|\cdot\|_{\mathrm{P}}$ pour le produit scalaire euclidien (voir (A.8)).

14.3.2 Condition de décroissance de la fonction de mérite

Proposition 14.13 (décroissance de Θ_σ le long de d_k) *Si $(d_k, \lambda_k^{\mathrm{PQ}})$ vérifie les conditions d'optimalité (14.30) et si $\|\cdot\|_{\mathrm{P}}$ vérifie (14.32), alors*

$$\Theta'_\sigma(x_k; d_k) \leqslant g_k^{\mathsf{T}} d_k - \sigma\|c_k^{\#}\|_{\mathrm{P}} = -d_k^{\mathsf{T}} M_k d_k + (\lambda_k^{\mathrm{PQ}})^{\mathsf{T}} c_k - \sigma\|c_k^{\#}\|_{\mathrm{P}}. \tag{14.33}$$

Si, de plus,

$$\sigma \geqslant \|\lambda_k^{\mathrm{PQ}}\|_{\mathrm{D}}, \tag{14.34}$$

alors

$$\Theta'_\sigma(x_k; d_k) \leqslant -d_k^{\mathsf{T}} M_k d_k. \tag{14.35}$$

Donc $\Theta'_\sigma(x_k; d_k) < 0$, si $\sigma \geqslant \|\lambda_k^{\mathrm{PQ}}\|_{\mathrm{D}}$, si M_k est définie positive et si x_k n'est pas un point stationnaire de (P_{EI}).

Démonstration. Puisqu'une norme a des dérivées directionnelles (elle est convexe, donc la proposition 3.14 s'applique) et est lipschitzienne (on utilise sa convexité ou l'inégalité triangulaire), la fonction $v \to \|v^{\#}\|_{\mathrm{P}}$ a des dérivées directionnelles. Pour les calculer, on observe d'abord que, par (14.32) et (14.30)-(b), on a pour $t \in]0, 1[$:

$$\begin{aligned}
\left\|\left[c_k + tA_k d_k\right]^{\#}\right\|_{\mathrm{P}} &= \left\|\left[(1-t)c_k + t(c_k + A_k d_k)\right]^{\#}\right\|_{\mathrm{P}} \\
&\leqslant (1-t)\|c_k^{\#}\|_{\mathrm{P}} + t\left\|\left[c_k + A_k d_k\right]^{\#}\right\|_{\mathrm{P}} \\
&= (1-t)\|c_k^{\#}\|_{\mathrm{P}}.
\end{aligned}$$

Dès lors

$$(\|\cdot^{\#}\|_{\mathrm{P}})'(c_k; A_k d_k) = \lim_{t \downarrow 0} \frac{1}{t}\left(\left\|\left[c_k + tA_k d_k\right]^{\#}\right\|_{\mathrm{P}} - \|c_k^{\#}\|_{\mathrm{P}}\right) \leqslant -\|c_k^{\#}\|_{\mathrm{P}}.$$

Alors, en utilisant successivement (14.30)-(a), (14.30)-(b) et (14.30)-(d), on montre (14.33) :

$$\begin{aligned}\Theta'_\sigma(x_k;d_k) &\leqslant g_k^T d_k - \sigma\|c_k^\#\|_P \\ &= -d_k^T M_k d_k - (\lambda_k^{PQ})^T A_k d_k - \sigma\|c_k^\#\|_P \\ &= -d_k^T M_k d_k + (\lambda_k^{PQ})^T c_k - \sigma\|c_k^\#\|_P.\end{aligned}$$

Si $\sigma \geqslant \|\lambda_k^{PQ}\|_D$, en utilisant (14.30)-$(c)$ et l'inégalité de Cauchy-Schwarz généralisée (A.9), on trouve

$$(\lambda_k^{PQ})^T c_k - \sigma\|c_k^\#\|_P \leqslant (\lambda_k^{PQ})^T c_k^\# - \sigma\|c_k^\#\|_P \leqslant (\|\lambda_k^{PQ}\|_D - \sigma)\|c_k^\#\|_P \leqslant 0.$$

Alors, (14.35) se déduit de (14.33). Si $\Theta'_\sigma(x_k;d_k) = 0$ et M_k est définie positive, alors $d_k = 0$. De (14.30), on déduit la stationnarité de x_k, avec λ_k^{PQ} comme multiplicateur associé. □

Le seuil sur σ dans (14.34) rappelle celui qui fait de Θ_σ une fonction de pénalisation exacte (proposition 12.23). Pour satisfaire l'inégalité (14.34), il va falloir modifier σ à certaines itérations (on n'est pas maître de λ_k^{PQ}). On note alors σ_k la valeur de σ à l'itération k et *avant* de faire de la recherche linéaire (RL) on modifie éventuellement l'ancien σ $(= \sigma_{k-1})$ de manière à avoir

$$\sigma_k \geqslant \|\lambda_k^{PQ}\|_D + \bar\sigma, \tag{14.36}$$

où $\bar\sigma > 0$ est une « petite » constante (choix heuristique). On utilisera les règles suivantes.

- Première itération. On prend

  $$\bar\sigma = \max(\sqrt{\texttt{eps}}, \|\lambda_1\|_D/100) \quad \text{et} \quad \sigma_1 = \|\lambda_1\|_D + \bar\sigma,$$

  où `eps` est l'epsilon-machine.

- Itérations suivantes. On augmente éventuellement σ de manière à réaliser (14.36), mais on peut aussi le faire décroître s'il s'avère être « beaucoup » trop grand (afin d'éviter la troncature du pas).

  si $\sigma_{k-1} < \|\lambda_k^{PQ}\|_D + \bar\sigma$;
  alors $\sigma_k = \max(1.5\,\sigma_{k-1}, \|\lambda_k^{PQ}\|_D + \bar\sigma)$;
  sinon
  si $\sigma_{k-1} > 1.1(\|\lambda_k^{PQ}\|_D + \bar\sigma)$;
  alors $\sigma_k = (\sigma_{k-1} + \|\lambda_k^{PQ}\|_D + \bar\sigma)/2$;
  sinon $\sigma_k = \sigma_{k-1}$.

Plus rien ne garantit la convergence « théorique » de l'algorithme si l'on fait décroître σ_k comme dans la règle ci-dessus, mais en pratique une telle heuristique peut améliorer grandement l'efficacité de l'algorithme. On ne s'en prive donc pas. Aux analystes d'en trouver une qui n'empêche pas la convergence !

14.3.3 Résultat de convergence globale ▲

14.4 Globalisation de la convergence par région de confiance ▲ ⊖

14.5 Versions quasi-newtoniennes ▲

Dans les méthodes de quasi-Newton, on remplace la hessienne du lagrangien L qui intervient dans le problème quadratique osculateur (14.20) par une matrice M, symétrique *définie positive*, mise à jour par l'algorithme. Dans le cadre de OQS, cette approche a au moins deux intérêts : il ne faut pas calculer de dérivées secondes et le problème quadratique (PQ) est toujours « mieux » posé (il a au plus une solution). Bien que la convergence soit plus lente qu'avec la méthode de Newton (elle n'est plus que superlinéaire) et malgré les difficultés conceptuelles rencontrées par cette approche (voir plus loin), le second avantage cité ci-dessous fait que c'est essentiellement l'approche utilisée dans les codes commerciaux ou de recherche.

La version quasi-newtonienne de OQS génère donc une suite primale-duale $\{(x_k, \lambda_k)\}$ et une suite de matrices symétriques définies positives $\{M_k\}$ de la manière suivante. À l'étape k, on calcule d'abord *la* solution primale-duale $(d_k, \lambda_k^{\text{PQ}})$ du problème quadratique osculateur (en espérant qu'elle existe...)

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_{d\in\mathbb{E}} \; g_k^{\mathsf{T}} d + \frac{1}{2} d^{\mathsf{T}} M_k d \\ (c_k + A_k d)^{\#} = 0, \end{array} \right. \tag{14.37}$$

dans lequel M_k joue le rôle de $L_k = L(x_k, \lambda_k) = \nabla^2_{xx}\ell(x_k, \lambda_k)$, la hessienne du lagrangien ℓ, $A_E(x_k)$ et $A_I(x_k)$ sont les jacobiennes des contraintes d'égalité c_E et c_I. Ensuite on prend $x_{k+1} = x_k + d_k$, $\lambda_{k+1} = \lambda_k^{\text{PQ}}$ et on met à jour M_k par la formule de BFGS (c'est la formule la plus utilisée).

La formule de BFGS s'écrit :

$$M_{k+1} = M_k - \frac{M_k \delta_k \delta_k^{\mathsf{T}} M_k}{\delta_k^{\mathsf{T}} M_k \delta_k} + \frac{\gamma_k \gamma_k^{\mathsf{T}}}{\gamma_k^{\mathsf{T}} \delta_k}.$$

Les vecteurs γ_k et δ_k sont déterminés de manière à forcer M_{k+1} à être définie positive (on suppose que M_k l'est) et à être proche de L_{k+1}, ce qui, dans certains cas, peut être contradictoire. Pour cela, on prend pour δ_k le déplacement en x :

$$\delta_k = x_{k+1} - x_k.$$

Le vecteur γ_k devrait idéalement être la variation du gradient du lagrangien

$$\gamma_k^{\ell} = \nabla_x \ell(x_{k+1}, \lambda_{k+1}) - \nabla_x \ell(x_k, \lambda_{k+1}).$$

Mais, pour conserver la définie positivité de M_k, on doit avoir $\gamma_k^{\mathsf{T}} \delta_k > 0$, ce qui n'est pas garanti avec $\gamma_k = \gamma_k^{\ell}$. Si bien que l'on utilisera la *correction de Powell* qui consiste à prendre

$$\gamma_k = \theta_k \gamma_k^{\ell} + (1 - \theta_k) M_k \delta_k,$$

où θ_k est pris maximal dans $]0, 1]$ de manière à avoir $\gamma_k^{\mathsf{T}} \delta_k \geqslant 0.2\, \delta_k^{\mathsf{T}} M_k \delta_k$. On trouve

$$\theta_k = \begin{cases} 0.8\,\dfrac{\delta_k^\mathsf{T} M_k \delta_k}{\delta_k^\mathsf{T} M_k \delta_k - (\gamma_k^\ell)^\mathsf{T}\delta_k} & \text{si } (\gamma_k^\ell)^\mathsf{T}\delta_k < 0.2\delta_k^\mathsf{T} M_k \delta_k \\ 1 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Il reste à spécifier la matrice initiale. On prendra $M_1 = I$ (matrice identité) à la première itération. Mais, après le calcul de x_2 et avant le calcul de M_2, on modifie la valeur de M_1 en ηI, où η a une valeur reflétant l'échelle du problème (ou la « valeur moyenne » de L_1) :

$$\eta = \frac{\|\gamma_1\|_2^2}{\gamma_1^\mathsf{T}\delta_1}.$$

Il faut en effet attendre que la première itération soit terminée pour évaluer cette grandeur. Puis on calcule M_2 par la formule de BFGS.

14.6 Le diable se cache dans les détails ▲

Si l'on veut qu'un algorithme fonctionne bien, il faut soigner les « détails », qui n'en sont pas en réalité, mais qui ont été passé sous silence dans les développements précédents. De nombreuses questions d'apparence anodine doivent en effet être traitées avec le plus grand soin si l'on veut avoir une méthode numérique efficace, donnant de bons résultats sur des bans d'essai de problèmes-tests.

14.6.1 Incompatibilité des contraintes

Un problème d'optimisation non linéaire peut avoir des contraintes incompatibles, donc ne pas avoir de points admissibles, auquel cas le problème n'a évidemment pas de solution. Il est souhaitable toutefois que l'algorithme puisse détecter une telle situation. Dans l'algorithme OQS, cette situation se manifestera par l'intermédiaire du problème quadratique osculateur (PQO) qui pourra lui aussi présenter des contraintes linéaires incompatibles. Le lien entre l'incompatibilité des contraintes du problème non linéaire et celle des PQOs est toutefois complexe à étudier et on se contentera ici de présenter les méthodes qui ont été proposées pour traiter les PQOs inconsistants.

Méthodes possibles :

- La *pénalisation exacte des contraintes linéarisées* [196 ; 1982] consiste à remplacer le PQO par sa version pénalisée exacte suivante

$$\begin{cases} \min_d \nabla f(x)^\mathsf{T} d + \frac{1}{2} d^\mathsf{T} H d + \sigma \,\|(c(x) + A(x)d)^\#\|_1 \\ \|d\|_\infty \leqslant \Delta, \end{cases} \tag{14.38}$$

  dans laquelle $H \simeq \nabla^2_{xx}\ell(x,\lambda)$, $\sigma > 0$ est pris assez grand et la contrainte joue le rôle de région de confiance. Ce problème a toujours une solution, mais il est *non lisse* ; il peut se récrire sous la forme d'un problème quadratique standard, pourvu que l'on introduise des variables auxiliaires, en faisant passer le terme normé du critère en contrainte (exercice 1.7). Si $H \succ 0$, le direction d est de descente pour la fonction de mérite (14.31).

  – Avantage de l'approche : robustesse.

– Inconvénient de l'approche : pas de solveur disponible pour résoudre un problème sous la forme (14.38); la transformation de (14.38) en problème quadratique standard introduit des variables auxiliaires.

- Le *mode élastique* [232 ; 2002] consiste à relaxer le PQO comme suit

$$\begin{cases} \min_{(d,v,w)} \nabla f(x)^\mathsf{T} d + \frac{1}{2} d^\mathsf{T} H d + \sigma \sum_{i \in E \cup I} (v_i + w_i) \\ c_E(x) + A_E(x)d - v_E + w_E = 0 \\ l \leqslant c_I(x) + A_I(x)d - v_I + w_I \leqslant u \\ v_I \geqslant 0 \\ w_I \geqslant 0, \end{cases}$$

dans lequel $v = (v_E, v_I)$ et $w = (w_E, w_I)$ assurent la compatibilité des nouvelles contraintes. Par le terme de pénalisation linéaire $\sigma \sum_i (v_i + w_i)$, on essaye d'annuler (v, w) pour que, si possible, d soit une solution du PQO initial.

- Certaines approches algorithmiques de résolution du PQO, comme celle du lagrangien augmenté (section 12.4), calculent une solution de

$$\begin{cases} \min_d \nabla f(x)^\mathsf{T} d + \frac{1}{2} d^\mathsf{T} H d \\ c_E(x) + A_E(x)d + \bar{s}_E(x) = 0 \\ l \leqslant c_I(x) + A_I(x)d + \bar{s}_I(x) \leqslant u, \end{cases}$$

où $\bar{s}(x) = (\bar{s}_E(x), \bar{s}_I(x))$ est le vecteur de norme euclidienne minimale rendant les contraintes du PQO compatibles [109 ; 2016]. La direction d ainsi calculée est de descente pour Θ_σ, pourvu que σ soit assez grand et $H \succcurlyeq 0$.

14.6.2 Troncature du pas : l'effet Maratos ⊖

14.6.3 Problèmes de commande optimale ⊖

Du point de vue de l'optimisation, un problème de commande optimale discrétisé se présente sous la forme

$$(P_{SI}) \quad \begin{cases} \min\ f(x) \\ c_S(x) = 0 \\ c_I(x) \leqslant 0. \end{cases}$$

Il ressemble très fort au problème (P_{EI}), si ce n'est que la fonction $c_S : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^{m_S}$, qui remplace la fonction c_E, a des propriétés particulières. Il peut d'ailleurs y avoir en plus des contraintes d'égalité additionnelles $c_E(x) = 0$ sans ces propriétés particulières; nous les avons omises pour alléger l'exposé. Voici la structure apportée par l'équation $c_S(x) = 0$, dite *équation d'état*.

La variable $x = (y, u)$ est partitionnée en *variable d'état* $y \in \mathbb{R}^{m_S}$ et en *variable de commande* $u \in \mathbb{R}^{n - m_S}$. On partitionne de la même manière la jacobienne de c_S :

$$c_S'(x) = \begin{pmatrix} B(x) & N(x) \end{pmatrix},$$

avec une matrice $B(x)$ carrée d'ordre m_S. L'hypothèse-clé est de supposer que $B(x)$ est inversible en tout point rencontré, en particulier en la solution (et donc dans son voisinage). Cette hypothèse permet, dans certaines approches algorithmiques,

de représenter l'état comme fonction implicite de la commande et donc d'éliminer l'état du problème, ce qui peut représenter une réduction importante de la dimension du problème (lorsque $n-m_S \ll n$). Ce n'est cependant pas ce point de vue que nous allons présenter ici. Notre but est de montrer que l'algorithme OQS, dans une version dite *réduite*, permet d'avoir le même gain en dimension et donc en nombre d'opérations, tout en évitant la nécessité souvent coûteuse d'avoir des itérés qui satisfont l'équation d'état. *L'approche est surtout avantageuse lorsqu'il n'y a que des contraintes d'inégalité sur la commande*, autrement dit lorsque $\partial c_I/\partial y \equiv 0$.

Le problème quadratique osculateur (PQO) associé à (P_{SI}) en (x_k, λ_k) s'écrit

$$\begin{cases} \min_d \ g_k^{\mathsf{T}} d + \frac{1}{2} d^{\mathsf{T}} L_k d \\ c_S(x_k) + c_S'(x_k) d = 0 \\ c_I(x_k) + c_I'(x_k) d \leqslant 0. \end{cases} \tag{14.39}$$

L'hypothèse d'inversibilité de $B_k = B(x_k)$ permet d'introduire un inverse à droite A_k^- de $A_k \equiv c_S'(x_k)$ et une matrice Z_k^- dont les colonnes forment une base du noyau de A_k :

$$A_k^- = \begin{pmatrix} B_k^{-1} \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad Z_k^- = \begin{pmatrix} -B_k^{-1} N_k \\ I_{n-m} \end{pmatrix}.$$

Ces matrices ne peuvent en général pas être calculées explicitement, mais on s'autorise à les appliquer à un vecteur, ce qui requiert à chaque fois la résolution d'un système linéaire. Alors toute solution de l'équation d'état linéarisée est de la forme

$$d_k = r_k + Z_k^- h_k,$$

où

$$r_k = -A_k^- c_S(x_k) \in \mathbb{E}$$

est un pas de restauration de l'équation d'état à commande fixée et $h_k \in \mathbb{R}^{n-m_S}$ est à déterminer. Si on reporte cette structure de d_k dans (14.39), le PQO devient

$$\begin{cases} \min_h \ (g_k + L_k r_k)^{\mathsf{T}} Z_k^- h + \frac{1}{2} h^{\mathsf{T}} Z_k^{-\mathsf{T}} L_k Z_k^- h \\ c_I(x_k) + c_I'(x_k) r_k + c_I'(x_k) Z_k^- h \leqslant 0. \end{cases}$$

Ce problème se simplifie considérablement si l'on peut faire disparaître la matrice Z_k^-. Dans ce but, on suit les étapes suivantes :

- on approche $Z_k^{-\mathsf{T}} L_k Z_k^-$ par une matrice M_k générée par une technique quasi-newtonienne,
- ne pouvant plus calculer le terme $L_k r_k$ dans la partie linéaire du critère (car L_k n'est ni calculé ni approché), on le néglige,
- il faut par ailleurs supposer que la matrice $c_I'(x_k) Z_k^-$ est simple à calculer.

Les deux premières étapes définissent ce que l'on appelle les *méthodes de quasi-Newton réduites*. L'abandon du terme $L_k r_k$ fait perdre la convergence superlinéaire, mais on garde toutefois la *convergence superlinéaire en* 2 *pas*, c'est-à-dire

$$\frac{\|x_{k+2} - x_*\|}{\|x_k - x_*\|} \to 0.$$

Le troisième point ci-dessus sera certainement satisfait s'il y a peu de contraintes d'inégalité ou si celles-ci portent uniquement sur les variables de commande (alors $c_I'(x_k)Z_k^- = (\partial c_I/\partial u)(x_k)$). Dans ce dernier cas, le PQO devient particulièrement simple

$$\begin{cases} \min_h \ g_k^\mathsf{T} Z_k^- h + \frac{1}{2}\, h^\mathsf{T} M_k h \\ c_I(x_k) + c_I'(x_k) r + (\partial c_I/\partial u)(x_k) h \leqslant 0. \end{cases}$$

Le vecteur $Z_k^{-\mathsf{T}} g_k = -N_k^\mathsf{T} B_k^{-\mathsf{T}} \nabla_y f(x_k) + \nabla_u f(x_k)$ est appelé le *gradient réduit*. On y reconnaît l'*état adjoint* $B_k^{-\mathsf{T}} \nabla_y f(x_k)$.

Logiciels ▲

- SNOPT [232 ; 2002].

Notes

La section **??** ne fait que guigner sur les inclusions fonctionnelles en espérant inciter le lecteur à davantage s'intéresser davantage à ce vaste sujet [159].

On a mis longtemps à mettre au point l'algorithme de Newton pour résoudre les problèmes d'optimisation avec contraintes d'égalité et d'inégalité. Ce n'est, en effet, qu'au milieu des années 1970 que cette recherche a abouti, soit près de 30 ans après l'invention de l'algorithme du simplexe (chapitre 15). C'est d'ailleurs ce dernier que l'on a d'abord essayé de généraliser à l'optimisation non linéaire [544], mais la voie n'était pas directe. Les numériciens ont ensuite développé les méthodes de pénalisation (chapitre 12), en particulier l'approche par lagrangien augmenté. La prise de conscience de l'existence d'une méthode newtonienne directe n'est venue qu'ensuite [450, 282, 283, 442].

Pour un état de l'art sur l'algorithme OQS, on pourra consulter par exemple la section 5 de [252 ; 2005], la partie III de [66 ; 2006], Fletcher [199 ; 2010] et l'ouvrage technique et approfondi d'Izmailov et Solodov [308 ; 2014]. Voir aussi Izmailov, Kurennoy et Solodov [307 ; 2012]. La dérivation du résultat de convergence locale de l'algorithme OQS (section 14.1) à partir de celui de Josephy-Newton est reprise de Bonnans [65 ; 1994]. Pour l'établissement de conditions kantorovitchéennes de convergence, on pourra consulter Argyros et Hilout [17 ; 2010].

Exercices

14.1. *Non convergence locale de l'algorithme* (14.16). Écrire l'algorithme dont les itérés sont calculés par la récurrence $x_{k+1} = x_k + d_k$, avec d_k solution de (14.16), sous la forme $x_{k+1} = \Phi(x_k)$, où $\Phi : \mathbb{E} \to \mathbb{E}$. On supposera que x_k est voisin d'une solution x_*, que $c'(x_*)$ est surjective et que $\nabla^2 f(x_*)$ est inversible. Montrez que le spectre de $\Phi'(x_*)$ n'est pas dans la boule unité ouverte pour l'exemple en $x = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2$ suivant :

$$\begin{cases} \min_x \ -a x_1^2 + 2x_2 \\ x_1^2 + x_2^2 = 1, \end{cases}$$

dans lequel $a \in]0, 1[$.

Partie IV

Étude de problèmes particuliers

15 Optimisation linéaire : théorie et algorithme du simplexe

Curiously, up to 1947 when I first proposed that a model based on linear inequalities be used for planning activities of large-scale enterprises, linear inequality theory had produced only 40 or so papers, in contrast to linear equation theory and the related subjects of linear algebra and approximation, which had produced a vast literature.

G.B. Dantzig (1914-2005). Origins of the simplex method [140 ; 1990].

Connaissances supposées. Une grande partie de la section 2.4 nous sera utile, en particulier pour les notions de polyèdre convexe et de sommet, ainsi que pour le résultat d'existence de solution de problème d'optimisation linéaire (théorème 2.19). Les conditions d'optimalité d'un problème d'optimalité linéaire seront directement déduites des conditions de Karush, Kuhn et Tucker (théoreme 4.30 et proposition 4.31). Le problème dual d'un problème d'optimisation linéaire s'obtiendra par la dualité min-max (section 13.1).

15.1 Introduction

15.1.1 Le problème à résoudre

Un *problème d'optimisation linéaire* (OL) est un problème d'optimisation dans lequel le critère et les fonctions définissant les contraintes sont linéaires (on devrait dire affines) ; il s'agit donc de minimiser une fonction linéaire sur un polyèdre convexe. Comme nous le verrons, la formulation suivante du problème est tout à fait générale. Il s'agit de trouver la solution $x \in \mathbb{R}^n$ du problème

$$(P_L) \quad \begin{cases} \inf_x \ c^\mathsf{T} x \\ Ax = b \\ x \geqslant 0. \end{cases} \tag{15.1}$$

Un problème d'optimisation linéaire écrit de cette manière est dit sous *forme standard*. On appelle *critère* du problème, la fonction linéaire $x \mapsto c^\mathsf{T} x$. Les données dans (P_L) sont deux vecteurs $c \in \mathbb{R}^n$ (appelé *coût* du problème) et $b \in \mathbb{R}^m$ (en général $m \leqslant n$), et une matrice A de dimension $m \times n$. La contrainte d'inégalité $x \geqslant 0$ veut dire

que toutes les composantes de x doivent être positives : $x_i \geqslant 0$ pour tout $i \in [1:n]$. On notera $x > 0$, lorsque toutes les composantes de x seront strictement positives. L'ensemble

$$\mathbb{R}^n_+ = \{x \in \mathbb{R}^n : x \geqslant 0\}$$

est appelé l'*orthant positif* de $\mathbb{R}^n$.

On rappelle que l'on dit que le problème (P_L) est *réalisable* si son *ensemble admissible*

$$\mathcal{F}_{\text{P}} := \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b,\ x \geqslant 0\}$$

est non vide. Un point de $\mathcal{F}_{\text{P}}$ est dit *admissible*. On dit que (P_L) est *borné* si la valeur optimale de (P_L) est finie.

Dans ce chapitre, nous allons étudier le problème (P_L) (structure et propriétés) et donner un algorithme pour le résoudre : l'algorithme du simplexe. Les algorithmes de points intérieurs seront décrits et étudiés au chapitre 16. Remarquons déjà que le problème (P_L) n'est « intéressant », c'est-à-dire qu'il mérite une étude approfondie, que par la présence des contraintes d'inégalité. En effet, sans ces contraintes le problème se réduit à deux cas complémentaires triviaux. Si $c \in \mathcal{N}(A)^\perp$, tout point x vérifiant $Ax = b$ est solution. Si $c \notin \mathcal{N}(A)^\perp$, il existe une direction d telle que $Ad = 0$ et $c^\mathsf{T} d < 0$ et donc $c^\mathsf{T}(x + td) \to -\infty$ lorsque $t \to +\infty$: si le problème est réalisable (en l'occurrence, il existe un x tel que $Ax = b$), il n'est pas borné.

En ce qui concerne les algorithmes de résolution de (P_L), on distingue deux classes principales de méthodes.

- Les *méthodes de points-frontière* génèrent des itérés sur la frontière de l'ensemble admissible $\mathcal{F}_{\text{P}}$. La méthode typique de cette classe est l'*algorithme du simplexe*, introduit par Dantzig en 1947 [139 ; 1951] ; il consiste à faire des déplacements le long des arêtes du polyèdre convexe $\mathcal{F}_{\text{P}}$; nous le présenterons et l'étudierons à la section 15.4. Cet algorithme n'est pas polynomial dans le pire des cas, bien qu'il soit polynomial en moyenne et en perturbations moyennées (section **??**).
- Les *méthodes de points intérieurs*, développées à partir des travaux de Karmarkar [323 ; 1984], génèrent des itérés dans l'intérieur relatif de l'ensemble admissible $\mathcal{F}_{\text{P}}$. Ces méthodes peuvent être polynomiales et sont particulièrement intéressantes lorsqu'il y a beaucoup de contraintes d'inégalité, parce qu'elles ne ressentent pas l'irrégularité du bord de l'ensemble admissible. Nous présenterons et étudierons quelques algorithmes de points intérieurs au chapitre 16.

15.1.2 Formulations canoniques

Un problème d'optimisation linéaire se présente souvent sous l'une des deux formes suivantes : la forme standard (P_L) donnée ci-dessus et la *forme canonique*

$$(P'_L) \quad \begin{cases} \min (c')^\mathsf{T} x \\ A'x \leqslant b'. \end{cases}$$

Ces deux formulations sont équivalentes dans le sens où le problème (P_L) peut s'écrire sous la forme (P'_L) :

$$\begin{cases} \min c^{\mathsf{T}} x \\ \begin{pmatrix} A \\ -A \\ -I \end{pmatrix} x \leqslant \begin{pmatrix} b \\ -b \\ 0 \end{pmatrix} \end{cases}$$

et inversement, le problème (P'_L) peut s'écrire sous la forme (P_L) en décomposant $x = u - v$, avec $u \geqslant 0$ et $v \geqslant 0$, et en introduisant des *variables d'écart* $z \geqslant 0$:

$$\begin{cases} \min \begin{pmatrix} c^{\mathsf{T}} & -c^{\mathsf{T}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \\ z \end{pmatrix} \\ A'u - A'v + z = b' \\ u \geqslant 0, \quad v \geqslant 0, \quad z \geqslant 0. \end{cases}$$

On a pris l'habitude de décrire et d'étudier les algorithmes de résolution des problèmes d'optimisation linéaire mis sous forme standard (P_L) et c'est ce que nous ferons dans ce chapitre et le suivant. Cependant, il peut être plus avantageux de considérer une autre formulation, en fonction du problème que l'on a à résoudre. D'autre part, les codes d'optimisation linéaire généralistes acceptent le plus souvent des contraintes écrites sous la forme :

$$Ax = b \quad \text{et} \quad l \leqslant Bx \leqslant u,$$

où les matrices A et B et les vecteurs b, l et u ont des dimensions appropriées. Il faut donc parfois adapter les algorithmes au cadre que l'on considère ; ceci se fait en général sans difficulté.

15.1.3 Exemples : problèmes d'optimisation dans des réseaux

Un *réseau* n'est pas autre chose qu'un *graphe* (orienté ou non), c'est-à-dire une collection de nœuds et d'arcs qui relient ces nœuds. Disons qu'il y a m nœuds, indicés par $i = 1, \ldots, m$, et n arcs, indicés par $j = 1, \ldots, n$. Ces derniers peuvent aussi être spécifiés par des couples (ordonnés ou non, suivant que le graphe est ou n'est pas orienté) formés des nœuds qu'ils relient : l'arc (i_1, i_2) relie les nœuds i_1 et i_2.

Dans la discussion qui suit, le réseau est supposé être utilisé comme support à l'acheminement d'un produit (eau, gaz, électricité, voitures, trains, avions, télécommunications, messages internet, quantité abstraite, *etc*). La quantité de produit qui transite par l'arc j est notée x_j. Il est normal de supposer que c'est une grandeur positive. L'équilibre du réseau s'exprime en écrivant que la quantité de produit qui sort du nœud i est égale à la quantité qui y entre plus la quantité b_i qui y est produite (« loi de Kirchhoff »). Pour tout i, on doit avoir

$$\sum_{\substack{j\,:\,\text{arc sortant} \\ \text{du nœud } i}} x_j = \sum_{\substack{j\,:\,\text{arc entrant} \\ \text{du nœud } i}} x_j + b_i. \tag{15.2}$$

La quantité b_i produite au nœud i peut représenter ce qui y est apporté (auquel cas $b_i > 0$) ou ce qui y est consommé ou demandé (auquel cas $b_i < 0$). Les équations précédentes s'écrivent sous forme matricielle :

$$Ax = b \quad \text{et} \quad x \geqslant 0, \tag{15.3}$$

où la matrice A est appelée la *matrice d'incidence du réseau*. Cette matrice peut avoir des dimensions considérables en pratique, mais elle est très creuse puisqu'elle n'a que deux éléments non nuls par colonne. En effet, au vu de (15.2), la colonne j associée à l'arc j contient $A_{ij} = +1$ si i est le nœud d'origine de l'arc j, $A_{ij} = -1$ si i est le nœud de destination de l'arc j et $A_{ij} = 0$ dans les autres cas. En particulier, la somme des lignes de A est nulle, ce qui implique que A n'est pas surjective. Ceci peut poser des difficultés algorithmiques et requiert au moins une condition de compatibilité sur b, à savoir $b \in \mathcal{R}(A)$, ce qui conduit à

$$\sum_{i=1}^{m} b_i = 0. \tag{15.4}$$

On montre cependant que A est de rang $m-1$ lorsque le graphe associé au réseau est *connexe*, ce qui veut dire que deux nœuds distincts i et i' peuvent être reliés par une chemin (une suite d'arcs (i_1, i_2), (i_2, i_3), $\ldots$, (i_{p-1}, i_p), avec $i_1 = i$ et $i_p = i'$) ; voir [49] par exemple.

Un exemple de problème d'optimisation linéaire classique dans les réseaux est le *problème du transport à coût minimal*. On cherche à acheminer des produits identiques depuis certains *nœuds d'origine* (disons pour $i \in O$) jusqu'à des *nœuds de destination* (disons pour $i \in D$, avec $O \cap D = \varnothing$). Ceci s'exprime par le positionnement des composantes de b aux valeurs désirées : $b_O > 0$, $b_D < 0$ et $b_i = 0$ si $i \notin O \cup D$, tout en respectant (15.4). D'autre part, en supposant que le coût de transport sur chaque arc est linéaire en x_j (coût c_j par unité transportée), le coût total du transport sera

$$\sum_{j=1}^{n} c_j x_j = c^{\mathsf{T}} x.$$

C'est la quantité que l'on cherche à minimiser. On reconnaît dans la minimisation de ce critère sous les contraintes de réseau (15.3), le problème d'optimisation linéaire sous forme standard (P_L).

Un autre exemple de problème d'optimisation linéaire classique et celui du *plus court chemin dans un graphe*. C'est un cas particulier du problème précédent : $b_{i_0} = +1$ au nœud de départ i_0, $b_{i_1} = -1$ au nœud d'arrivée i_1 et les autres b_i sont nuls, tandis que $c_j > 0$ donne la longueur du chemin représenté par l'arc j. Si $\bar{x}$ est la solution du problème, $\bar{x}_j = 0$ signifie que l'on ne passe pas par l'arc j et $\bar{x}_j = 1$ signifie que l'on y passe. On peut avoir des valeurs entre 0 et 1 si le problème a plusieurs solutions.

15.2 Étude du problème

15.2.1 Structure de l'ensemble admissible

L'ensemble admissible $\mathcal{F}_{\text{P}}$ d'un problème d'optimisation linéaire est un polyèdre convexe (voir la section 2.4), exprimé dans une représentation duale. Les développements théoriques et algorithmiques en optimisation linéaire se font en général sur la forme suivante de l'ensemble admissible

$$\mathcal{F}_{\text{P}} = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b,\ x \geqslant 0\},$$

où A est $m \times n$ et $b \in \mathbb{R}^m$. On supposera alors toujours que

$$A \text{ est surjective.}$$

Théoriquement, ce n'est pas une hypothèse restrictive (en pratique, c'est plus délicat). En effet si $b \notin \mathcal{R}(A)$, l'ensemble admissible est vide et le problème est mal posé. Sinon, on peut toujours éliminer les équations redondantes de $Ax = b$ pour se ramener à une matrice surjective (si des lignes de A sont linéairement dépendantes [$A^{\mathsf{T}}y = 0$ pour un $y \neq 0$], les éléments de b obéissent à la même dépendance [$b^{\mathsf{T}}y = 0$]).

On adopte une notation déjà utilisée. Si $x \in \mathbb{R}^n_+$, on écrit

$$I^+(x) := \{i : x_i > 0\} \quad \text{et} \quad I^0(x) := \{i : x_i = 0\}.$$

On rappelle que $x \in \mathcal{F}_{\text{P}}$ est un sommet de $\mathcal{F}_{\text{P}}$ si la sous-matrice $A_{:I^+(x)}$, formée des colonnes de A avec indices dans $I^+(x)$, est injective (proposition 2.20). On a donc nécessairement $|I^+(x)| \leqslant m$, et on peut bien sûr avoir $|I^+(x)| < m$.

Définition 15.1 On dit qu'un sommet $x \in \mathcal{F}_{\text{P}}$ est *dégénéré* si $|I^+(x)| < m$ et qu'il est *non dégénéré* si $|I^+(x)| = m$. □

Un concept jouant un rôle-clé dans l'algorithme du simplexe (section 15.4) est celui de base d'indices.

Définitions 15.2 On appelle *base d'indices* un ensemble B de m indices pris dans $[1:n]$ tels que la sous-matrice $A_{:B}$ formée des m colonnes correspondantes de A soit inversible.

Si $x \in \mathbb{R}^n$, les composantes x_i avec $i \in B$ sont alors dites *basiques* et celles avec $i \notin B$ sont dites *non basiques*.

On dit qu'une base d'indices B est *associée* à un sommet $x \in \mathcal{F}_{\text{P}}$ si $I^+(x) \subseteq B$. □

À une base d'indices B on associe l'ensemble d'indices complémentaire $N = [1:n] \setminus B$. Après permutations éventuelles des colonnes, on pourra donc écrire

$$A = \begin{pmatrix} A_{:B} & A_{:N} \end{pmatrix},$$

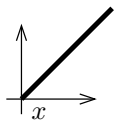
avec $A_{:B}$ inversible. On note (x_B, x_N) la partition correspondante d'un point $x \in \mathbb{R}^n$.

Un sommet non dégénéré n'a, bien sûr, qu'une seule base d'indices qui lui est associée, à savoir $I^+(x)$. Si x est un sommet dégénéré, le nombre de bases d'indices qui lui sont associées peut être très grand, bien que majoré par

$$\binom{n - |I^+(x)|}{m - |I^+(x)|} = \binom{n - |I^+(x)|}{n - m}.$$

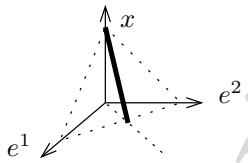
Exemples 15.3 Dans $\mathbb{R}^2$, $x = 0$ est un sommet dégénéré de l'ensemble défini par

$$\begin{cases} x_1 - x_2 = 0 \\ x \geqslant 0. \end{cases}$$



Dans $\mathbb{R}^3$, le point $x = (0, 0, 1)$ est un sommet dégénéré de l'ensemble défini par

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 1 \\ x_1 - x_2 \qquad = 0 \\ x \geqslant 0. \end{cases}$$



□

On connait des problèmes d'optimisation linéaire pratiques dans lesquels l'ensemble admissible a un nombre factoriel de sommets et chaque sommet a un nombre exponentiel de bases d'indices [29 ; 1972]. On a donc imaginé des techniques capables de faire face à cette dégénérescence.

L'optimisation linéaire a son propre jargon, que l'on doit reconnaître si l'on veut comprendre les ouvrages et articles écrits par les spécialistes de la discipline, en particulier les contributions fondatrices. Certains termes, chargés d'histoire, apportent pourtant d'inutiles complications et confusions ; nous les éviterons. Il en va ainsi de *solution* pour désigner un point (pour nous, une *solution* sera une solution du problème d'optimisation linéaire), de *solution admissible* pour désigner un point admissible ou encore de *solution basique admissible* pour désigner un sommet de $\mathcal{F}_{\text{P}}$. Plus d'un demi-siècle après l'introduction de cette terminologie compliquée, nous nous sommes permis de la simplifier et de l'accorder avec celle utilisée en analyse convexe et en optimisation non linéaire.

Jargon de l'optimisation linéaire	Terminologie adoptée
base	base d'indices
solution	point
solution admissible	point admissible
solution basique	—
solution basique admissible	sommet
solution admissible optimale	solution
solution basique admissible optimale	solution-sommet

On trouvera dans le lexique en fin d'ouvrage la terminologie anglo-saxone dont sont issus les termes de la première colonne.

15.2.2 Existence de solution et conditions d'optimalité

On considère le problème (P_L) sous la forme standard

$$(P_L) \quad \begin{cases} \min c^{\mathsf{T}} x \\ Ax = b \\ x \geqslant 0. \end{cases}$$

On note

$$\inf(P_L) := \inf_{x \in \mathcal{F}_{\text{P}}} c^{\mathsf{T}} x$$

la valeur optimale de (P_L).

Pour le problème (P_L), l'existence de solution ne résulte pas directement du théorème sur la minimisation de fonctions continues sur un compact (théorème 1.2). En effet, l'ensemble admissible $\mathcal{F}_P$ n'est pas nécessairement compact. De plus, $x \mapsto c^T x$ ne tend pas nécessairement vers $+\infty$ lorsque $\|x\| \to \infty$ dans $\mathcal{F}_P$ (sauf si l'ensemble des solutions est borné et si $\mathcal{F}_P$ n'est pas borné, voir l'exercice 15.4). Il est donc nécessaire de donner une démonstration spécifique. Une possibilité est d'utiliser la remarque 2.18 comme dans la démonstration de la proposition 2.19. Nous rappelons le résultat ci-dessous.

Théorème 15.4 (existence de solution) *Le problème (P_L) a une solution si, et seulement si, il est réalisable ($\mathcal{F}_P \neq \varnothing$) et borné ($\inf f > -\infty$).*

L'algorithme du simplexe repose sur le résultat suivant. Cet algorithme va rechercher en effet une solution-sommet, dont l'existence est assurée par la proposition qui suit. Ce résultat dépend fortement de la représentation de l'ensemble admissible adoptée dans (P_L) et ne serait plus vrai pour un ensemble admissible de la forme $\{x \in \mathbb{R}^n : Ax \leqslant b\}$.

Proposition 15.5 (existence de solution-sommet) *Si le problème (P_L) a une solution, alors il a une solution en un sommet de $\mathcal{F}_P$.*

Démonstration. L'ensemble des solutions de (P_L),

$$\mathrm{Sol}(P_L) = \{x \in \mathbb{R}^n : c^T x = \mathrm{val}(P_L),\ Ax = b,\ x \geqslant 0\},$$

est un polyèdre convexe écrit sous forme standard. Il a donc un sommet (proposition 2.20), disons $\hat{x}$. D'autre part, $\mathrm{Sol}(P_L)$ est une face de $\mathcal{F}_P$ (exercice 2.9). Donc son sommet $\hat{x}$ est aussi un sommet de $\mathcal{F}_P$ (exercice 2.14, point 2). □

Voici le résultat donnant les conditions d'optimalité du problème (P_L).

Proposition 15.6 (conditions d'optimalité) *Le point x est solution de (P_L) si, et seulement si, il existe $y \in \mathbb{R}^m$ et $s \in \mathbb{R}^n$ tels que*

$$\begin{cases} (a) & A^T y + s = c, \quad s \geqslant 0 \\ (b) & Ax = b, \quad x \geqslant 0 \\ (c) & x^T s = 0. \end{cases} \tag{15.5}$$

Démonstration. Ce sont les conditions de KKT qui sont nécessaires (on utilise ici le fait que les contraintes de (P_L) sont qualifiées, car affines) et suffisantes (car le problème (P_L) est convexe). On les obtient en introduisant le *lagrangien*

$$\ell(x, y, s) = c^T x - y^T (Ax - b) - x^T s.$$

□

La nécessité des conditions (15.5) peut aussi se voir en observant que, par optimalité de x, le critère augmente le long des directions d tangentes en x à l'ensemble admissible (voir le théorème 4.6), ce qui s'exprime par

$$c \in \{d : Ad = 0,\ d_I \geqslant 0\}^+, \quad \text{avec } I = \{i : x_i = 0\},$$

et en utilisant le lemme de Farkas. D'autre part, le fait que les conditions (15.5) soient suffisantes pour impliquer l'optimalité de x peut aussi se montrer directement : pour tout $x' \in \mathcal{F}_{\text{P}}$, on a

$$\begin{aligned} c^{\mathsf{T}}x &= s^{\mathsf{T}}x + y^{\mathsf{T}}Ax \qquad [\text{par } (a)] \\ &= y^{\mathsf{T}}b \qquad [\text{par } (b) \text{ et } (c)] \\ &\leqslant s^{\mathsf{T}}x' + y^{\mathsf{T}}Ax' \qquad [\text{par } Ax' = b,\ x' \geqslant 0 \text{ et } s \geqslant 0] \\ &= c^{\mathsf{T}}x' \qquad [\text{par } (a)]. \end{aligned}$$

Le couple (y, s) donné par la proposition précédente est appelé *solution duale* du problème linéaire (P_L) et x est alors appelé *solution primale*. La variable s est aussi appelée *variable d'écart duale*, car elle joue le rôle de variable d'écart dans la relation $A^{\mathsf{T}}y \leqslant c$, qui est une autre façon d'écrire l'équation (15.5)(a). On note $\mathcal{S}_{\text{P}} \subseteq \mathbb{R}^n$ l'ensemble des solutions primales et $\mathcal{S}_{\text{D}} \subseteq \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n$ l'ensemble des solutions duales. On note aussi $\mathcal{S}_{\text{PD}}$ l'ensemble des triplets (x, y, s) qui sont solutions du système d'optimalité (15.5). Malgré la non-linéarité de (15.5)(c), l'ensemble $\mathcal{S}_{\text{PD}}$ est un convexe, comme le montre la proposition suivante.

Proposition 15.7 (produit cartésien des solutions) *On a*

$$\mathcal{S}_{\text{PD}} = \mathcal{S}_{\text{P}} \times \mathcal{S}_{\text{D}},$$

en particulier, $\mathcal{S}_{\text{PD}}$ est un polyèdre convexe. Autrement dit, si (x^1, y^1, s^1) et (x^2, y^2, s^2) sont des solutions primales-duales alors (x^1, y^2, s^2) et (x^2, y^1, s^1) le sont aussi.

Démonstration. Par hypothèse, on a

$$\begin{cases} A^{\mathsf{T}}y^1 + s^1 = c, \quad s^1 \geqslant 0 \\ Ax^1 = b, \quad x^1 \geqslant 0 \\ (x^1)^{\mathsf{T}}s^1 = 0 \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} A^{\mathsf{T}}y^2 + s^2 = c, \quad s^2 \geqslant 0 \\ Ax^2 = b, \quad x^2 \geqslant 0 \\ (x^2)^{\mathsf{T}}s^2 = 0. \end{cases}$$

On voit qu'il suffit de montrer que $(x^1)^{\mathsf{T}}s^2 = 0$ et $(x^2)^{\mathsf{T}}s^1 = 0$. Comme $c^{\mathsf{T}}x^1 = c^{\mathsf{T}}x^2$, on a

$$\begin{aligned} (x^1)^{\mathsf{T}}s^2 &= (x^1)^{\mathsf{T}}(c - A^{\mathsf{T}}y^2) \\ &= (x^1)^{\mathsf{T}}c - b^{\mathsf{T}}y^2 \\ &= (x^2)^{\mathsf{T}}c - (Ax^2)^{\mathsf{T}}y^2 \\ &= (x^2)^{\mathsf{T}}(c - A^{\mathsf{T}}y^2) \\ &= (x^2)^{\mathsf{T}}s^2 \\ &= 0. \end{aligned}$$

De même pour $(x^2)^\mathsf{T} s^1 = 0$.

On note finalement que, comme ensembles de solutions de problèmes d'optimisation linéaires, $\mathcal{S}_\text{P}$ et $\mathcal{S}_\text{D}$ sont des polyèdres convexes, si bien qu'il en est de même de $\mathcal{S}_\text{PD}$ (point 8 de l'exercice 2.18). □

On montrera plus loin (en section 15.3) que les couples formés des solutions primales et duales sont les points-selles du lagrangien ℓ sur $\mathbb{R}^n \times (\mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n_+)$. Le résultat précédent peut donc aussi se déduire de cette observation puisque l'ensemble des points-selles est le produit cartésien de l'ensemble des solutions primales par l'ensemble des solutions duales (corollaire 13.4).

L'identité (15.5)(c) forme ce que l'on appelle les *conditions de complémentarité*. Comme $x \geqslant 0$ et $s \geqslant 0$, elle s'écrit de manière équivalente

$$\forall i \in [1:n], \quad x_i > 0 \quad \Longrightarrow \quad s_i = 0,$$

qui exprime que si la i-ième contrainte d'inégalité n'est pas active, le multiplicateur associé est nul. On dit qu'une solution primale-duale (x, y, s) de (P_L) est *strictement complémentaire* si

$$\forall i \in [1:n], \quad x_i > 0 \quad \Longleftrightarrow \quad s_i = 0.$$

Toutes les solutions ne sont pas nécessairement strictement complémentaires. Le résultat suivant montre cependant qu'en optimisation linéaire on peut toujours trouver une solution strictement complémentaire.

Introduisons deux ensembles d'indices $\mathfrak{B}$ et $\mathfrak{N}$, qu'il faudra se garder de confondre avec la base d'indices B et son complémentaire N dans $[1:n]$, introduits au début de ce chapitre :

$$\begin{aligned} \mathfrak{B} &:= \{i \in [1:n] : \exists\, x \in \mathcal{S}_\text{P} \text{ vérifiant } x_i > 0\} \\ \mathfrak{N} &:= \{i \in [1:n] : \exists\, (y,s) \in \mathcal{S}_\text{D} \text{ vérifiant } s_i > 0\}. \end{aligned}$$

Par les conditions de complémentarité et du fait que l'ensemble des solutions primales-duales est un produit cartésien (proposition 15.7), ces deux ensembles n'ont pas d'indice commun : $\mathfrak{B} \cap \mathfrak{N} = \varnothing$. En effet, si $i \in \mathfrak{B}$, alors $s_i = 0$ pour toute solution duale (y, s), et donc $i \notin \mathfrak{N}$. Compte tenu de cette observation, montrer qu'il existe une solution primale-duale strictement complémentaire revient à montrer que $(\mathfrak{B}, \mathfrak{N})$ forme une partition de $[1:n]$.

Proposition 15.8 (existence d'une solution strictement complémentaire) *Si le problème (P_L) a une solution, alors il a une solution primale-duale strictement complémentaire, et donc*

$$\mathfrak{B} \cap \mathfrak{N} = \varnothing \quad \textit{et} \quad \mathfrak{B} \cup \mathfrak{N} = [1:n]. \tag{15.6}$$

Démonstration. Construisons d'abord la solution primale. Pour que celle-ci ait le plus grand nombre de composantes non nulles possible, on l'écrit comme combinaison convexe de solutions ayant chacune au moins une composante strictement positive :

par définition de $\mathfrak{B}$, on sait que pour tout $i \in \mathfrak{B}$, on peut choisir une solution $\bar{x}^i$ de (P_L) avec $\bar{x}^i_i > 0$. On prend

$$\bar{x} = \frac{1}{|\mathfrak{B}|} \sum_{i \in \mathfrak{B}} \bar{x}^i,$$

où $|\mathfrak{B}|$ désigne le nombre d'éléments de $\mathfrak{B}$. C'est aussi une solution (c'est une combinaison convexe de solutions d'un problème convexe, ou on vérifie directement que $c^\mathsf{T}\bar{x} = \inf f$, $A\bar{x} = b$, $\bar{x} \geqslant 0$) et elle vérifie $\bar{x}_\mathfrak{B} > 0$ (c'est une solution avec le moins de contraintes actives possible, située dans l'intérieur relatif de la face optimale, voir l'exercice 15.7). D'après les conditions d'optimalité de la proposition 15.6, il existe $(y_0, s_0) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n$ tel que

$$\begin{cases} A^\mathsf{T} y_0 + s_0 = c, \\ 0 \leqslant s_0 \perp \bar{x} \geqslant 0. \end{cases} \tag{15.7}$$

D'après la proposition 15.7, il reste à trouver une solution duale $(\bar{y}, \bar{s})$ avec $\bar{s}_i > 0$ pour $i \notin \mathfrak{B}$. Dans ce but, on considère le problème d'optimisation linéaire suivant

$$\begin{cases} \min_x -e_{\mathfrak{B}^c}^\mathsf{T} x \\ Ax = b \\ x \geqslant 0 \\ c^\mathsf{T} x \leqslant \mathrm{val}(P_L), \end{cases}$$

où l'on a noté $e_{\mathfrak{B}^c}$ le vecteur de $\mathbb{R}^n$ dont toutes composantes avec indices dans le complémentaire $\mathfrak{B}^c$ de $\mathfrak{B}$ valent 1 et les autres composantes sont nulles. L'ensemble admissible de ce problème est formé des solutions de (P_L) et par définition de $\mathfrak{B}$, sa valeur optimale est nulle. Alors $\bar{x}$ est solution de ce problème et l'on peut trouver des multiplicateurs optimaux $(y_1, s_1, t_1) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$ tels que

$$\begin{cases} A^\mathsf{T} y_1 + s_1 + e_{\mathfrak{B}^c} = t_1 c \\ 0 \leqslant s_1 \perp \bar{x} \geqslant 0 \\ 0 \leqslant t_1 \perp (\mathrm{val}(P_L) - c^\mathsf{T}\bar{x}) \geqslant 0. \end{cases}$$

Si t_1 n'est pas nul, on peut conclure avec la solution duale $(y_1, s_1 + e_{\mathfrak{B}^c})/t_1$, mais rien ne garantit que $t_1 \neq 0$. On combine alors cette solution duale avec celle donnée en (15.7) :

$$\bar{y} := \frac{1}{1+t_1}(y_0 + y_1) \quad \text{et} \quad \bar{s} := \frac{1}{1+t_1}(s_0 + s_1 + e_{\mathfrak{B}^c}),$$

qui est clairement une solution duale de (P_L). De plus, comme $s_0 \geqslant 0$ et $s_1 \geqslant 0$, on a $\bar{s}_{\mathfrak{B}^c} > 0$. □

En réalité, comme l'exercice 15.7 demande de le montrer, l'ensemble $\mathcal{S}_{\text{PD}}^{\text{sc}}$ des solutions primales-duales strictement complémentaires se confond avec l'intérieur relatif de l'ensemble des solutions primales-duales :

$$\mathcal{S}_{\text{PD}}^{\text{sc}} = \mathcal{S}_{\text{PD}}^{\oplus}.$$

Les ensembles d'indices $\mathfrak{B}$ et $\mathfrak{N}$ permettent de donner une description simple de l'ensemble $\mathcal{S}_{\text{P}}$ des solutions primales et l'ensemble $\mathcal{S}_{\text{D}}$ des solutions duales de (P_L). Pour une raison qui apparaîtra claire plus loin, on note

$$\mathcal{F}_{\text{D}} := \{(y,s) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n : A^{\mathsf{T}} y + s = c,\ s \geqslant 0\}.$$

Proposition 15.9 (faces optimales primale et duale) *Si (P_L) a une solution, alors l'ensemble de ses solutions primales est la face exposée de $\mathcal{F}_{\text{P}}$ définie par*

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{\text{P}} &= \{x \in \mathcal{F}_{\text{P}} : x_{\mathfrak{N}} = 0\} \\ &= \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b,\ x_{\mathfrak{B}} \geqslant 0,\ x_{\mathfrak{N}} = 0\} \end{aligned} \tag{15.8a}$$

et l'ensemble de ses solutions duales est la face exposée de $\mathcal{F}_{\text{D}}$ définie par

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{\text{D}} &= \{(y,s) \in \mathcal{F}_{\text{D}} : s_{\mathfrak{B}} = 0\} \\ &= \{(y,s) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n : A^{\mathsf{T}} y + s = c,\ s_{\mathfrak{B}} = 0,\ s_{\mathfrak{N}} \geqslant 0\}. \end{aligned} \tag{15.8b}$$

Démonstration. Le fait que $\mathcal{S}_{\text{P}}$ soit une face exposée de l'ensemble convexe $\mathcal{F}_{\text{P}}$ provient de l'expression $\mathcal{S}_{\text{P}} = \{x \in \mathcal{F}_{\text{P}} : c^{\mathsf{T}} x \leqslant \text{val}(P_L)\}$ de l'ensemble des solutions primales.

Démontrons à présent la première égalité dans (15.8a) (la seconde se déduit facilement de la première et de (15.6)). Si $x \in \mathcal{S}_{\text{P}}$, alors $x \in \mathcal{F}_{\text{P}}$ et $x_{\mathfrak{N}} = 0$ (par la proposition 15.8 et la définition de $\mathfrak{B}$). Inversement, si $x \in \mathcal{F}_{\text{P}}$ et $x_{\mathfrak{N}} = 0$, alors en prenant une solution duale (y,s) arbitraire (elle existe car (P_L) a une solution), le triplet (x,y,s) vérifie les conditions d'optimalité (15.5) (car $s_{\mathfrak{B}} = 0$ d'après la proposition 15.8 et la complémentarité) ; donc x est solution de (P_L).

Les affirmations concernant $\mathcal{S}_{\text{D}}$ se démontrent de la même manière. □

L'exercice 15.7 demande également de démontrer que l'intérieur relatif de $\mathcal{S}_{\text{P}}$ est donné par

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{\text{P}}^{\ominus} &= \{x \in \mathcal{S}_{\text{P}} : x_{\mathfrak{B}} > 0\} \\ &= \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b,\ x_{\mathfrak{B}} > 0,\ x_{\mathfrak{N}} = 0\} \end{aligned} \tag{15.9a}$$

et l'intérieur relatif de $\mathcal{S}_{\text{D}}$ est donné par

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{\text{D}}^{\ominus} &= \{x \in \mathcal{S}_{\text{D}} : s_{\mathfrak{N}} > 0\} \\ &= \{(y,s) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n : A^{\mathsf{T}} y + s = c,\ s_{\mathfrak{B}} = 0,\ s_{\mathfrak{N}} > 0\}. \end{aligned} \tag{15.9b}$$

15.3 Dualité

15.3.1 Dualité en optimisation linéaire

Nous ferons référence ici aux notions vues à la section 13.1. On part du problème d'optimisation linéaire

$$(P_L) \quad \begin{cases} \min c^{\mathsf{T}} x \\ Ax = b \\ x \geqslant 0 \end{cases}$$

et on introduit la fonction de couplage

$$\varphi(x,y) = c^{\mathsf{T}}x - y^{\mathsf{T}}(Ax-b),$$

par laquelle on n'a dualisé que les contraintes d'égalité. On a

$$\inf_{x\geqslant 0}\sup_{y}\varphi(x,y) \quad = \quad \inf_{x\geqslant 0}\begin{cases} c^{\mathsf{T}}x & \text{si } Ax=b \\ +\infty & \text{sinon.}\end{cases}$$

On retrouve donc le problème (P_L), si l'on adopte la convention que la valeur minimale de (P_L) vaut $+\infty$ lorsque l'ensemble admissible est vide.

Alors, le problème dual de (P_L) pour la fonction φ ci-dessus s'écrit

$$\sup_{y}\inf_{x\geqslant 0}\Big((c-A^{\mathsf{T}}y)^{\mathsf{T}}x + b^{\mathsf{T}}y\Big) = \sup_{y}\begin{cases} b^{\mathsf{T}}y & \text{si } A^{\mathsf{T}}y \leqslant c \\ -\infty & \text{sinon.}\end{cases}$$

On trouve finalement comme problème dual

$$(D_L) \quad \begin{cases} \max b^{\mathsf{T}}y \\ A^{\mathsf{T}}y \leqslant c, \end{cases}$$

si l'on prend la convention que la valeur maximale dans (D_L) vaut $-\infty$ lorsque l'ensemble admissible de (D_L) est vide. C'est aussi un problème d'optimisation linéaire.

On peut obtenir un problème dual de (P_L) en dualisant également la contrainte $x \geqslant 0$, c'est-à-dire en utilisant le lagrangien $\ell(x,y,s) = c^{\mathsf{T}}x - y^{\mathsf{T}}(Ax-b) - x^{\mathsf{T}}s$ comme fonction de couplage (il faut alors imposer $s \geqslant 0$ dans la dualité). On obtient alors comme problème dual

$$\begin{cases} \max b^{\mathsf{T}}y \\ A^{\mathsf{T}}y + s = c \\ s \geqslant 0, \end{cases}$$

qui est équivalent à (D_L).

Remarquons enfin que les conditions d'optimalité de (D_L) sont aussi celles de (P_L) et que le dual du dual est le primal.

On dit que (y,s) est admissible pour le problème dual (D_L), si $A^{\mathsf{T}}y + s = c$ et si $s \geqslant 0$. On note

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\text{P}} &:= \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b,\ x \geqslant 0\}, \\ \mathcal{F}_{\text{D}} &:= \{(y,s) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n : A^{\mathsf{T}}y + s = c,\ s \geqslant 0\} \end{aligned}$$

les ensembles admissibles de (P_L) et de (D_L) respectivement.

Appliquons à présent les résultats obtenus dans le cadre général au problème d'optimisation linéaire (P_L). De la proposition 13.2, on obtient le résultat suivant.

Proposition 15.10 (dualité faible en optimisation linéaire) *On a*

$$\sup_{A^{\mathsf{T}}y\leqslant c} b^{\mathsf{T}}y \leqslant \inf_{\substack{Ax=b \\ x\geqslant 0}} c^{\mathsf{T}}x. \tag{15.10}$$

Ce résultat s'obtient également facilement par calcul. En effet, si $x \in \mathcal{F}_P$ et si $(y, s) \in \mathcal{F}_D$, la différence entre la valeur du critère primal et celle du critère dual est positive et donnée par la formule

$$\boxed{c^T x - b^T y = x^T s \geqslant 0.} \tag{15.11}$$

On a en effet, $c^T x = (A^T y + s)^T x = b^T y + x^T s$. La positivité de $x^T s$ conduit à l'inégalité de dualité faible (15.10).

Théorème 15.11 (dualité forte en optimisation linéaire) *Les propriétés suivantes sont équivalentes :*
(i) (P_L) *et* (D_L) *sont réalisables,*
(ii) (P_L) *a une solution,*
(iii) (D_L) *a une solution.*
Lorsque ces propriétés ont lieu il n'y a pas de saut de dualité, c'est-à-dire que l'on a égalité en (15.10).

Démonstration. [$(i) \Rightarrow (ii)$] Si (i) a lieu, l'inégalité de dualité faible (15.10) montre que (P_L) est réalisable et borné. Ce problème a donc une solution (théorème 15.4).

[$(ii) \Rightarrow (iii)$] Les conditions d'optimalité (15.5), qui ont lieu si (P_L) a une solution, sont aussi celles de (D_L), qui a donc aussi une solution.

[$(iii) \Rightarrow (i)$] Les conditions d'optimalité (15.5) de (D_L) montrent que (P_L) est réalisable.

Supposons que $\bar{x}$ soit une solution de (P_L). Alors il existe un couple $(\bar{y}, \bar{s})$ tel que les conditions d'optimalité (15.5) soient vérifiées. Comme $\bar{x} \in \mathcal{F}_P$, $(\bar{y}, \bar{s}) \in \mathcal{F}_D$ et $\bar{x}^T \bar{s} = 0$, (15.11) montre qu'il n'y a pas de saut de dualité. □

D'après ce théorème, si $\mathrm{val}(P_L) \in \mathbb{R}$ ou si $\mathrm{val}(D_L) \in \mathbb{R}$, il n'y a pas de saut de dualité. Mais on peut très bien avoir

- $\mathrm{val}(D_L) = \mathrm{val}(P_L) = -\infty$ (pas de saut de dualité) : $A = 0$, $b = 0$ et $c < 0$,
- $\mathrm{val}(D_L) = \mathrm{val}(P_L) = +\infty$ (pas de saut de dualité) : $A = 0$, $b \neq 0$ et $c = 0$,
- $\mathrm{val}(D_L) = -\infty$ et $\mathrm{val}(P_L) = +\infty$ (saut de dualité infini) : $A = 0$, $b \neq 0$ et $c < 0$.

Dès lors, pour qu'il n'y ait pas de saut de dualité il faut et il suffit que (P_L) ou (D_L) soit réalisable.

Corollaire 15.12 *Il n'y a pas de saut de dualité si, et seulement si,* (P_L) *ou* (D_L) *est réalisable.*

Démonstration. Supposons en effet que $\mathrm{val}(P_L) = \mathrm{val}(D_L)$. Si ces valeurs sont réelles, alors (P_L) et (D_L) sont réalisables. Si ces valeurs égalent $-\infty$ [resp. $+\infty$], seul (P_L) [resp. (D_L)] est réalisable.

Réciproquement, supposons que (P_L) soit réalisable (le raisonnement est le même si c'est (D_L) qui est réalisable). Si (P_L) est aussi borné, il a une solution et le résultat se déduit du théorème. Si (P_L) n'est pas borné, alors $\mathrm{val}(P_L) = -\infty$, donc $\mathrm{val}(D_L) = -\infty$ par dualité faible et il n'y a pas de saut de dualité. □

Le point (i) est souvent un moyen commode de montrer qu'un problème d'optimisation linéaire a une solution : on montre qu'il est réalisable et que son dual l'est également. Ce théorème permet de retrouver le lemme de Farkas (voir l'exercice 15.8). Quelques conséquences de ce théorème sont données à l'exercice 15.10.

15.3.2 Une relation entre le primal et le dual

Le théorème de dualité forte a montré que les propriétés des problèmes primal et dual sont très liées. Dans cette section nous donnons d'autres exemples de relations entre les deux problèmes.

On dit que $x \in \mathcal{F}_{\text{P}}$ est *strictement admissible* pour le problème primal (P_L) si $x > 0$ (toutes les composantes de x sont > 0). De même, on dit que $(y, s) \in \mathcal{F}_{\text{D}}$ est *strictement admissible* pour le problème dual (D_L) si $s > 0$. On définit les ensembles de points strictement admissibles

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\text{P}}^s &:= \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b,\ x > 0\} \\ \mathcal{F}_{\text{D}}^s &:= \{(y, s) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n : A^{\mathsf{T}} y + s = c,\ s > 0\}. \end{aligned}$$

S'ils sont non vides, ce sont les intérieurs relatifs de $\mathcal{F}_{\text{P}}$ et $\mathcal{F}_{\text{D}}$ respectivement.

Pour les problèmes d'optimisation convexes, le rapprochement des propositions 4.41 [(QC-S) $\iff$ (QC-MF)] et 4.43 [(QC-MF) $\iff$ Λ_* borné] suggère que l'existence d'un point *strictement* admissible primal équivaut au caractère *borné* de l'ensemble des solutions duales. En optimisation linéaire, le dual du dual est le primal, si bien que l'existence d'une solution duale strictement admissible devrait aussi équivaloir au caractère borné de l'ensemble des solutions primales. C'est une manière de trouver naturelles les équivalences énoncées dans la proposition suivante. Nous en donnons une démonstration directe ci-dessous ; l'exercice 15.11 propose d'autres approches moins techniques et qui pourront être utiles pour étendre ce résultat à d'autres problèmes. On y a noté

$$\mathcal{S}_{\text{D},s} = \{s : \text{il existe } y \in \mathbb{R}^m \text{ tel que } (y, s) \in \mathcal{S}_{\text{D}}\}$$

la projection de $\mathcal{S}_{\text{D}}$ sur $\mathbb{R}^n$. On note aussi $e = (1 \ \cdots \ 1)^{\mathsf{T}}$.

Proposition 15.13 *Supposons que les problèmes primal et dual soient réalisables* ($\mathcal{F}_{\text{P}} \neq \varnothing$ *et* $\mathcal{F}_{\text{D}} \neq \varnothing$). *Alors*

$$\mathcal{S}_{\text{P}} \text{ est borné} \iff \mathcal{F}_{\text{D}}^s \neq \varnothing, \tag{15.12}$$

$$\mathcal{S}_{\text{D},s} \text{ est borné} \iff \mathcal{F}_{\text{P}}^s \neq \varnothing. \tag{15.13}$$

Démonstration. Comme

$$\mathcal{S}_{\text{P}} = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b,\ x \geqslant 0,\ c^{\mathsf{T}} x \leqslant \text{val}(P_L)\}$$

est un convexe fermé non vide, $\mathcal{S}_{\text{P}}$ est borné si, et seulement si, son cône asymptotique (exercice 2.18)

$$\mathcal{S}_{\text{P}}^{\infty} = \{d \in \mathbb{R}^n : Ad = 0,\ d \geqslant 0,\ c^{\mathsf{T}} d \leqslant 0\}$$

est réduit au singleton $\{0\}$ (proposition 2.8). Si $\mathcal{F}_{\text{D}}^s$ est non vide, il existe (y,s) : $c = A^{\mathsf{T}}y + s$, avec $s > 0$. Alors pour $d \in \mathcal{S}_{\text{P}}^\infty$, on a $0 \geqslant c^{\mathsf{T}}d = y^{\mathsf{T}}Ad + s^{\mathsf{T}}d = s^{\mathsf{T}}d$, ce qui implique que $d = 0$ (car $d \geqslant 0$ et $s > 0$). Inversement, si $\mathcal{S}_{\text{P}}^\infty = \{0\}$, son cône dual est $\mathbb{R}^n$. Celui-ci s'écrit (corollaire 2.41, de Farkas)

$$(\mathcal{S}_{\text{P}}^\infty)^+ = \{A^{\mathsf{T}}y + s - \alpha c : s \in \mathbb{R}_+^n,\ \alpha \in \mathbb{R}_+\}.$$

Il existe donc $y \in \mathbb{R}^m$, $s \in \mathbb{R}_+^m$ et $\alpha \in \mathbb{R}_+$ tels que $A^{\mathsf{T}}y + s - \alpha c = -e + c$, ce qui s'écrit aussi $A^{\mathsf{T}}y + (s+e) = (\alpha+1)c$. Alors $(y, s+e)/(\alpha+1) \in \mathcal{F}_{\text{D}}^s$.

La seconde partie de la proposition peut se démontrer de la même manière. $\mathcal{S}_{\text{D}}$ étant un polyèdre convexe, il en est de même de $\mathcal{S}_{\text{D},s}$ (proposition 2.17), qui est donc aussi fermé. Alors

$$\mathcal{S}_{\text{D},s} = \{s \in \mathbb{R}_+^n : \text{il existe } y \in \mathbb{R}^m \text{ tel que } A^{\mathsf{T}}y + s = c,\ b^{\mathsf{T}}y \geqslant \text{val}(D_L)\}$$

est borné si, et seulement si, son cône asymptotique

$$\mathcal{S}_{\text{D},s}^\infty = \{r \in \mathbb{R}_+^n : \text{il existe } z \in \mathbb{R}^m \text{ tel que } A^{\mathsf{T}}z + r = 0 \text{ et } b^{\mathsf{T}}z \geqslant 0\} \tag{15.14}$$

est réduit à $\{0\}$. Si $\mathcal{F}_{\text{P}}^s \neq \varnothing$, il existe $x > 0$ tel que $Ax = b$. Quel que soit $r \in \mathcal{S}_{\text{D},s}^\infty$, on a $r^{\mathsf{T}}x = -z^{\mathsf{T}}Ax = -z^{\mathsf{T}}b \leqslant 0$. Comme $x > 0$ et $r \geqslant 0$, on en déduit que $r = 0$. Donc $\mathcal{S}_{\text{D},s}$ est borné. Inversement, si $\mathcal{S}_{\text{D},s}^\infty$ est réduit à $\{0\}$, son cône dual (on a noté x_0 une solution particulière de $Ax_0 = b$)

$$(\mathcal{S}_{\text{D},s}^\infty)^+ = \mathbb{R}_- x_0 + \mathcal{N}(A) + \mathbb{R}_+^n, \tag{15.15}$$

est $\mathbb{R}^n$. Alors, on peut écrire $-e = -\alpha x_0 + h + p$, avec $\alpha \in \mathbb{R}_+$, $h \in \mathcal{N}(A)$ et $p \in \mathbb{R}_+^n$; donc $A(p+e) = \alpha b$ et $(x_0+p+e)/(1+\alpha) \in \mathcal{F}_{\text{P}}^s$. □

Évidemment, si $\mathcal{S}_{\text{D},s}$ n'est pas borné, $\mathcal{S}_{\text{D}}$ ne l'est pas non plus, ni $\mathcal{S}_{D,y} := \{y$: il existe $s \in \mathbb{R}^n$ tel que $(y,s) \in \mathcal{S}_{\text{D}}\}$ d'ailleurs. Par ailleurs, si A est surjective, il revient au même de dire que $\mathcal{S}_{\text{D},s}$ est borné ou que $\mathcal{S}_{\text{D}}$ est borné.

15.4 Algorithmes du simplexe

In the summer of 1947, when I began to work on the simplex method for solving linear programs, the first idea that occurred to me is one that would occur to any trained mathematician, namely the idea of step-by-step descent (with respect to the objective function) along edges of the convex polyhedral set from one vertex to an adjacent one. I rejected this algorithm outright on intuitive grounds—it had to be inefficient because it proposed to solve the problem by wandering along some path of outside edges until the optimal vertex was reached.

G.B. Dantzig (1914-2005). Origins of the simplex method [140 ; 1990].

On considère le problème d'optimisation linéaire sous forme standard

$$(P_L) \quad \begin{cases} \min c^{\mathsf{T}} x \\ Ax = b \\ x \geqslant 0, \end{cases}$$

dont les conditions d'optimalité s'écrivent (proposition 15.6) : $\exists\, (y, s) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n$, tels que

$$\begin{cases} A^{\mathsf{T}} y + s = c, \quad s \geqslant 0 \\ Ax = b, \quad x \geqslant 0 \\ x^{\mathsf{T}} s = 0. \end{cases}$$

On sait que si ce problème a une solution il a une solution sur un sommet du polyèdre (proposition 15.5)

$$\mathcal{F}_{\text{P}} = \{x : Ax = b,\ x \geqslant 0\}.$$

Si m et n sont grands, il peut y avoir beaucoup de sommets, ce qui exclut de les explorer tous. L'*algorithme du simplexe* de Dantzig [139 ; 1951] sélectionne les sommets à explorer. L'algorithme se déroule en général en deux étapes :

- Phase I : trouver un sommet de $\mathcal{F}_{\text{P}}$,
- Phase II : passer d'un sommet à l'autre de manière à faire décroître f, jusqu'à ce que l'on trouve une solution-sommet.

Dans la phase I, on résout un problème d'optimisation linéaire auxiliaire dont on connaît un sommet (voir la section 15.4.4). On peut donc utiliser l'algorithme du simplexe pour résoudre ce problème. Dans la phase II, on évite de parcourir tous les sommets en faisant décroître le critère à chaque itération, si possible strictement. On ne visite donc plus les sommets dont la valeur du critère est supérieure à celle au sommet courant.

15.4.1 Algorithme du simplexe primal

> *In my mind for example, solving a linear programming problem by the simplex method means moving from vertex to vertex of a vertical convex polyhedron until the bottom is reached. Therefore such terms as shadow prices, complementarity slackness, tableaux and nonbasic variables leave me cold.*
>
> M.J.D. Powell [445 ; 1990].

Hypothèse. On suppose que A a plein rang $m < n$.

La version de l'algorithme du simplexe que nous présentons dans cette section est celle connue sous le nom d'*algorithme du simplexe révisé*. Cet algorithme est géométriquement très simple : chaque itération consiste à passer d'un sommet du polyèdre convexe, qu'est l'ensemble admissible, à un sommet adjacent en suivant une arête particulière de ce polyèdre, de manière à faire décroître la fonction-coût. Il est bien de garder cette idée générale à l'esprit car la description algébrique d'une itération est relativement longue et doit prendre en compte quelques cas particuliers (problème non borné et pas nul) qui distraient.

Une itération de l'algorithme démarre donc en un sommet $\hat{x}$. Nous l'avons déjà dit : le calcul d'un tel sommet n'est pas une opération triviale, mais nous verrons à la section 15.4.4 comment on peut la réaliser. On note B une base d'indices associée à ce sommet et N le complémentaire de B dans $[1:n]$. Au départ de l'itération, on a donc

$$\hat{x}_B \geqslant 0, \quad \hat{x}_N = 0 \quad \text{et} \quad A_{:B}\hat{x}_B = b \ \ (\text{donc } \hat{x}_B = A_{:B}^{-1}b),$$

où, comme précédemment, $A_{:B}$ (resp. $A_{:N}$) désigne la sous-matrice de A formée de ses colonnes avec indices dans B (resp. N)

L'algorithme du simplexe génère en réalité une suite de bases d'indices plutôt qu'une suite de sommets. Il y a une distinction entre les deux notions lorsque le sommet est dégénéré, auquel cas il peut y avoir plusieurs bases d'indices correspondant à un même sommet. Si l'algorithme du simplexe visite un sommet dégénéré, il est possible qu'il ne change pas de sommet à l'itération suivante, mais il changera alors de base d'indices. Cependant décrire l'algorithme en termes de bases d'indices fait perdre l'aspect géométrique de l'algorithme, qu'il nous semble précieux de conserver. Dès lors, nous considérerons que l'itéré de l'algorithme est un sommet, mais que certaines itérations font un déplacement nul.

1 *Reconnaître l'optimalité.*

Soit x un point de l'ensemble admissible $\mathcal{F}_{\text{P}}$, qui vérifie donc $Ax = b$. Comme B est une base d'indices, on peut exprimer les composantes basiques x_B de x en fonction de b et de ses composantes non basiques x_N :

$$x_B = A_{:B}^{-1}(b - A_{:N}x_N).$$

On peut également exprimer le coût $c^{\mathsf{T}}x$ en fonction de x_N :

$$c^{\mathsf{T}}x = c_B^{\mathsf{T}}A_{:B}^{-1}(b - A_{:N}x_N) + c_N^{\mathsf{T}}x_N.$$

Son gradient par rapport à x_N est appelé le *coût réduit*. Il s'écrit

$$\boxed{r = c_N - A_{:N}^{\mathsf{T}}A_{:B}^{-\mathsf{T}}c_B.} \tag{15.16}$$

Dans l'algorithme du simplexe, ce coût réduit sert, d'une part, à détecter l'optimalité éventuelle de l'itéré courant $\hat{x}$ (cette question est examinée dans la proposition 15.14 ci-dessous) et, d'autre part, à sélectionner une arête de $\mathcal{F}_{\text{P}}$ le long de laquelle la fonction-coût décroît lorsque $\hat{x}$ n'est pas optimal (voir le point 2 ci-dessous).

Proposition 15.14 *Un sommet $\hat{x}$ de $\mathcal{F}_{\text{P}}$ est solution du problème (P_L) si, et seulement si, il existe une base d'indices $B \subseteq [1:n]$ associée à $\hat{x}$ telle que le coût réduit $r \geqslant 0$.*

Démonstration. [⇒] Supposons que $\hat{x}$ soit un sommet de $\mathcal{F}_{\text{P}}$ qui soit optimal pour le problème (P_L). Alors, par les conditions d'optimalité (15.5), il existe une solution duale $(y, s) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n$ telle que

$$A^{\mathsf{T}}y + s = c, \quad s \geqslant 0 \quad \text{et} \quad \hat{x}^{\mathsf{T}}s = 0.$$

Comme $\hat{x}$ est un sommet, $A_{:I^+(\hat{x})}$ est injective (en particulier $|I^+(\hat{x})| \leqslant m$).

Montrons que l'on peut trouver une base d'indices B associée à $\hat{x}$ telle que, après modification éventuelle de y et s dans les conditions d'optimalité ci-dessus, on ait $s_B = 0$. On s'y prend en un nombre fini d'étapes en commençant par prendre $B' := \{i : s_i = 0\}$. De $\hat{x}_{I(\hat{x})} > 0$ et $\hat{x}^\mathsf{T} s = 0$, il vient $s_{I(\hat{x})} = 0$ et donc $I^+(\hat{x}) \subseteq B'$.

1. Si $\operatorname{rg} A_{:B'} = m$, on n'a pas besoin de modifier y et s. En effet, l'affirmation est démontrée car, par le théorème de la base incomplète (théorème B.1), on peut trouver $B \subseteq B'$ tel que $I^+(\hat{x}) \subseteq B$, $|B| = m$ et $A_{:B}$ inversible (c'est-à-dire B est une base d'indices associée à $\hat{x}$). Cette base d'indices B est bien telle que $s_B = 0$.
2. Si $\operatorname{rg} A_{:B'} < m$, on peut trouver une direction $\mu \in \mathbb{R}^m$ telle que $A^\mathsf{T}_{:B'}\mu = 0$ et $A^\mathsf{T}_{:N'}\mu \neq 0$ (avec $N' := [1:n] \setminus B'$) ; c'est possible car autrement on aurait $\mathcal{N}(A^\mathsf{T}_{:B'}) \subseteq \mathcal{N}(A^\mathsf{T})$ ou $\mathcal{R}(A) \subseteq \mathcal{R}(A_{:B'})$, ce qui contredirait $\dim \mathcal{R}(A) = m$ et $\dim \mathcal{R}(A_{:B'}) < m$. On peut supposer que $A^\mathsf{T}_{:N'}\mu \not\leqslant 0$. On prend alors le plus grand $t \geqslant 0$ tel que $s'_{N'} = s_{N'} - tA^\mathsf{T}_{:N'}\mu \geqslant 0$. Ce t est strictement positif, car $s_{N'} > 0$ par définition de B' et N'. On note j un indice de N' tel que $s'_j = 0$. Alors avec $y' = y + t\mu$ et $s' = s - tA^\mathsf{T}\mu$. Alors, on a

$$A^\mathsf{T} y' + s' = c, \quad s' \geqslant 0 \quad \text{et} \quad \hat{x}^\mathsf{T} s' = 0.$$

À la fin du point 2, on se retrouve avec des conditions d'optimalité vérifiées par le triplet $(\hat{x}, y', s')$ et avec un ensemble d'indices $B'' := \{i : s'_i = 0\} \supseteq B' \cup \{j\}$. On peut alors revenir au point 1 avec B'' plutôt que B'. Comme chaque cycle augmente les ensembles d'indices B', B'', … d'au moins un indice et comme $\operatorname{rg} A = m$, le cycle est nécessairement interrompu au point 1 après un nombre fini d'étapes.

Il reste à montrer que pour la base d'indices B associée à $\hat{x}$ telle que $s_B = 0$, on a un coût réduit r positif. Comme $s_B = 0$, on a $y = A^{-\mathsf{T}}_{:B} c_B$, si bien $s_N = c_N - A^\mathsf{T}_{:N} A^{-\mathsf{T}}_{:B} c_B$ n'est autre que le coût réduit. Comme $s_N \geqslant 0$, on a ben montré que le coût réduit est positif.

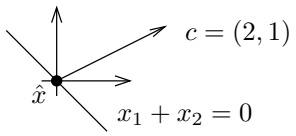
[⇐] Supposons que, pour une base d'indice B associée à $\hat{x}$, le coût réduit $r \geqslant 0$. Si l'on introduit le multiplicateur $y = A^{-\mathsf{T}}_{:B} c_B$, on trouve $r = c_N - A^\mathsf{T}_{:N} y$. En réarrangeant ces deux dernières équations et en posant $s = (0, r)$, on trouve

$$A^\mathsf{T} y + s = c, \quad s \geqslant 0 \quad \text{et} \quad \hat{x}^\mathsf{T} s = 0.$$

Comme $A\hat{x} = b$ et $\hat{x} \geqslant 0$, $(\hat{x}, y, s)$ vérifie les conditions d'optimalité (15.5), ce qui implique que $\hat{x}$ est optimal. □

Si le sommet optimal est dégénéré, il peut y avoir un coût réduit $r \not\geqslant 0$ pour une base d'indices arbitraire associée à ce sommet, comme le montre l'exemple suivant :

$$\begin{cases} \min 2x_1 + x_2 \\ x_1 + x_2 = 0 \\ x \geqslant 0. \end{cases}$$



L'ensemble admissible est réduit au singleton $\{(0, 0)\}$. La solution du problème est donc forcément $\hat{x} = (0, 0)$, qui est un sommet dégénéré. Si l'on prend pour base d'indices $B = \{1\}$, le coût réduit $r = -1$ strictement négatif. Ceci signifie que l'on

peut faire décroître le critère en augmentant $x_N = x_2$ tout en satisfaisant la contrainte d'égalité (c'est le sens du coût réduit). Mais ici, on ne peut pas augmenter x_2 sans sortir de l'ensemble admissible (ce ne serait pas le cas si le sommet était non dégénéré). À l'inverse, si l'on prend pour base d'indices $B = \{2\}$, le coût réduit $r = 1$ est positif, ce qui est annoncé par la proposition 15.14 (il n'y a pas d'autre base d'indices).

La technique utilisée par l'algorithme du simplexe pour détecter l'optimalité éventuelle du sommet courant $\hat{x}$ est la positivité du coût réduit, calculé en utilisant la base d'indices B courante. Il s'agit d'un critère essentiellement primal (il ne fait pas intervenir de multiplicateur ou variable duale). Lorsque l'itéré courant est un sommet-solution non dégénéré, il n'y a qu'une seule base d'indices associée à ce sommet, si bien que le coût réduit est positif et l'algorithme s'interrompt. À l'inverse, lorsque l'itéré courant est un sommet-solution *dégénéré*, il se peut que la base d'indices courante ne permette pas d'avoir un coût réduit positif. Il est donc important que l'algorithme dispose d'un mécanisme lui permettant de changer de base d'indices si cela est nécessaire jusqu'à en trouver une permettant d'avoir un coût réduit positif (comme dans l'exemple ci-dessus). Un mécanisme permettant d'obtenir la convergence de l'algorithme du simplexe (c'est-à-dire d'éviter son cyclage) est appelé *règle d'anti-cyclage*; les principales règles d'anti-cyclage seront vues à la section 15.4.2.

2 *Déplacement le long d'une arête.*

Si r a une composante strictement négative, disons $r_j < 0$, cela veut dire que l'on peut faire décroître le coût en augmentant la composante j de $\hat{x}_N$. On est donc tenté de chercher un nouveau point admissible en faisant un déplacement suivant une direction d, c'est-à-dire

$$x(\alpha) = \hat{x} + \alpha d,$$

telle que la composante non basique de d soit

$$d_N = e_N^j. \tag{15.17}$$

On a noté e^j le j-ième vecteur de base de $\mathbb{R}^n$ et $e_N^j = (e^j)_N$. Pour que ce déplacement $d = (d_B, d_N)$ soit acceptable, il faut d'abord que l'on ait $Ax(\alpha) = b$, donc $Ad = 0$, ce qui détermine sa composante basique :

$$d_B = -A_{:B}^{-1} A_{:N} e_N^j. \tag{15.18}$$

Sur le choix de l'indice j. Remarquons que le coût décroît bien le long de d puisque l'on a

$$c^\top d = r_j < 0.$$

Si r a plusieurs composantes strictement négatives, il semble donc raisonnable de choisir l'indice j parmi ceux donnant la composante de r la plus négative. C'est ce que l'on appelle la *règle du coût réduit minimal*. Cette règle ne garantit cependant pas l'efficacité globale de l'algorithme qui est principalement liée au nombre total d'itérations, c'est-à-dire au nombre de sommets visités (aspect global), ce qui ne peut se déduire d'un calcul de dérivée (aspect local). D'autres règles existent (comme celles introduites par les règles d'anti-cyclage décrites à la section 15.4.2) et les algorithmes du simplexe diffèrent en particulier par l'heuristique adoptée à cette étape.

Il est intéressant d'observer que le déplacement porté par la direction d se fait le long d'une arête de $\mathcal{F}_{\text{P}}$.

Proposition 15.15 *Soient d défini comme ci-dessus et $D := \{\hat{x}+\alpha d \in \mathcal{F}_{\text{P}} : \alpha \geqslant 0\}$. Alors soit D est réduit au sommet $\{\hat{x}\}$, soit c'est une arête de $\mathcal{F}_{\text{P}}$.*

Démonstration. Si $\hat{x} + \alpha d \notin \mathcal{F}_{\text{P}}$ pour tout $\alpha > 0$, on a $D = \{\hat{x}\}$.

Supposons maintenant que $\hat{x} + \alpha d \in \mathcal{F}_{\text{P}}$ pour tout $\alpha > 0$ petit. D'après la proposition 2.20, il suffit de montrer que pour $\alpha > 0$ petit :

$$\dim \mathcal{N}(A_{:I^+(\hat{x}+\alpha d)}) = 1.$$

Observons que, si $(\hat{x} + \alpha d)_i = 0$, on a nécessairement $d_i = 0$ (c'est clairement le cas si $i \in N \setminus \{j\}$; ce l'est aussi si $i \in B$ car alors $\hat{x}_i = 0$) ; alors, le fait que $Ad = 0$ montre que

$$A_{:I^+(\hat{x}+\alpha d)} d_{I^+(\hat{x}+\alpha d)} = 0, \qquad d_{I^+(\hat{x}+\alpha d)} \neq 0,$$

et donc que $\dim \mathcal{N}(A_{:I^+(\hat{x}+\alpha d)}) \geqslant 1$. Par ailleurs, l'inversibilité de $A_{:B}$ et $I^+(\hat{x}+\alpha d) \subseteq B \cup \{j\}$, montre que $\dim \mathcal{N}(A_{:I^+(\hat{x}+\alpha d)}) \leqslant 1$. □

3 *Détection d'un problème non borné ($d_B \geqslant 0$).*

Si $d_B \geqslant 0$, alors

$$\forall \alpha > 0 : \qquad x(\alpha) \geqslant 0,$$

et comme le coût $c^{\mathsf{T}} x(\alpha) = c^{\mathsf{T}} \hat{x} + \alpha\, c^{\mathsf{T}} d$ décroît strictement le long de la direction de descente d, le problème n'est pas borné.

4 *Pivotage ($d_B \not\geqslant 0$).*

Si $d_B \not\geqslant 0$, on ne peut plus prendre un pas arbitrairement grand. Pour que l'on ait $x(\alpha)_B \geqslant 0$, il faut que $\alpha \leqslant \hat{\alpha}$, où

$$\hat{\alpha} = \min \left\{ -\frac{\hat{x}_i}{d_i} : i \in B,\ d_i < 0 \right\}. \tag{15.19}$$

Lorsque le sommet $\hat{x}$ est dégénéré (il y a des $\hat{x}_i = 0$ pour $i \in B$), ce pas maximal $\hat{\alpha}$ peut être nul (voir ci-après). Soit k un indice donnant le min ci-dessus. Alors, $\hat{x}_k + \hat{\alpha} d_k = 0$ et on peut faire sortir l'indice k de la base d'indices B, et y faire entrer l'indice j. La nouvelle base d'indices s'écrit

$$B_+ = (B \cup \{j\}) \setminus \{k\}.$$

Proposition 15.16 *L'ensemble B_+ est une base d'indices.*

DÉMONSTRATION. Il s'agit de montrer que $A_{:B_+}$ est inversible. Si ce n'est pas le cas, l'inversibilité de $A_{:B}$ implique que A^j est combinaison linéaire des $\{A^i : i \in B \setminus \{k\}\}$, c'est-à-dire

$$A_{:N} e_N^j = A_{:B} u, \quad \text{avec } u_k = 0.$$

On en déduit que $u = -d_B$. On a alors une contradiction, car d'une part $d_k = 0$ (car $u_k = 0$) et $d_k < 0$ (car k donne le min en (15.19)). □

L'opération de mise à jour de la base d'indices B en B_+, qui consiste à lui adjoindre l'indice j et à lui ôter l'indice k, est parfois appelée *pivotage* et la règle déterminant le choix des indices j et k est alors appelée *règle de pivotage*.

5 *Progrès ou stagnation.*

Deux situations peuvent maintenant se présenter.

Si $\hat{\alpha} > 0$, le coût décroît strictement et on peut passer à l'itération suivante avec $\hat{x}_+ := \hat{x} + \hat{\alpha} d$ comme nouveau sommet et B_+ comme nouvelle base d'indices.

Si $\hat{\alpha} = 0$ (ceci ne peut se produire que si le sommet $\hat{x}$ est dégénéré), il y a un changement de base d'indices sans changer de sommet (le pas $\hat{\alpha}$ est nul). Si l'on ne prend pas quelques précautions, l'algorithme peut cycler (par exemple en faisant entrer k dans la base et en faisant sortir j à l'itération suivante). On a mis au point des règles d'anti-cyclage pour faire face à cette situation. Certaines d'entre elles sont présentées dans la section suivante.

15.4.2 Règles d'anti-cyclage

Nous énonçons ci-dessous quelques règles d'anti-cyclage et renvoyons le lecteur aux articles qui les introduisent pour une démonstration de leur propriété d'anti-cyclage. Ces articles sont souvent difficiles à comprendre, si l'on n'est pas familier avec le jargon développé par les spécialistes de l'algorithme du simplexe, en particulier avec la description de l'algorithme sous forme de tableau.

Règle des petites perturbations ▲

Règle lexicographique ▲

Règle des plus petits indices de Bland

La règle consiste à faire entrer dans la base B_+ le plus petit indice $j \in N$ tel que le coût réduit $r_j < 0$ (voir le point 2 ci-dessus) et à en faire sortir le plus petit indice $k \in \arg\min\{-\hat{x}_i/d_i : i \in B,\, d_i < 0\}$ (voir la formule (15.19)). Cette règle a été proposée par Bland [56 ; 1977].

15.4.3 Énoncé de l'algorithme

On peut résumer l'algorithme décrit ci-dessus comme suit.

Algorithme 15.17 (du simplexe révisé — une itération)

On suppose au départ que l'on dispose d'un sommet $\hat{x}$ de $\mathcal{F}_{\text{P}}$ et d'une base d'indices associée B. Une itération calcule un nouveau sommet $\hat{x}_+$ et une nouvelle base d'indices B_+, à moins qu'il ne soit observé que $\hat{x}$ est solution ou que le problème est non borné.

1. *Coût réduit.* Calculer le multiplicateur $y \in \mathbb{R}^m$, solution du système linéaire
$$A_{:B}^{\mathsf{T}} y = c_B$$
et en déduire le coût réduit
$$r = c_N - A_{:N}^{\mathsf{T}} y.$$
2. *Optimalité.* Si $r \geqslant 0$, on s'arrête : $\hat{x}$ est solution du problème (P_L).
3. *Direction de descente.* Soit j un indice tel que $r_j < 0$, respectant une règle d'anti-cyclage de la section 15.4.2. On définit la direction de descente $d \in \mathcal{N}(A)$ du critère $x \mapsto c^{\mathsf{T}} x$ par
$$d_B = -A_{:B}^{-1} A_{:N} e_N^j \quad \text{et} \quad d_N = e_N^j,$$
où e^j est le j-ième vecteur de base de $\mathbb{R}^{|N|}$.
4. *Problème non borné.* Si $d_B \geqslant 0$, on s'arrête car le problème (P_L) n'est pas borné : $c^{\mathsf{T}}(\hat{x} + \alpha d) \to -\infty$ lorsque $\alpha \to \infty$.
5. *Pas maximal.* On calcule le pas maximal $\hat{\alpha}$ jusqu'à la frontière de l'ensemble admissible $\mathcal{F}_{\text{P}}$:
$$\hat{\alpha} := \min \left\{ -\frac{\hat{x}_i}{d_i} : i \in B,\ d_i < 0 \right\}.$$
Ce pas peut être nul. On note k un des indices donnant le minimum ci-dessus et respectant une règle d'anti-cyclage de la section 15.4.2.
6. *Nouveau sommet* : $\hat{x}_+ = \hat{x} + \hat{\alpha} d$.
7. *Nouvelle base d'indices* : $B_+ = (B \cup \{j\}) \setminus \{k\}$.

Théorème 15.18 (convergence de l'algorithme du simplexe révisé) *Si le problème d'optimisation linéaire, écrit sous la forme standard (P_L), est réalisable (c'est-à-dire $\mathcal{F}_{\text{P}} \neq \varnothing$), l'algorithme du simplexe révisé décrit ci-dessus termine après un nombre fini d'étapes, soit en déterminant que le problème (P_L) est non borné, soit en en trouvant une solution-sommet.*

15.4.4 Démarrage de l'algorithme du simplexe

Pour utiliser l'algorithme du simplexe présenté ci-dessus, il faut disposer d'un itéré initial qui est un sommet de l'ensemble admissible $\mathcal{F}_{\text{P}} := \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b,\ x \geqslant 0\}$. Nous présentons dans cette section plusieurs manières de faire face à cette exigence. Certaines méthodes de pivotage se déroulent en une seule phase, comme l'*algorithme en croix* [102, 513, 514, 540 ; 1979-1987].

Technique des deux phases

Comme son nom l'indique, la technique des deux phases décompose la résolution d'un problème d'optimisation linéaire en deux étapes. La phase/étape I consiste à résoudre un problème d'optimisation linéaire auxiliaire, dont on connait un sommet, par l'algorithme du simplexe. La résolution de ce problème auxiliaire fournit un sommet du polyèdre convexe $\mathcal{F}_{\text{P}}$ (pourvu que celui-ci soit non vide) ou indique que $\mathcal{F}_{\text{P}} = \varnothing$. Dans la phase II, on résout le problème (P_L) par l'algorithme du simplexe, à partir du sommet obtenu dans la première phase.

La phase I consiste donc à trouver un point du polyèdre convexe écrit sous forme standard, à trouver un $x \in \mathbb{R}^n$ tel que $Ax = b$ et $x \geqslant 0$. Elle réalise cette tâche en résolvant le problème d'optimisation linéaire suivant :

$$\begin{cases} \min \sum_{i=1}^m z_i \\ Ax + Dz = b \\ x \geqslant 0, \quad z \geqslant 0, \end{cases} \tag{15.20a}$$

où D est la matrice diagonale définie par

$$D_{ii} = \begin{cases} 1 & \text{si } b_i \geqslant 0 \\ -1 & \text{si } b_i < 0. \end{cases} \tag{15.20b}$$

Proposition 15.19 *Le point $(0, Db)$ est un sommet de l'ensemble admissible du problème (15.20a), lequel a toujours une solution. Si ce problème est résolu par l'algorithme du simplexe en partant de ce point, il obtient pour solution un point $(\hat{x}, \hat{z})$. Si $\hat{z} \neq 0$, le problème (P_L) n'est pas réalisable. Si $\hat{z} = 0$, $\hat{x}$ est un sommet de l'ensemble admissible de (P_L).*

Démonstration. Il est clair que $(0, Db)$ est un sommet de l'ensemble admissible de (15.20a), car les colonnes de D sont linéairement indépendantes (proposition 2.20). Comme (15.20a) est borné ($\sum_{i=1}^m z_i \geqslant 0$), il a une solution (proposition 15.4). Si l'algorithme du simplexe est démarré en $(0, Db)$, il trouve une solution $(\hat{x}, \hat{z})$.

Si $\hat{z} \neq 0$, la valeur optimale de (15.20a) est non nulle et le problème (P_L) n'est pas réalisable (car si $x \in \mathcal{F}_{\text{P}}$, $(x, 0)$ est admissible pour (15.20a) et donne une valeur nulle au critère).

Si $\hat{z} = 0$, on a $A\hat{x} = b$ et $\hat{x} \geqslant 0$, donc $\hat{x} \in \mathcal{F}_{\text{P}}$. D'autre part, $(\hat{x}, 0)$ étant un sommet de l'ensemble admissible de (15.20a), les colonnes $\{A^j : \hat{x}_j > 0\}$ sont linéairement indépendantes ; donc $\hat{x}$ est un sommet de $\mathcal{F}_{\text{P}}$. □

Technique du grand M

Voir le syllabus complet.

Notes

L'énoncé du problème dual d'un problème d'optimisation linéaire est attribué à J. Von Neumann. L'existence de solutions strictement complémentaires (proposition 15.8) a été montré par Goldman et Tucker (1956).

On pourra trouver d'autres résultats sur l'optimisation linéaire dans les références suivantes : Minoux [389 ; 1983] ; Chvátal [112 ; 1983] a une approche très opérationnelle de l'optimisation linéaire et de l'algorithme du simplexe et s'intéresse à la modélisation de problèmes concrets sous forme de problèmes d'optimisation linéaire, notamment des problèmes de transport dans les réseaux ; Schrijver [484 ; 1986] ; Fletcher [197 ; 1987] ; Ciarlet [114 ; 1988] ; Goldfarb et Todd [241 ; 1989] ; Nering et Tucker [412 ; 1993] ; Saigal [478 ; 1995], Helgason et Kennington [287 ; 1995] discutent de l'utilisation de l'algorithme du simplexe dans divers problèmes d'optimisation linéaire rencontrés dans les réseaux ; le même commentaire s'applique à l'ouvrage de Bertsimas et Tsitsiklis [49 ; 1997], qui contient des chapitres sur les problèmes de grande taille avec leurs méthodes de décomposition, sur les problèmes d'OL dans les réseaux et sur les problèmes en nombres entiers ; Vanderbei [529 ; 1997] ; Martin [378 ; 1999] aborde, dans la partie IV de son ouvrage, les méthodes de décomposition pour résoudre les grands problèmes linéaires (décomposition de Benders, de Dantzig-Wolfe et lagrangienne) et traite, dans le chapitre 14, de l'optimisation dans les réseaux ; Padberg [422 ; 1999].

Exercices

15.1. *Optimisation linéaire et admissiblité polyédrique.* Montrez que résoudre un problème d'optimisation linéaire revient à trouver un point admissible d'un polyèdre convexe, dont les données se déduisent aisément de celles du problème d'optimisation linéaire.

15.2. *Effet d'une perturbation du coût.* On considère le problème d'optimisation linéaire, sous sa forme standard (P_L). On s'intéresse à la valeur optimale $\varphi : \mathbb{R}^n \to \varphi(c) := \inf\{c^{\mathsf{T}}x : Ax = b,\ x \geqslant 0\} \in \mathbb{R}$, comme fonction du coût c.

(*i*) La fonction φ est concave.

(*ii*) Le point $\bar{x}$ est l'*unique* solution de (P_L) si, et seulement si, il existe $\epsilon > 0$ tel que si l'on remplace c par $\tilde{c}$ dans (P_L), avec $\|\tilde{c} - c\| \leqslant \epsilon$, $\bar{x}$ est encore (l'unique) solution du problème.

(*iii*) Si pour $c = c_0$, (P_L) a une unique solution $\bar{x}_0$, alors φ est *linéaire* dans un voisinage de c_0 et $\nabla\varphi(c_0) = \bar{x}_0$.

15.3. *Hypothèse de non dégénérescence et qualification des contraintes.* Soient $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$ et x un sommet du polyèdre convexe $\{x : Ax = b,\ x \geqslant 0\}$. Montrez que x est non dégénéré si, et seulement si, $(A^{\mathsf{T}}\ I_{I^0(x)})$ est injective, où $I_{I^0(x)}$ est la matrice formée des colonnes d'indices $i \in I^0(x)$ de la matrice identité (ce qui n'est autre que la condition de qualification des contraintes (QC-IL)).

15.4. *Ensemble de solutions borné.* Supposons que l'ensemble admissible $\mathcal{F}_{\text{P}}$ du problème d'optimisation linéaire (P_L) ne soit pas borné et que son ensemble de solution $\mathcal{S}_{\text{P}}$ le soit. Montrez qu'alors le critère $c^{\mathsf{T}}x$ tend vers l'infini à l'infini dans $\mathcal{F}_{\text{P}}$.

15.5. *Polyèdres convexes imbriqués.* Soient P_A et P_B deux polyèdres convexes de $\mathbb{R}^n$ définis par

$$P_A := \{x \in \mathbb{R}^n : Ax \leqslant a\} \qquad \text{et} \qquad P_B := \{x \in \mathbb{R}^n : Bx \leqslant b\},$$

où $A \in \mathbb{R}^{m_A \times n}$, $a \in \mathbb{R}^{m_A}$, $B \in \mathbb{R}^{m_B \times n}$ et $b \in \mathbb{R}^{m_B}$. On suppose que $P_A \neq \varnothing$. Montrez que les propriétés suivantes sont équivalentes :

(*i*) $P_A \subseteq P_B$,
(*ii*) $\exists Y \in \mathbb{R}_+^{m_B \times m_A}$ tel que $YA = B$ et $Ya \leqslant b$.

15.6. *Inclusions polaires.*

1) Soient $\mathbb{E}$ un espace euclidien et A et B deux ensembles convexes fermés non vides de $\mathbb{E}$. On note σ_A et σ_B les fonctions d'appui de ces ensembles. Alors, les propriétés suivantes sont équivalentes :
   (*i*) $A \subseteq B$,
   (*ii*) $\sigma_A \leqslant \sigma_B$,
   (*iii*) $\forall\, \alpha \in \mathbb{R}$, $\{d \in \mathbb{E} : \sigma_B(d) \leqslant \alpha\} \subseteq \{d \in \mathbb{E} : \sigma_A(d) \leqslant \alpha\}$,
   (*iv*) $\forall\, \alpha \in \{-1, 1\}$, $\{d \in \mathbb{E} : \sigma_B(d) \leqslant \alpha\} \subseteq \{d \in \mathbb{E} : \sigma_A(d) \leqslant \alpha\}$.

Les équivalences (*i*) $\Leftrightarrow$ (*iii*) $\Leftrightarrow$ (*iv*) permettent d'associer des inclusions, *polaires* l'une de l'autre, dans certains cas.

2) Si $P := \{x \in \mathbb{R}^n : Ax \leqslant b\}$ est le polyedre convexe non vide, formé à partir de $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ et $b \in \mathbb{R}^m$, et si $\alpha \in \mathbb{R}$, alors

$$\{d \in \mathbb{R}^n : \sigma_P(d) \leqslant \alpha\} = A^{\mathsf{T}}\{y \in \mathbb{R}_+^m : b^{\mathsf{T}} y \leqslant \alpha\}. \tag{15.21}$$

3) On note $\mathscr{E}(M) := \{x \in \mathbb{R}^n : x^{\mathsf{T}} M x \leqslant 1\}$ l'ellipsoïde de $\mathbb{R}^n$ centré en 0, façonné par une matrice $M \succ 0$ d'ordre n. Alors, pour $H \succ 0$, on a

$$\{d \in \mathbb{R}^n : \sigma_{\mathscr{E}(H)}(d) \leqslant 1\} = \mathscr{E}(H^{-1}). \tag{15.22}$$

4) *Polyèdres convexes imbriqués.* Avec les notations de l'exercice 15.5, on a

$$P_A \subseteq P_B \iff \begin{cases} \forall\, \alpha \in \mathbb{R}, \\ B^{\mathsf{T}}\{z \in \mathbb{R}_+^{m_B} : b^{\mathsf{T}} z \leqslant \alpha\} \subseteq \\ A^{\mathsf{T}}\{y \in \mathbb{R}_+^{m_A} : a^{\mathsf{T}} y \leqslant \alpha\}. \end{cases} \tag{15.23a}$$

$$\iff \begin{cases} \forall\, \alpha \in \{-1, 1\}, \\ B^{\mathsf{T}}\{z \in \mathbb{R}_+^{m_B} : b^{\mathsf{T}} z \leqslant \alpha\} \subseteq \\ A^{\mathsf{T}}\{y \in \mathbb{R}_+^{m_A} : a^{\mathsf{T}} y \leqslant \alpha\}. \end{cases} \tag{15.23b}$$

On peut retrouver l'équivalence de l'exercice 15.5 à partir de (15.23).

5) *Circonscription ellipsoïdique d'un polyèdre convexe.* Soient $H \succ 0$ et $P := \{x \in \mathbb{R}^n : Ax \leqslant b\} \neq \varnothing$ le polyèdre convexe de $\mathbb{R}^n$ défini au moyen de $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ et $b \in \mathbb{R}^m$. Alors

$$P \subseteq \mathscr{E}(H) \iff \mathscr{E}(H^{-1}) \subseteq A^{\mathsf{T}}\{y \in \mathbb{R}_+^m : b^{\mathsf{T}} y \leqslant 1\}. \tag{15.24}$$

15.7. *Solutions strictement complementaires.* Soit $\mathcal{S}_{\text{PD}}^{\text{sc}}$ l'ensemble des solution primales-duales strictement complémentaires (proposition 15.8). Montrez

1) les formules de $\mathcal{S}_{\text{P}}^{\oplus}$ et $\mathcal{S}_{\text{D}}^{\oplus}$ données par (15.9),
2) $\mathcal{S}_{\text{PD}}^{\text{sc}} = \mathcal{S}_{\text{PD}}^{\oplus} = \mathcal{S}_{\text{P}}^{\oplus} \times \mathcal{S}_{\text{D}}^{\oplus}$,
3) $x \in \mathcal{S}_{\text{P}}^{\oplus} \Leftrightarrow \exists\, (y, s) \in \mathcal{S}_{\text{D}}$ tel que $(x, y, s) \in \mathcal{S}_{\text{PD}}^{\text{sc}}$ (nécessairement $(y, s) \in \mathcal{S}_{\text{D}}^{\oplus}$),
4) $(y, s) \in \mathcal{S}_{\text{D}}^{\oplus} \Leftrightarrow \exists\, x \in \mathcal{S}_{\text{P}}$ tel que $(x, y, s) \in \mathcal{S}_{\text{PD}}^{\text{sc}}$ (nécessairement $x \in \mathcal{S}_{\text{P}}^{\oplus}$).

15.8. *Dualité linéaire et lemme de Farkas.*

1) Retrouvez le lemme de Farkas, sous la forme $\{Ax : x \geqslant 0\} = \{y : A^{\mathsf{T}}y \geqslant 0\}^+$ (voir le corollaire 2.41), à partir des résultats de dualité en optimisation linéaire (théorèmes 15.10 et 15.11).
2) Soient A une matrice $m \times n$, $b \in \mathbb{R}^m$, $c \in \mathbb{R}^n$ et $\alpha \in \mathbb{R}$, tels que $\{x : Ax \geqslant b\} \neq \varnothing$. Montrez que les deux propriétés suivantes sont équivalentes :
   (*i*) tout x vérifiant $Ax \geqslant b$ vérifie aussi $c^{\mathsf{T}}x \geqslant \alpha$.
   (*ii*) il existe $y \in \mathbb{R}^m_+$ tel que $A^{\mathsf{T}}y = c$ et $b^{\mathsf{T}}y \geqslant \alpha$.

15.9. *Théorèmes de l'alternative par l'optimisation linéaire*, que l'on écrit ici sous la forme d'équivalences. Voir aussi l'exercice 2.36.

1) *Théorème de l'alternative de Motzkin non-homogène* [274 ; théorème 3.17]. Soient $A \in \mathbb{R}^{m_A \times n}$, $B \in \mathbb{R}^{m_B \times n}$ et $C \in \mathbb{R}^{m_C \times n}$ des matrices ayant un même nombre de colonnes et $a \in \mathbb{R}^{m_A}$, $b \in \mathbb{R}^{m_B}$ et $c \in \mathbb{R}^{m_C}$ des vecteurs. Alors, les affirmations suivantes sont équivalentes :
   (*i*) $\exists\, x \in \mathbb{R}^n : Ax = a$, $Bx \leqslant b$ et $Cx < c$,
   (*ii*) $\forall\, (\alpha, \beta, \gamma) \in \mathbb{R}^{m_A} \times \mathbb{R}^{m_B}_+ \times \mathbb{R}^{m_C}_+$ vérifiant $A^{\mathsf{T}}\alpha + B^{\mathsf{T}}\beta + C^{\mathsf{T}}\gamma = 0$ et $a^{\mathsf{T}}\alpha + b^{\mathsf{T}}\beta + c^{\mathsf{T}}\gamma \leqslant 0$, on a $a^{\mathsf{T}}\alpha + b^{\mathsf{T}}\beta = 0$ et $\gamma = 0$.

15.10. *Dualité.* On considère le problème d'optimisation linéaire (P_L) et son dual (D_L). Démontrez les affirmations suivantes.

1) Si (P_L) est réalisable et non borné, alors (D_L) n'est pas réalisable,
2) Si (P_L) n'est pas réalisable et (D_L) est réalisable, alors (D_L) est non borné.

15.11. *Contributions à la proposition 15.13.*

1) Vérifiez l'identité (15.14).
2) Vérifiez l'identité (15.15).
3) Autre démonstration de (15.12).
   (*i*) Montrez que $\mathcal{F}_{\mathrm{D}}^s$ est vide si, et seulement si, il existe un indice $i \in [1:n]$ tel que le problème $\inf\{-s_i : A^{\mathsf{T}}y + s = c,\ s \geqslant 0\}$ est réalisable et a une valeur optimale nulle.
   (*ii*) Conclure en utilisant un argument de dualité.
4) Autre démonstration de (15.13).
   (*i*) Montrez que $\mathcal{F}_{\mathrm{P}}^s$ est vide si, et seulement si, il existe un indice $i \in [1:n]$ tel que le problème $\min\{-x_i : Ax = b,\ x \geqslant 0\}$ est réalisable et a une valeur optimale nulle.
   (*ii*) Conclure en utilisant un argument de dualité.

15.12. *Identité du minimax de von Neumann* [537 ; 1928]. Soient A une matrice de type $m \times n$ et Δ_p le simplexe unité de $\mathbb{R}^p$. Montrez que

$$\max_{y \in \Delta_m} \min_{x \in \Delta_n} y^{\mathsf{T}}Ax = \min_{x \in \Delta_n} \max_{y \in \Delta_m} y^{\mathsf{T}}Ax. \tag{15.25}$$

15.13. *Détection d'une solution unique par l'algorithme du simplexe* [241 ; corollaire 3.1]. Montrez que si le coût réduit r défini par (15.16) a ses composantes *strictement* positives, alors le sommet courant est l'unique solution de (P_L).

15.14. *Lemme de Hoffman* [297 ; 1952]. Le lemme de Hoffman est une *borne d'erreur*, c'est-à-dire une estimation (ici, une majoration) de la distance à un ensemble par des quantités plus facilement calculables que la distance elle-même. On s'intéresse ici à la distance au polyèdre convexe, défini par $P_{A,b} = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax \leqslant b\}$, où $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ et $b \in \mathbb{R}^m$. On note $\mathcal{B}_A$ le cône convexe des vecteurs $b \in \mathbb{R}^m$ tels que $P_{A,b} \neq \varnothing$. On se donne également une norme $\|\cdot\|$ sur $\mathbb{R}^n$. Enfin, on note

$$\mathrm{d}_{P_{A,b}}(x) := \min_{z \in P_{A,b}} \|z - x\|$$

la distance de $x \in \mathbb{R}^n$ à $P_{A,b}$, mesurée au moyen de la norme $\|\cdot\|$. Le lemme de Hoffman affirme que

$$\forall\, A \in \mathbb{R}^{m\times n},\ \exists\, h > 0,\ \forall\, b \in \mathcal{B}_A,\ \forall\, x \in \mathbb{R}^n : \quad \mathrm{d}_P(x) \leqslant h\, \|(Ax-b)^+\|_2, \tag{15.26}$$

où $(\cdot)^+ = \max(0, \cdot)$, composante par composante, et $\|\cdot\|_2$ est la norme euclidienne sur $\mathbb{R}^m$. La constante h ne dépend donc que de A. Autrement dit, on peut estimer la distance de x à $P_{A,b}$ par la norme du résidu $(Ax-b)^+$.

(i) Montrez que l'on peut trouver des $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ tels que h est arbitrairement grand.

(ii) Démonstration de (15.26) [274 ; 2010, section 11.8].

(a) On note $\|\cdot\|_{\mathrm{D}}$ la norme duale de la norme $\|\cdot\|$. Montrez que

$$\exists\, u \in \mathbb{R}^n : \quad \|u\|_{\mathrm{D}} = 1 \quad \text{et} \quad \mathrm{d}_P(x) = \sup_{\substack{y \geqslant 0 \\ A^{\mathsf{T}} y = u}} (Ax-b)^{\mathsf{T}} y. \tag{15.27}$$

(b) Montrez que l'on peut *choisir* une solution du problème d'optimisation linéaire dans (15.27), qui soit majorée en norme par une constante ne dépendant que de A.

(c) Démontrez (15.26).

16 Optimisation linéaire : algorithmes de points intérieurs

My view of interior point methods for optimization calculations with linear constraints is that it seems silly to introduce nonlinearities and iterative procedures for following central paths, because these complications are not present in the original problem. On the other hand, when the number of constraints is huge, then algorithms that treat constraints individually are also unattractive, especially if the attention to detail causes the number of iterations to be about the number of constraints. It is possible, however, to retain linear constraints explicitly, and to take advantage of the situation where the boundary of the feasible region has so many linear facets that it seems to be smooth. This is done by the TOLMIN software that I developed in 1989, for example, but the number of variables is restricted to a few hundred, because quadratic models with full second derivative matrices are employed. Therefore eventually I expect interior point methods to be best only if the number of variables is large. Another reservation about this field is that it seems to be taking far more than its share of research activity.

M.J.D. Powell [447 ; 2003].

Ce chapitre se limite à l'étude de quelques aspects des algorithmes de suivi de chemin primaux-duaux en optimisation linéaire. Ce sont souvent les algorithmes de points intérieurs les plus efficaces en pratique. D'autres approches de points intérieurs ont été proposées et peuvent être utiles dans des contextes particuliers : algorithme de l'*ellipsoïde de Dikin*, algorithmes à réduction de potentiel, *etc.* Nous renvoyons le lecteur aux notes de fin de chapitre pour des références sur ceux-ci.

Comme leur nom l'indique les algorithmes de suivi de chemin génèrent des itérés qui suivent ce que l'on appelle aujourd'hui le *chemin central*. Celui-ci sert de guide, conduisant les itérés vers une solution particulière du problème (ou vers la solution s'il n'y en a qu'une). Nous l'étudions en détail à la section 16.1.

La partie algorithmique de ce chapitre est importante et débute par des remarques générales sur les approches primales-duales (section 16.2). Vient ensuite l'étude de trois algorithmes supposant que l'on dispose d'un premier itéré admissible (section 16.3) : les algorithmes des petits déplacements, des grands déplacements et prédicteur-correcteur. Les algorithmes sont motivés et décrits ; leur convergence et leur complexité itérative sont étudiées. Le premier algorithme a la complexité itérative théorique

la meilleure, mais ce sont les deux derniers qui sont les plus efficaces en pratique, le dernier étant le plus souvent implémenté (dans une version plus élaborée, il est vrai). Enfin, la section 16.4 décrit et analyse un algorithme n'imposant pas aux itérés d'être admissibles.

Connaissances supposées. Les bases de l'optimisation linéaire (chapitre 15) ; la notion de fonction asymptotique (section 3.3.4), qui est utilisée pour montrer l'existence du chemin central ; l'algorithme de Newton (section 9.1.1).

Rappel et notations

On considère le problème d'optimisation linéaire dans $\mathbb{R}^n$ suivant, dit sous forme standard

$$(P) \quad \begin{cases} \inf_x \ c^\mathsf{T} x \\ Ax = b \\ x \geqslant 0, \end{cases}$$

où, rappelons-le, $c \in \mathbb{R}^n$, A est une matrice $m \times n$ et $b \in \mathbb{R}^m$. Son ensemble admissible est noté

$$\mathcal{F}_\mathrm{P} := \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b,\ x \geqslant 0\}.$$

L'ensemble des itérés strictement admissibles est noté

$$\mathcal{F}_\mathrm{P}^s := \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b,\ x > 0\}.$$

Lorsqu'il est non vide, c'est l'intérieur relatif de $\mathcal{F}_\mathrm{P}$ (exercice 2.18). L'ensemble des solutions de (P) est noté $\mathcal{S}_\mathrm{P}$.

La dualisation lagrangienne de (P) conduit au problème dual suivant (voir la section 15.3.1) :

$$(D) \quad \begin{cases} \sup \ b^\mathsf{T} y \\ A^\mathsf{T} y + s = c \\ s \geqslant 0. \end{cases}$$

Son ensemble admissible est noté

$$\mathcal{F}_\mathrm{D} := \{(y, s) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n : A^\mathsf{T} y + s = c,\ s \geqslant 0\}.$$

On note aussi

$$\mathcal{F}_\mathrm{D}^s := \{(y, s) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n : A^\mathsf{T} y + s = c,\ s > 0\},$$

qui, lorsqu'il est non vide, est l'intérieur relatif de $\mathcal{F}_\mathrm{D}$. L'ensemble des solutions de (D) est noté $\mathcal{S}_\mathrm{D}$.

Les conditions d'optimalité de (P) affirment que x est solution de ce problème si, et seulement si, il existe un couple $(y, s) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n$ tel que l'on ait

$$\begin{cases} A^\mathsf{T} y + s = c, \quad s \geqslant 0 \\ Ax = b, \quad x \geqslant 0 \\ x^\mathsf{T} s = 0. \end{cases} \tag{16.1}$$

Ce sont aussi les conditions d'optimalité du problème dual : (y, s) est solution de (D) si, et seulement si, il existe $x \in \mathbb{R}^n$ tel que l'on ait (16.1).

Nous désignerons par $X = \mathrm{Diag}(x_1, \ldots, x_n)$ la matrice diagonale portant les composantes du vecteur x sur sa diagonale ; de même $S = \mathrm{Diag}(s_1, \ldots, s_n)$, *etc.* On utilisera constamment le vecteur

$$e := \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$$

dont la dimension se déduira clairement du contexte. Observons que $Xe = x$.

16.1 Le chemin central primal-dual

Le *chemin central* est une courbe située dans

$$\mathcal{F}^s := \mathcal{F}^s_{\mathrm{P}} \times \mathcal{F}^s_{\mathrm{D}} = \{z = (x, y, s) : Ax = b,\ A^{\mathsf{T}} y + s = c,\ x > 0,\ s > 0\}$$

paramétrée par un scalaire $\mu > 0$. C'est donc l'image d'une application

$$\mu \in \,]0, +\infty[\mapsto z(\mu) := (x(\mu), y(\mu), s(\mu)) \in \mathcal{F}^s.$$

Celui-ci sert de guide aux itérés, les conduisant vers une solution primale-duale particulière du problème (P). Pour qu'il soit défini, il faut évidemment que $\mathcal{F}^s_{\mathrm{P}}$ et $\mathcal{F}^s_{\mathrm{D}}$ soient non vides, ce qui, d'après les propositions 15.11 et 15.13, peut s'exprimer en termes primaux seulement :

$$\boxed{\mathcal{F}^s_{\mathrm{P}} \neq \varnothing \text{ et } \mathcal{S}_{\mathrm{P}} \text{ est non vide et borné.}} \tag{16.2}$$

On fera cette hypothèse dans toute cette section. La variable duale $y(\mu)$ ne sera définie de façon univoque que si A est surjective.

Comme son nom l'indique, les points $z(\mu)$ sont « bien centrés » dans l'ensemble admissible. On montrera que, sous certaines conditions, $z(\mu)$ émane (pour $\mu \to +\infty$) du *centre analytique* de l'ensemble admissible $\mathcal{F} := \mathcal{F}_{\mathrm{P}} \times \mathcal{F}_{\mathrm{D}}$ pour aboutir (lorsque $\mu \downarrow 0$) au *centre analytique de la face optimale primale-duale* $\mathcal{S} := \mathcal{S}_{\mathrm{P}} \times \mathcal{S}_{\mathrm{D}}$.

Définition et existence

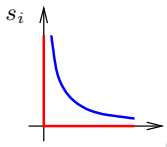
Il y a plusieurs manières d'introduire le chemin central primal-dual (voir aussi l'exercice 16.5). Nous commencerons par utiliser la technique de perturbation des conditions d'optimalité, qui est celle qui se généralise le plus facilement à des problèmes ne faisant pas partie de l'optimisation (comme les problèmes de complémentarité). L'existence du chemin central est cependant plus aisément démontrable si l'on revient dans le domaine de l'optimisation en interprétant le système perturbé comme les conditions d'optimalité d'un problème pénalisé. Nous considérerons les cas de la pénalisation des problèmes dual et primal.

Les équations d'optimalité (16.1) sont formées de deux équations linéaires $A^{\mathsf{T}} y + s = c$ et $Ax = b$, qui à elles seules ne présentent pas trop de difficulté, ainsi que des conditions

$$x^{\mathsf{T}} s = 0, \quad x \geqslant 0, \quad s \geqslant 0.$$

Ces dernières renferment toute la *combinatoire* du problème. Il y a en effet 2^n façons de les réaliser en choisissant, pour tout i, si c'est x_i ou s_i qui est nul. On peut faire disparaître cette combinatoire en perturbant chaque condition $x_i s_i = 0$ en $x_i s_i = \mu$ ($\mu > 0$ est un paramètre) et en imposant la stricte positivité de x et s :

$$\begin{cases} A^\mathsf{T} y + s = c, \quad s > 0 \\ Ax = b, \quad x > 0 \\ Xs = \mu e. \end{cases} \tag{16.3}$$



On a noté

$$X := \mathrm{Diag}(x_1, \ldots, x_n) \qquad \text{et} \qquad e := (1 \ \cdots \ 1)^\mathsf{T}.$$

Le graphique à droite dans (16.3) montre comment, dans l'espace (x_i, s_i), la courbe *non différentiable* définie par $x_i s_i = 0$ est transformée en la courbe *différentiable* définie par $x_i s_i = \mu$. Au passage, cette observation montre le lien qu'il peut y avoir entre combinatoire et non différentiabilité. Lorsqu'elle existe, la solution de ce système perturbé (16.3) est un point central $z(\mu) = (x(\mu), y(\mu), s(\mu))$.

Nous venons d'exposer l'approche par perturbation. On peut aussi obtenir le système (16.3) par une technique de pénalisation. En effet, (16.3) sont les conditions d'optimalité du problème obtenu à partir du problème (P) par pénalisation logarithmique de sa contrainte de positivité :

$$(P_\mu) \quad \begin{cases} \inf \ c^\mathsf{T} x + \mu \, \mathrm{lb}(x) \\ Ax = b, \end{cases} \tag{16.4}$$

où $\mathrm{lb} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ est la *fonction log-barrière* définie en $x \in \mathbb{R}^n$ par (c'est une fonction autoconcordante, voir l'exemple **??**)

$$\mathrm{lb}(x) = \begin{cases} -\sum_{i=1}^n \log x_i & \text{si } x > 0 \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$

En effet, comme les contraintes de (P_μ) sont qualifiées (elles sont affines), il existe un multiplicateur de Lagrange $y \in \mathbb{R}^m$ tel que l'on ait les conditions d'optimalité suivantes :

$$\begin{cases} A^\mathsf{T} y + \mu X^{-1} e = c \\ Ax = b. \end{cases}$$

En posant $s = \mu X^{-1} e$, on retrouve (16.3). On appelle (P_μ) le *problème barrière primal* (les logarithmes dans lb forment une barrière empêchant x de quitter l'orthant positif).

Une troisième manière d'introduire le chemin central est de pénaliser la contrainte de positivité $s \geqslant 0$ du problème dual. Lorsque $\mathcal{F}_\mathrm{D}^s \neq \varnothing$, on peut considérer le problème :

$$(D_\mu) \quad \begin{cases} \sup \ b^\mathsf{T} y - \mu \, \mathrm{lb}(s) \\ A^\mathsf{T} y + s = c. \end{cases} \tag{16.5}$$

Comme il s'agit d'un problème de maximisation, la pénalisation est obtenue en retranchant la barrière logarithmique (comparez avec le problème (P_μ)).

Intéressons-nous à présent à des conditions assurant l'existence du chemin central. Le fait que le système d'optimalité (16.1), qui est non linéaire, ait une solution n'assure

en rien qu'il en est de même pour le système perturbé (16.3). Il faut certainement que $\mathcal{F}^s \neq \varnothing$ (équivalente à (16.2)) et il se fait que cette condition est aussi suffisante. Elle joue ici le rôle de la *condition de qualification de Slater* du système (16.1).

Proposition 16.1 (existence du chemin central) *Si (16.2) a lieu et $\mu > 0$, alors le système (16.3) a une solution. Celle-ci est unique en x et s. Elle est également unique en y si A est surjective.*

Démonstration. D'après ce qui précède (x, y, s) est solution de (16.3) si, et seulement si, x est solution de (P_μ) de multiplicateur y et si $s = \mu X^{-1}e$ (la condition est suffisante du fait de la convexité du problème (P_μ)). Il reste à montrer que (P_μ) a une solution, car du fait de la stricte convexité de $x \mapsto c^\mathsf{T}x - \mu\sum_{i=1}^n \log x_i$, celle-ci est nécessairement unique en x et en $s = \mu X^{-1}e$.

On considère la fonction $\psi_\mu \in \overline{\mathrm{Conv}}(\mathbb{R}^n)$ définie par

$$\psi_\mu(x) = c^\mathsf{T}x + \mu\,\mathrm{lb}(x) + \mathcal{I}_{\{x\in\mathbb{R}^n : Ax=b\}}(x),$$

où $\mathcal{I}_P$ désigne la fonction indicatrice de l'ensemble P. Ses minimiseurs sont ceux de (P_μ). Il suffit donc que sa fonction asymptotique ψ_μ^∞ vérifie $\psi_\mu^\infty(d) > 0$ pour tout $d \neq 0$, pour que (P_μ) ait un ensemble non vide (et borné) de solutions (proposition 3.28). On observe que

$$\mathrm{lb}^\infty(d) = \begin{cases} 0 & \text{si } d \geqslant 0 \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$

Dès lors

$$\psi_\mu^\infty(d) = \begin{cases} c^\mathsf{T}d & \text{si } Ad = 0 \text{ et } d \geqslant 0 \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$

Si $\psi_\mu^\infty(d) \leqslant 0$, on a

$$d \neq 0, \quad c^\mathsf{T}d \leqslant 0, \quad Ad = 0 \quad \text{et} \quad d \geqslant 0.$$

La bornitude de $\mathcal{S}_\mathrm{P}$ entraîne alors que $d = 0$, ce qui démontre l'existence d'un minimiseur de ψ_μ, c'est-à-dire d'une solution de (P_μ). □

On notera

$$z(\mu) := (x(\mu), y(\mu), s(\mu))$$

un triplet solution de (16.3) (unique en x et s). Le chemin central est donc l'image de l'application

$$\mu \in \,]0, +\infty[\mapsto z(\mu).$$

Propriétés

Nous allons montrer que, sous certaines conditions, le chemin central émane du centre analytique de l'ensemble admissible $\mathcal{F}_\mathrm{P}$ (lorsque $\mu \to +\infty$ et si $\mathcal{F}_\mathrm{P}^s$ est non vide et borné) pour aboutir au centre analytique de la face optimale (lorsque $\mu \downarrow 0$ et si $\mathcal{S}_\mathrm{P}^o$ est non vide et borné). Il nous faut d'abord définir ce que sont ces centres analytiques.

Proposition 16.2 (centre analytique de l'ensemble admissible) *Si $\mathcal{F}_{\mathrm{P}}^s$ est non vide et borné, le problème*

$$\begin{cases} \inf\ \mathrm{lb}(x) \\ Ax = b \end{cases} \tag{16.6}$$

a une solution unique $\check{x} \in \mathbb{R}^n$ caractérisée par les conditions suivantes :

$$A\check{x} = b, \quad \check{x} > 0, \quad \check{X}^{-1}e \in \mathcal{R}(A^{\mathsf{T}}). \tag{16.7}$$

De même, si $\mathcal{F}_{\mathrm{D}}^s$ est non vide et borné et si A est surjective, le problème

$$\begin{cases} \inf\ \mathrm{lb}(s) \\ A^{\mathsf{T}}y + s = c \quad (s > 0) \end{cases} \tag{16.8}$$

a une solution unique $(\check{y}, \check{s}) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n$ caractérisée par les conditions suivantes :

$$A^{\mathsf{T}}\check{y} + \check{s} = c, \quad \check{s} > 0, \quad \check{S}^{-1}e \in \mathcal{N}(A). \tag{16.9}$$

Démonstration. Le problème (16.6) est celui obtenu par pénalisation logarithmique du problème

$$\begin{cases} \inf\ 0 \\ Ax = b \\ x \geqslant 0. \end{cases}$$

Son ensemble de solution étant $\mathcal{F}_{\mathrm{P}}$, qui par hypothèse est non vide et borné, la proposition 16.1 implique que (16.6) a une solution unique, soit $\check{x} \in \mathbb{R}^n$. Celle-ci est caractérisée par les conditions d'optimalité de (16.6) qui peuvent s'exprimer par (16.7).

La seconde partie se démontre de la même manière. □

Lorsqu'elles existent, les solutions uniques de (16.6) et (16.8) sont appelées les *centres analytiques* des ensembles admissibles $\mathcal{F}_{\mathrm{P}}$ et $\mathcal{F}_{\mathrm{D}}$, respectivement. On utilise le qualificatif « analytique », car ce n'est pas une notion géométrique dans le sens où elle ne dépend pas que de la forme de $\mathcal{F}_{\mathrm{P}}$ et $\mathcal{F}_{\mathrm{D}}$, mais également des équations que définissent ces ensembles. Ainsi, si l'on ajoute une contrainte superflue, c'est-à-dire une contrainte ne modifiant pas l'ensemble admissible, son centre analytique est déplacé (voir l'exercice 16.4). On pourrait penser que la notion géométrique de *centre de gravité* serait un concept plus attrayant, mais son calcul n'est pas aisé, même si l'ensemble est comme ici un polyèdre convexe [555 ; section 2.1.1].

Venons-en maintenant à la notion de centre analytique de la face optimale. On rappelle les notations de la section 15.2.2 :

$$\begin{aligned} \mathfrak{B} &:= \{i \in [1:n] : \exists\, x \in \mathcal{S}_{\mathrm{P}} \text{ vérifiant } x_i > 0\} \\ \mathfrak{N} &:= \{i \in [1:n] : \exists\, (y,s) \in \mathcal{S}_{\mathrm{D}} \text{ vérifiant } s_i > 0\}. \end{aligned}$$

On sait que $\mathfrak{B}$ et $\mathfrak{N}$ forment une partition de $[1:n]$ (propositions 15.7 et 15.8) et que l'ensemble des solutions de (P) est la face de $\mathcal{F}_{\mathrm{P}}$, appelée aussi *face optimale* de $\mathcal{F}_{\mathrm{P}}$,

définie par

$$\mathcal{S}_{\text{P}} = \{x \in \mathcal{F}_{\text{P}} : x_{\mathfrak{N}} = 0\}.$$

On note son intérieur relatif

$$\mathcal{S}_{\text{P}}^{o} = \{x \in \mathcal{F}_{\text{P}} : x_{\mathfrak{B}} > 0,\ x_{\mathfrak{N}} = 0\}. \tag{16.10}$$

Proposition 16.3 (centre analytique de la face optimale) 1) *Si $\mathcal{S}_{\text{P}}$ est non vide et borné et si $\mathfrak{B} \neq \varnothing$, le problème*

$$\begin{cases} \inf\ \text{lb}(x_{\mathfrak{B}}) \\ Ax = b, \quad x_{\mathfrak{N}} = 0 \quad (x_{\mathfrak{B}} > 0) \end{cases} \tag{16.11}$$

a une solution unique $\hat{x} \in \mathbb{R}^n$, caractérisée par les conditions

$$A\hat{x} = b, \quad \hat{x}_{\mathfrak{B}} > 0, \quad \hat{x}_{\mathfrak{N}} = 0, \quad \hat{X}_{\mathfrak{B}}^{-1} e \in \mathcal{R}(A_{:\mathfrak{B}}^{\mathsf{T}}). \tag{16.12}$$

2) *De même si $\mathcal{S}_{\text{D}}$ est non vide et borné (donc A est surjective) et si $\mathfrak{N} \neq \varnothing$, le problème*

$$\begin{cases} \inf\ \text{lb}(s_{\mathfrak{N}}) \\ A^{\mathsf{T}} y + s = c, \quad s_{\mathfrak{B}} = 0 \quad (s_{\mathfrak{N}} > 0) \end{cases} \tag{16.13}$$

a une solution unique $(\hat{y}, \hat{s}) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n$, caractérisée par les conditions

$$A^{\mathsf{T}}\hat{y} + \hat{s} = c, \quad \hat{s}_{\mathfrak{B}} = 0, \quad \hat{s}_{\mathfrak{N}} > 0, \quad A_{:\mathfrak{N}} \hat{S}_{\mathfrak{N}}^{-1} e \in \mathcal{R}(A_{:\mathfrak{B}}). \tag{16.14}$$

Démonstration. En ne considérant que les variables d'indices dans $\mathfrak{B}$ ($x_{\mathfrak{N}}$ étant fixé à 0), le problème (16.11) est obtenu par pénalisation logarithmique du problème

$$\begin{cases} \inf\ 0^{\mathsf{T}} x_{\mathfrak{B}} \\ A_{:\mathfrak{B}} x_{\mathfrak{B}} = b \\ x_{\mathfrak{B}} \geqslant 0. \end{cases}$$

Par l'hypothèse $\mathfrak{B} \neq \varnothing$, $\{x_{\mathfrak{B}} : Ax_{\mathfrak{B}} = b, x_{\mathfrak{B}} > 0\}$ est non vide et l'ensemble des solutions de ce problème (qui se confond avec son ensemble admissible, c'est-à-dire S_P) est non vide et borné. Par la proposition 16.1, (16.11) a une solution unique. Celle-ci est caractérisée par les conditions d'optimalité de (16.11) qui peuvent s'exprimer par (16.12).

La seconde partie se démontre de la même manière. □

Lorsqu'ils existent, les points $\hat{x}$ et $(\hat{y}, \hat{s})$ définis par (16.12) et (16.14) sont appelés les *centres analytiques des faces optimales*.

On peut à présent décrire le chemin central. On sera amené à comparer le comportement de quantités (éventuellement vectorielles) qui dépendent du paramètre μ. Ainsi si $\mu \mapsto v(\mu)$ et $\mu \mapsto w(\mu)$ sont deux fonctions de μ, on notera :

- $v = O(w)$ s'il existe une constante positive C (indépendante de μ) telle que lorsque $\mu \downarrow 0$ on a $v(\mu) \leqslant Cw(\mu)$ (inégalité vectorielle),

- $v \sim w$ si $v = O(w)$ et $w = O(v)$.

Avec ces notations, $v = O(1)$ signifie que $\{v(\mu)\}_{\mu\downarrow 0}$ est bornée et $v \sim 1$ signifie que $\{v(\mu)\}_{\mu\downarrow 0}$ et $\{v(\mu)^{-1}\}_{\mu\to 0^+}$ sont bornées.

On trouvera à l'exercice 16.6 un résultat précisant le point (ii).

Proposition 16.4 (description du chemin central) *Supposons que* (16.2) *ait lieu. Alors*

(i) *si A est surjective, $x > 0$ et $s > 0$, alors la matrice*

$$\begin{pmatrix} 0 & A^{\mathsf{T}} & I \\ A & 0 & 0 \\ S & 0 & X \end{pmatrix}$$

est inversible et l'application $\mu \mapsto z(\mu)$ définissant le chemin central est de classe C^∞ ;

(ii) *si μ croît, $c^{\mathsf{T}}x(\mu)$ et $x(\mu)^{\mathsf{T}}s(\mu)$ croissent et $b^{\mathsf{T}}y(\mu)$ décroît ;*

(iii) *pour $\bar\mu > 0$ fixé, les ensembles $\{x(\mu) : 0 < \mu \leqslant \bar\mu\}$ et $\{s(\mu) : 0 < \mu \leqslant \bar\mu\}$ sont bornés ; si A est surjective, l'ensemble $\{y(\mu) : 0 < \mu \leqslant \bar\mu\}$ est aussi borné ;*

(iv) *si $\mathcal{F}_{\text{P}}$ est borné, $x(\mu)$ converge vers le centre analytique de $\mathcal{F}_{\text{P}}$, lorsque $\mu \to +\infty$; de même si $\mathcal{F}_{\text{D}}$ est borné (donc A surjective), $(y(\mu), s(\mu))$ converge vers le centre analytique de $\mathcal{F}_{\text{D}}$, lorsque $\mu \to +\infty$;*

(v) *si $\mu \downarrow 0$, on a $x_{\mathfrak{B}}(\mu) \sim 1$, $x_{\mathfrak{N}}(\mu) \sim \mu$, $s_{\mathfrak{B}}(\mu) \sim \mu$, $s_{\mathfrak{N}}(\mu) \sim 1$ et $(x(\mu), s(\mu)) \to (\hat x, \hat s)$ le centre analytique des faces optimales.*

Démonstration. (i) L'application $\mu \mapsto z(\mu)$ est fonction implicite de $F(z, \mu) = 0$, où

$$F(z,\mu) = \begin{pmatrix} A^{\mathsf{T}}y + s - c \\ Ax - b \\ Xs - \mu e \end{pmatrix}.$$

Comme F est C^∞, la fonction implicite sera C^∞ si la matrice $F'_z(z, \mu)$ (celle donnée au point (ii)) est inversible pour $z = z(\mu)$. C'est bien le cas, car si (dx, dy, ds) est dans son noyau, on trouve successivement

$$ds = -X^{-1}Sdx, \quad dx = S^{-1}XA^{\mathsf{T}}dy \quad \text{et} \quad AS^{-1}XA^{\mathsf{T}}dy = 0.$$

Comme A est surjective et $(x, s) > 0$, la matrice $AS^{-1}XA^{\mathsf{T}}$ est inversible, ce qui implique que $(dx, dy, ds) = 0$.

(ii) Ce résultat se démontre comme dans la théorie de la pénalisation (proposition 12.2), en considérant les problèmes pénalisés (P_μ) et (D_μ). Pour le saut de dualité, on utilise $x(\mu)^{\mathsf{T}}s(\mu) = c^{\mathsf{T}}x(\mu) - b^{\mathsf{T}}y(\mu)$. (Voir aussi l'exercice 16.6 pour un résultat plus précis et une démonstration directe lorsque A est surjective.)

(iii) Comme $\mathcal{S}_{\text{P}}$ est borné, l'ensemble $\{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b,\ x \geqslant 0,\ c^{\mathsf{T}}x \leqslant c^{\mathsf{T}}x(\bar\mu)\}$ est aussi borné (ils ont le même cône asymptotique). Or $x(\mu)$ est dans ce dernier ensemble lorsque $\mu \in]0, \bar\mu]$ (par le point (ii)), donc $\{x(\mu)\}_{0<\mu\leqslant\bar\mu}$ est borné.

De même, comme $\mathcal{F}_{\text{P}}^s \neq \varnothing$, l'ensemble $\{s \in \mathbb{R}_+ :$ il existe $y \in \mathbb{R}^m$ tel que $A^{\mathsf{T}}y + s = c$ et $b^{\mathsf{T}}y \geqslant b^{\mathsf{T}}y(\bar{\mu})\}$ est borné (les deux ensembles ont le même cône asymptotique $\{r \in \mathbb{R}_+ :$ il existe $z \in \mathbb{R}^m$ tel que $A^{\mathsf{T}}z + r = 0$, et $b^{\mathsf{T}}z \geqslant 0\}$). Comme $s(\mu)$ appartient à cet ensemble lorsque $\mu \in]0, \bar{\mu}]$ (par le point (ii)), $\{s(\mu)\}_{0<\mu\leqslant\bar{\mu}}$ est bornée.

Si A est surjective, l'équation $A^{\mathsf{T}}y(\mu) + s(\mu) = c$ montre que $\{y(\mu) : 0 < \mu \leqslant \bar{\mu}\}$ est aussi borné.

(iv) Si $\mathcal{F}_{\text{P}}$ est borné, $\{x(\mu)\} \subseteq \mathcal{F}_{\text{P}}$ est bornée. Il suffit donc de montrer que cette suite a un unique point d'adhérence quand $\mu \to \infty$, qui est le centre analytique $\check{x}$. Soit $\bar{x}$ un point adhérent à $\{x(\mu)\}$: pour une sous-suite $x(\mu) \to \bar{x}$. Comme $x(\mu)$ est la solution de (P_μ), on a quel que soit $x \in \mathcal{F}_{\text{P}}^s$:

$$c^{\mathsf{T}}x(\mu) + \mu \operatorname{lb}(x(\mu)) \leqslant c^{\mathsf{T}}x + \mu \operatorname{lb}(x).$$

En divisant par $\mu > 0$ et en passant à la limite quand $\mu \to \infty$, on trouve pour tout $x \in \mathcal{F}_{\text{P}}^s$:

$$\operatorname{lb}(\bar{x}) \leqslant \operatorname{lb}(x).$$

Ceci montre que $\bar{x} = \check{x}$.

On s'y prend de la même manière pour $(y(\mu), s(\mu))$. Par optimalité, pour tout couple $(y, s) \in \mathcal{F}_{\text{D}}^s$, on a

$$b^{\mathsf{T}}y(\mu) - \mu \operatorname{lb}(s(\mu)) \geqslant b^{\mathsf{T}}y - \mu \operatorname{lb}(s).$$

(v) Soit $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{s})$ une solution strictement complémentaire (proposition 15.8). On réduit le saut de dualité $x^{\mathsf{T}}s$ en remplaçant x par $\bar{x}$:

$$\bar{x}^{\mathsf{T}}s(\mu) \leqslant x(\mu)^{\mathsf{T}}s(\mu) = n\mu.$$

Comme $\bar{x}_{\mathfrak{N}} = 0$, $\bar{x}_{\mathfrak{B}}^{\mathsf{T}}s_{\mathfrak{B}}(\mu) \leqslant n\mu$. Mais $\bar{x}_{\mathfrak{B}} > 0$, donc $s_{\mathfrak{B}}(\mu) = O(\mu)$. Alors, de $x_i(\mu)s_i(\mu) = \mu$, pour tout i, on déduit que $1 = O(x_{\mathfrak{B}}(\mu))$. Mais $\{x_{\mathfrak{B}}(\mu)\}$ est bornée, donc $x_{\mathfrak{B}}(\mu) \sim 1$. En utilisant à nouveau $x_i(\mu)s_i(\mu) = \mu$, pour tout i, on déduit que $s_{\mathfrak{B}}(\mu) \sim \mu$.

De la même manière,

$$x(\mu)^{\mathsf{T}}\bar{s} \leqslant x(\mu)^{\mathsf{T}}s(\mu) = n\mu.$$

Comme $\bar{s}_{\mathfrak{B}} = 0$ et $\bar{s}_{\mathfrak{N}} > 0$, on a $x_{\mathfrak{N}}(\mu) = O(\mu)$. En utilisant alors $x_i(\mu)s_i(\mu) = \mu$, on a $s_{\mathfrak{N}}(\mu) \sim 1$ ($\{s(\mu)\}$ bornée) et donc $x_{\mathfrak{N}}(\mu) \sim \mu$.

Il reste à montrer que $(x(\mu), y(\mu), s(\mu))$ converge vers le centre analytique de la face optimale lorsque $\mu \downarrow 0$. Comme $\{(x(\mu), s(\mu))\}$ est bornée, il existe des sous-suites telles que

$$x(\mu) \to \tilde{x} \quad \text{et} \quad s(\mu) \to \tilde{s}.$$

Passons à la limite dans (16.3). Comme $A^{\mathsf{T}}y(\mu) = c - s(\mu)$ converge et que $\mathcal{R}(A^{\mathsf{T}})$ est fermé, il existe $\tilde{y} \in \mathbb{R}^m$ tel que l'on ait

$$\begin{cases} A^{\mathsf{T}}\tilde{y} + \tilde{s} = c \\ A\tilde{x} = b \\ \tilde{X}\tilde{s} = 0. \end{cases}$$

Donc $\tilde{z} = (\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{s})$ est solution primale-duale. Dès lors $\tilde{x}_{\mathfrak{N}} = 0$ et $\tilde{s}_{\mathfrak{B}} = 0$. D'autre part, $(x_{\mathfrak{B}}(\mu), s_{\mathfrak{N}}(\mu)) \sim 1$ implique que $(\tilde{x}_{\mathfrak{B}}, \tilde{s}_{\mathfrak{N}}) > 0$. Il reste à montrer que $\tilde{X}_{\mathfrak{B}}^{-1} e \in \mathcal{R}(A_{:\mathfrak{B}}^{\mathsf{T}})$ et $A_{:\mathfrak{N}} \tilde{S}_{\mathfrak{N}}^{-1} e \in \mathcal{R}(A_{:\mathfrak{B}})$ pour conclure.

Comme $(x_{\mathfrak{N}}(\mu), s_{\mathfrak{B}}(\mu)) \sim \mu$, il existe une sous-suite telle que $(x_{\mathfrak{N}}(\mu), s_{\mathfrak{B}}(\mu))/\mu \to (x'_{\mathfrak{N}}, s'_{\mathfrak{B}})$. À la limite dans $X(\mu)s(\mu)/\mu = e$, on trouve

$$\tilde{X}_{\mathfrak{B}}^{-1} e = s'_{\mathfrak{B}} \quad \text{et} \quad \tilde{S}_{\mathfrak{N}}^{-1} e = x'_{\mathfrak{N}}.$$

D'autre part $Ax(\mu) = b = A_{:\mathfrak{B}} \bar{x}_{\mathfrak{B}}$ (car $\bar{x}_{\mathfrak{N}} = 0$), donc

$$-A_{:\mathfrak{B}} \frac{x_{\mathfrak{B}}(\mu) - \bar{x}_{\mathfrak{B}}}{\mu} = A_{:\mathfrak{N}} \frac{x_{\mathfrak{N}}(\mu)}{\mu} \to A_{:\mathfrak{N}} x'_{\mathfrak{N}}.$$

Comme $\mathcal{R}(A_{:\mathfrak{B}})$ est fermé, $A_{:\mathfrak{N}} x'_{\mathfrak{N}} \in \mathcal{R}(A_{:\mathfrak{B}})$. De même $A_{:\mathfrak{B}}^{\mathsf{T}} y(\mu) + s_{\mathfrak{B}}(\mu) = c_{\mathfrak{B}} = A_{:\mathfrak{B}}^{\mathsf{T}} \bar{y}$ (car $\bar{s}_{\mathfrak{B}} = 0$), donc

$$A_{:\mathfrak{B}}^{\mathsf{T}} \frac{\bar{y} - y(\mu)}{\mu} = \frac{s_{\mathfrak{B}}(\mu)}{\mu} \to s'_{\mathfrak{B}}.$$

Comme $\mathcal{R}(A_{:\mathfrak{B}}^{\mathsf{T}})$ est fermé, $s'_{\mathfrak{B}} \in \mathcal{R}(A_{:\mathfrak{B}}^{\mathsf{T}})$. □

16.2 Éléments constitutifs des algorithmes

Cheminement

Résoudre le problème d'optimisation (P) revient à résoudre ses conditions d'optimalité (16.1), lesquelles sont nécessaires et suffisantes. En apparence simple, ce système d'équations et d'inéquations présente plusieurs difficultés, toutes liées aux conditions de complémentarité $0 \leqslant s \perp x \geqslant 0$. D'une part, l'équation $s^{\mathsf{T}} x = 0$ qui exprime la perpendicularité de s et x est non linéaire. D'autre part, elle présente une « combinatoire » importante. Elle s'écrit en effet, du fait de la positivité de s et x : $x_i s_i = 0$, pour tout $i \in [1:n]$; il faut donc décider pour tout indice i si $x_i = 0$ ou $s_i = 0$, et il y a 2^n possibilités.

Si l'on a un premier itéré primal-dual $z := (x, y, s)$ avec $x > 0$ et $s > 0$, on pourrait songer à résoudre le système d'optimalité (16.1) directement par des itérations de Newton amorties : à chaque itération, on détermine un pas $\alpha > 0$ le long de la direction de Newton $d := (dx, dy, ds)$ de telle sorte que l'itéré suivant $z_+ := (x_+, y_+, s_+) = z + \alpha d$ vérifie encore $x_+ > 0$ et $s_+ > 0$. On sait en effet que la stricte positivité des variables x et s assure que l'équation de Newton

$$\begin{pmatrix} 0 & A^{\mathsf{T}} & I \\ A & 0 & 0 \\ S & 0 & X \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dx \\ dy \\ ds \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} A^{\mathsf{T}} y + s - c \\ Ax - b \\ Xs \end{pmatrix},$$

associée au système d'optimalité est bien définie (la matrice est inversible par la proposition 16.4). L'expérience à montré que cette stratégie, qui est suivie par l'*algorithme affine* (« *affine scaling algorithm* »), ne conduit pas à des algorithmes polynomiaux. La

raison provient probablement du fait que, lorsque z est proche du bord de l'ensemble admissible primal-dual, le pas $\alpha > 0$ le long de d, assurant l'admissibilité des itérés, peut devenir très petit, empêchant tout progrès significatif vers la solution. Une des techniques mises au point pour obtenir la polynomialité consiste à forcer les itérés de rester proche du chemin central, d'une part, et à être moins gourmand, d'autre part, en ne cherchant pas à résoudre le système non linéaire (16.1) directement.

Il est difficile de renoncer à la direction de Newton, dont on connaît les qualités, si bien que le fait de faire des déplacements le long de telles directions est conservé dans les algorithmes de points intérieurs considérés dans ce chapitre. De manière à prévenir le phénomène des petits pas décrit ci-dessus, les algorithmes vont maintenir les itérés suffisamment proches du chemin central étudié à la section 16.1. Nous montrerons en effet dans chaque cas que, dans ces conditions, le pas α pris le long de la direction de Newton est borné inférieurement par une constante strictement positive en $O(n^{-\omega})$, où $\omega > 0$ dépend de l'approche algorithmique, en particulier du type de voisinage du chemin central où sont maintenus les itérés. Même si l'on peut regretter que la borne inférieure sur le pas dépende de n (il ne semble pas possible d'éviter cela), on est au moins assuré que les pas ne deviendront pas arbitrairement petits. Cette dépendance en n aura une incidence directe sur la *complexité itérative* des algorithmes, c'est-à-dire sur le nombre d'itérations qu'ils requièrent pour s'approcher d'une solution à $\varepsilon > 0$ près.

Pour des raisons évidentes, on dit que les algorithmes qui viennent d'être brièvement décrits sont des *méthodes de suivi de chemin*. La solution que l'on recherche par ces algorithmes, le centre analytique de la face optimale situé au bout de chemin central, est un point singulier parce que la jacobienne du système de Newton n'y est en général pas inversible. On ne peut donc pas appliquer directement les techniques de suivi de chemin que l'on utilise dans les méthodes d'homotopie par exemple. Celles mises en œuvre pour suivre le chemin central dans les méthodes de points intérieurs sont originales. Elles dépendent des algorithmes, mais elles relèvent presque toujours d'un principe que l'on peut voir comme la *poursuite d'un objectif fuyant*, ce que l'on a schématisé à la figure 16.1 : en l'itéré $z_k \in \mathcal{F}^s$ de l'itération k, on se fixe pour objectif

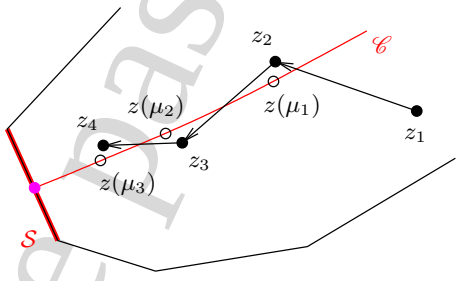


Fig. 16.1. Poursuite d'un objectif fuyant

un point $z(\mu_k)$ sur le chemin central $\mathscr{C}$, mais après avoir fait un pas de Newton dans sa direction (parfois plusieurs pas) conduisant à z_{k+1}, on change d'objectif en visant un autre point $z(\mu_{k+1})$ sur le chemin central, plus près de la solution ($\mu_{k+1} < \mu_k$).

On se rapproche ainsi petit à petit de la solution cherchée, laquelle est en quelque sorte inaccessible directement. Ce principe s'est avéré fécond.

Certains algorithmes imposent aux itérés d'être strictement admissibles (section 16.3). Leur complexité itérative est en $O(n^\omega \log \varepsilon^{-1})$, avec $\omega = \frac{1}{2}$ ou 1, ce qui veut dire que le nombre d'itérations pour atteindre une solution à $\varepsilon > 0$ près est majoré par une constante (indépendante de n et de ε) fois $n^\omega \log \varepsilon^{-1}$ (une définition précise de cette complexité itérative sera donnée plus loin). La complexité itérative en $O(n^{1/2} \log \varepsilon^{-1})$ est la meilleure que l'on ait obtenue ; mais les algorithmes qui la réalisent demandent que l'on dispose d'un premier itéré strictement admissible. D'autres algorithmes autorisent les itérés à ne pas satisfaire les équations linéaires de (16.1), ce qui peut être utile s'il n'y a pas de point primal-dual strictement admissible (c'est-à-dire si $\mathcal{F}^s = \varnothing$) ou si l'on ne dispose pas initialement d'un tel point. Leur complexité itérative est moins bonne ; elle est en $O(n^2 \log \varepsilon^{-1})$ pour l'algorithme étudié à la section 16.4.

Voici à présent quelques concepts qui jouent un rôle-clé dans l'étude des algorithmes de points intérieurs.

Mesures du saut de dualité et du centrage

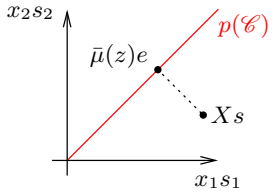
Le contrôle des itérés dans les algorithmes de points intérieurs se fait par plusieurs « mesures » : mesure du saut de dualité, mesure du centrage et mesure de l'admissibilité.

Si l'on veut se donner une cible sur le chemin central primal-dual $\mathscr{C}$, il est nécessaire de savoir près de quel point central l'itéré courant z se trouve. Il n'y aurait en effet pas de sens à se donner une cible qui soit plus éloignée de la solution que ne l'est l'itéré courant. Trouver le point central le plus proche de z n'est cependant pas un problème simple, ni d'ailleurs bien posé car, le chemin central n'étant pas un convexe fermé, la projection de z sur $\mathscr{C}$ n'est en général pas bien définie (proposition 2.24). Par contre, l'image de $\mathscr{C}$ par l'application surjective (et bijective si A est surjective, voir l'exercice 16.2)

$$p : z = (x, y, s) \in \mathcal{F}^s \mapsto (x_1 s_1, \ldots, x_n s_n) \in \mathbb{R}^n_{++} \tag{16.15}$$

est la demi-droite $\{\mu e : \mu > 0\}$, si bien que la projection dans l'espace d'arrivée de cette application se fait trivialement en résolvant le problème

$$\min_{\mu \in \mathbb{R}} \|Xs - \mu e\|_2.$$



Sa solution est la moyenne arithmétique des produits $x_i s_i$:

$$\bar{\mu} \equiv \bar{\mu}(z) := \frac{x^\mathsf{T} s}{n}.$$

On l'appelle la *mesure du saut de dualité* (ou plus simplement le *saut de dualité* ; il s'agit alors d'un abus de langage car, d'après le théorème 15.11, il n'y a pas de

saut de dualité en la solution d'un problème d'optimisation linéaire). Les algorithmes chercheront à faire tendre $\bar{\mu}(z)$ vers 0.

Pour $z = (x, y, s) \in \mathcal{F}^s$:

$$z \in \mathscr{C} \quad \Longleftrightarrow \quad Xs = \bar{\mu}(z)e.$$

Un point $z \in \mathcal{F}^s$ est donc proche du chemin central si $\|(Xs)/\bar{\mu}(z) - e\|$ est petit devant 1 ou encore si $\|Xs - \bar{\mu}(z)e\|$ est petit devant $\bar{\mu}(z)$. On appelle *mesure du centrage* pour la norme ℓ_p, $p \in [1, \infty]$, la quantité

$$\gamma_p(z) := \|Xs - \bar{\mu}(z)e\|_p.$$

Divers voisinages du chemin central sont associés à ce concept de centrage.

On définit une première famille de voisinages, paramétrés par $p \in [1, \infty]$ et $\theta \in [0, 1[$, par

$$V_p(\theta) := \{z \in \mathcal{F}^s : \|Xs - \bar{\mu}(z)e\|_p \leqslant \theta\bar{\mu}(z)\}. \tag{16.16}$$

Dans cette famille de voisinages, on utilisera essentiellement $V_2(\theta)$, qui donne les meilleurs résultats de complexité. Cependant, il est parfois trop petit, ne laissant pas assez de liberté aux itérés. On montre en effet que pour $n \geqslant 2$, $\bigcup_{0 \leqslant \theta < 1} V_2(\theta) \neq \mathcal{F}^s$. Cette affirmation est examinée à l'exercice 16.7.

On fera aussi usage de

$$V_\infty^-(\theta) := \{z \in \mathcal{F}^s : Xs \geqslant (1-\theta)\bar{\mu}(z)e\}, \tag{16.17}$$

où $\theta \in [0, 1[$. Ce voisinage contient $V_\infty(\theta)$ et est assez grand puisque l'on peut montrer que $\bigcup_{0 \leqslant \theta < 1} V_\infty^-(\theta) = \mathcal{F}^s$. On se référera à nouveau à l'exercice 16.7 pour un examen de ces affirmations.

Sur la complexité itérative des algorithmes

Contrairement à l'algorithme du simplexe, les méthodes de points intérieurs ne sont pas des algorithmes à *terminaison finie* : ils ne trouvent pas la solution en un nombre fini d'étapes. En effet, à chaque itération, on a $x > 0$ et $s > 0$, ce qui n'est jamais le cas en une solution de (P) (voir la troisième condition dans (16.1)). On ne peut donc estimer que le nombre d'opérations pour trouver une solution à $\varepsilon > 0$ près. La proximité de la solution se mesurera ici par la petitesse du saut de dualité $\bar{\mu}(z)$. En réalité, il existe des procédures, dites de *purification* (section **??**), permettant de déterminer une solution exacte strictement complémentaire par quelques opérations d'algèbre linéaire à partir d'un itéré généré par un algorithme de points intérieurs, suffisamment proche de la face optimale.

On ne s'intéressera ici qu'à la *complexité itérative* des algorithmes. On veut dire par là que l'on cherche à estimer le nombre d'*itérations* nécessaires pour obtenir une solution à $\varepsilon > 0$ près, dans le pire des cas. Les résultats que nous donnerons sur cette question feront usage du lemme suivant. On note $\{z_k\}$ la suite des itérés générés par l'algorithme considéré et $\bar{\mu}_k = \bar{\mu}(z_k)$.

Lemme 16.5 (de complexité) *Supposons qu'il existe des constantes $\delta > 0$ et $\omega > 0$, telles que pour tout $k \geqslant 0$, les itérés $\{z_k\}$ vérifient*

$$\bar{\mu}_{k+1} \leqslant \left(1 - \frac{\delta}{n^\omega}\right) \bar{\mu}_k.$$

Alors, pour tout $\varepsilon \in]0,1]$ et tout $k \geqslant (n^\omega \log \varepsilon^{-1})/\delta$, on a

$$\frac{\bar{\mu}_k}{\bar{\mu}_0} \leqslant \varepsilon.$$

Démonstration. En prenant le logarithme de l'inégalité donnée dans l'énoncé et en utilisant le fait que $\log(1+t) \leqslant t$, on a

$$\log \bar{\mu}_{k+1} \leqslant \log\left(1 - \frac{\delta}{n^\omega}\right) + \log \bar{\mu}_k \leqslant -\frac{\delta}{n^\omega} + \log \bar{\mu}_k.$$

Par récurrence

$$\log \frac{\bar{\mu}_k}{\bar{\mu}_0} \leqslant -\frac{k\delta}{n^\omega}.$$

Dès lors $\bar{\mu}_k/\bar{\mu}_0 \leqslant \varepsilon$ si $-k\delta/n^\omega \leqslant \log \varepsilon$, ce qui s'écrit aussi $k \geqslant (n^\omega \log \varepsilon^{-1})/\delta$. □

En pratique, on cherche à avoir un saut de dualité inférieur à un seuil donné $\varepsilon > 0$:

$$\bar{\mu}_k \leqslant \varepsilon,$$

plutôt que l'inégalité relative $\bar{\mu}_k \leqslant \varepsilon\, \bar{\mu}_0$ fournie par le lemme. Le résultat reste le même, mais avec K qui dépend de $\bar{\mu}_0 > 0$. En effet, on peut écrire $\bar{\mu}_0 = \varepsilon^{1-\kappa}$ pour un certain $\kappa > 0$ (éventuellement grand) dépendant donc de l'itéré initial. On utilise alors le lemme avec $\varepsilon/\bar{\mu}_0 = \varepsilon^\kappa$ au lieu de ε : *pour tout $\varepsilon > 0$ et tout $k \geqslant K := O(n^\omega \log \varepsilon^{-1})$, on a $\bar{\mu}_k \leqslant \varepsilon$.*

16.3 Algorithmes avec itérés admissibles

16.3.1 Préliminaires

Les algorithmes étudiés dans cette section génèrent des itérés strictement admissibles, c'est-à-dire dans $\mathcal{F}^s$. Dès lors, les résidus sont toujours nuls : $r_c = 0$ et $r_b = 0$. Chaque nouvel itéré z_+ est obtenu à partir du précédent z en se déplaçant le long de la direction de Newton d, solution de (16.34), qui s'écrit ici

$$\begin{pmatrix} 0 & A^\mathsf{T} & I \\ A & 0 & 0 \\ S & 0 & X \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dx \\ dy \\ ds \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \mu e - Xs \end{pmatrix}. \tag{16.18}$$

Du fait de la linéarité des résidus et de l'utilisation de la direction de Newton pour mettre à jour les itérés, on voit qu'il suffit que les premiers résidus r_c et r_b soient nuls pour que les suivants le soient aussi. Par exemple, si $r_b(z) = 0$, on a en $z_+ = z + \alpha d$: $r_b(z_+) = r_b(z) + \alpha A dx = 0$. De même pour r_c.

Pour que les algorithmes soient bien posés et convergent, il faudra que les itérés conservent la stricte positivité de x et s et fassent décroître le saut de dualité $\bar{\mu}(z)$ vers 0. On comprend que l'analyse des algorithmes passe par l'examen de l'évolution du saut de dualité $\bar{\mu}(z)$ et de la mesure du centrage $\gamma_2(z) := \|Xs - \bar{\mu}(z)e\|_2$ le long de la direction de Newton. C'est ce qu'étudie le lemme suivant. On suppose que le paramètre μ est de la forme $\sigma\bar{\mu}$, avec $\sigma \geqslant 0$.

Lemme 16.6 (évolution du saut de dualité et du centrage) *Soit $d = (dx, dy, ds)$ la direction de Newton en $z = (x, y, s) \in \mathcal{F}^s$, avec $\mu := \sigma\bar{\mu}$, $\sigma \geqslant 0$. On note $z(\alpha) := z + \alpha d$. Alors les relations suivantes sont vérifiées :*
(i) $\bar{\mu}(z(\alpha)) = [1 - \alpha(1 - \sigma)]\bar{\mu}$,
(ii) $\gamma_2(z(\alpha)) \leqslant (1 - \alpha)\gamma_2(z) + \alpha^2\|dXds\|_2$.

Démonstration. On a

$$x_i(\alpha)s_i(\alpha) = (x_i + \alpha dx_i)(s_i + \alpha ds_i) = x_i s_i + \alpha(s_i dx_i + x_i ds_i) + \alpha^2 dx_i ds_i. \quad (16.19)$$

En sommant et en utilisant le fait que $dx^{\mathsf{T}} ds = 0$ (car $Adx = 0$ et $A^{\mathsf{T}} dy + ds = 0$) :

$$\bar{\mu}(z(\alpha)) = \bar{\mu} + \frac{\alpha}{n}(s^{\mathsf{T}} dx + x^{\mathsf{T}} ds).$$

On utilise ensuite le fait que $s^{\mathsf{T}} dx + x^{\mathsf{T}} ds = e^{\mathsf{T}}(Sdx + Xds) = e^{\mathsf{T}}(\sigma\bar{\mu}e - Xs) = n(\sigma - 1)\bar{\mu}$ pour trouver (i).

En reprenant (16.19) et en utilisant $s_i dx_i + x_i ds_i = \sigma\bar{\mu} - x_i s_i$ ainsi que la valeur trouvée pour $\bar{\mu}(z(\alpha))$, on a

$$\begin{aligned} x_i(\alpha)s_i(\alpha) - \bar{\mu}(z(\alpha)) &= (1 - \alpha)x_i s_i + (\alpha - 1)\bar{\mu} + \alpha^2 dx_i ds_i \\ &= (1 - \alpha)(x_i s_i - \bar{\mu}) + \alpha^2 dx_i ds_i. \end{aligned}$$

On en déduit (ii). □

Le point (i) du lemme précédent montre qu'en prenant $\sigma = 0$ et en faisant un pas unité ($\alpha = 1$), on annule le saut de dualité. Il est peu probable cependant que cela conduise en une solution car il y a de fortes chances pour qu'en chemin on ait perdu la positivité des variables x et s (même si l'on a conservé la *somme* des $x_i s_i$ positive).

Le point (ii) montre que le contrôle du centrage $\gamma_2(z(\alpha))$ passe par celui de $\|dXds\|_2$. L'estimation de $dXds$ sera toujours un passage-clé des démonstrations de convergence des algorithmes. On utilisera à plusieurs reprises la technique suivante. On observe que la dernière équation du système de Newton (16.18) s'écrit $Sdx + Xds = \mu - Xs$. En la multipliant par $(XS)^{-\frac{1}{2}}$, elle devient

$$D^{-1}dx + Dds = (XS)^{-\frac{1}{2}}(\mu e - Xs), \quad (16.20)$$

où

$$D = X^{\frac{1}{2}} S^{-\frac{1}{2}}.$$

Le lemme de Mizuno ci-dessous donne alors un moyen de relier la quantité $dXds = (D^{-1}dX)(Dds)$ qui nous intéresse à la somme des deux vecteurs $D^{-1}dx + Dds$, dont on a une autre expression en (16.20).

Lemme 16.7 (Mizuno [391]) *Si u, $v \in \mathbb{R}^n$ vérifient $u^\mathsf{T} v \geqslant 0$ et si $U := \mathrm{Diag}(u_1, \ldots, u_n)$, alors*

$$\|Uv\|_2 \leqslant \frac{1}{\sqrt{8}} \|u + v\|_2^2.$$

Démonstration. On a

$$\|Uv\|_2^2 = \sum_{i=1}^n (u_i v_i)^2 \leqslant \left(\sum_{u_i v_i < 0} u_i v_i \right)^2 + \left(\sum_{u_i v_i > 0} u_i v_i \right)^2,$$

parce que les doubles produits à droite sont tous positifs. La relation $u^\mathsf{T} v \geqslant 0$ s'écrit aussi $\sum_{u_i v_i < 0} |u_i v_i| \leqslant \sum_{u_i v_i > 0} u_i v_i$ et comme $\alpha\beta \leqslant (\alpha + \beta)^2/4$, on obtient

$$\|Uv\|_2^2 \leqslant 2 \left(\sum_{u_i v_i > 0} u_i v_i \right)^2 \leqslant \frac{1}{8} \left(\sum_{u_i v_i > 0} (u_i + v_i)^2 \right)^2 = \frac{1}{8} \|u + v\|_2^4.$$

□

16.3.2 Algorithme des petits déplacements

L'algorithme des petits pas est conceptuellement l'un des plus simples. Sa très faible complexité itérative est obtenue de la manière suivante (voir la figure 16.2). L'algorithme fait des déplacements de Newton complets, avec pas $\alpha = 1$, si bien

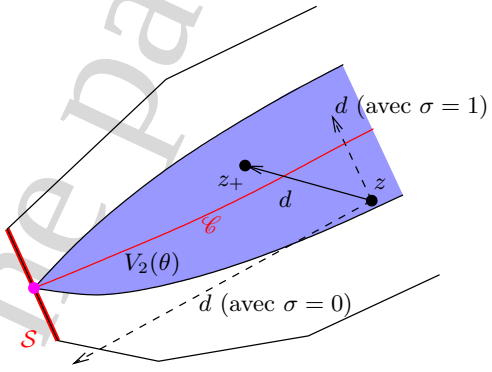
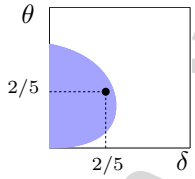


Fig. 16.2. Algorithme des petits déplacements

que $\bar\mu(z_+) = \sigma\bar\mu(z)$ (lemme 16.6). On ne peut pas alors prendre σ trop petit, sous peine de sortir de $\mathcal{F}^s$, comme lorsque $\sigma = 0$. En prenant $\sigma = 1 - \delta/n^{1/2}$ comme facteur de réduction de $\bar\mu$ ($\delta > 0$ étant une constante), on s'assure d'une part de rester dans un voisinage $V_2(\theta)$ (avec $\theta \in]0,1[$ fixé) et d'autre part d'une complexité en $O(n^{1/2}\log\varepsilon^{-1})$ (voir le lemme de complexité 16.5). Pour que les itérés restent dans le voisinage $V_2(\theta)$, une relation doit relier θ et δ, à savoir :

$$\frac{\delta^2+\theta^2}{(1-\delta)(1-\theta)\theta} \leqslant \sqrt{8}. \tag{16.21}$$



Elle est vérifiée pour (δ,θ) dans la zone représentée dans la figure ci-dessus, par exemple pour $\delta = \theta = 2/5$.

Algorithme 16.8 (PIL petits pas)

On se donne θ et δ vérifiant (16.21) et :
– un voisinage du chemin central $V_2(\theta)$,
– un facteur de réduction de $\bar\mu$: $\sigma = 1 - \delta/n^{1/2}$.
L'itéré courant z est supposé dans $V_2(\theta)$.
L'itéré suivant $z_+ \in V_2(\theta)$ s'obtient par les étapes suivantes.
1. Calcul de la direction de Newton d, solution de (16.18) avec $\mu = \sigma\bar\mu(z)$.
2. Nouvel itéré : $z_+ = z + d$.

L'analyse de cet algorithme commence par l'estimation de $\|dXds\|_2$ (lemme 16.9), suivie d'une estimation de $\bar\mu(z_+)$ (lemme 16.10). On peut alors conclure grâce au lemme de complexité.

Lemme 16.9 *Dans l'algorithme 16.8, on a*

$$\|dXds\|_2 \leqslant \frac{\theta^2 + n(1-\sigma)^2}{\sqrt{8}(1-\theta)}\,\bar\mu.$$

Démonstration. L'identité (16.20) et le lemme de Mizuno (qui s'applique car $(D^{-1}dx)^{\mathsf T}(Dds) = 0$) permettent d'écrire

$$\|dXds\|_2 = \|(D^{-1}dX)(Dds)\|_2 \leqslant \frac{1}{\sqrt{8}}\|(XS)^{-\frac12}(\sigma\bar\mu e - Xs)\|_2^2.$$

D'une part, lorsque $z \in V_2(\theta)$, on a $x_i s_i \geqslant (1-\theta)\bar\mu$. Dès lors

$$\|(XS)^{-\frac12}\|_2^2 = \frac{1}{\min_i x_i s_i} \leqslant \frac{1}{(1-\theta)\bar\mu}.$$

D'autre part, on écrit $\sigma\bar\mu e - Xs = (\bar\mu e - Xs) - (1-\sigma)\bar\mu e$ et on observe que $e^{\mathsf T}(\bar\mu e - Xs) = 0$. Dès lors, pour des $z \in V_2(\theta)$, on a

$$\|\sigma\bar{\mu}e - Xs\|_2^2 = \|\bar{\mu}e - Xs\|_2^2 + n(1-\sigma)^2\bar{\mu}^2 \leqslant \theta^2\bar{\mu}^2 + n(1-\sigma)^2\bar{\mu}^2.$$

En utilisant ces deux dernières majorations dans la première, on obtient le résultat. □

Lemme 16.10 *Si $\theta \in]0,1[$ et $\delta \in]0,1[$ vérifient (16.21), alors $z_+ \in V_2(\theta)$ et*

$$\bar{\mu}(z_+) = \left(1 - \frac{\delta}{n^{1/2}}\right)\bar{\mu}(z).$$

Démonstration. D'après le point (i) du lemme 16.6 et $\alpha = 1$, on a

$$\bar{\mu}(z_+) = \sigma\bar{\mu}.$$

En utilisant l'expression choisie pour σ, on en déduit la formule de $\bar{\mu}(z_+)$ de l'énoncé.

Il reste à montrer que $z_+ \in V_2(\theta)$. D'après le point (ii) du même lemme, le lemme précédent, on a pour tout $\alpha \in [0,1]$:

$$\begin{aligned}\gamma_2(z(\alpha)) &\leqslant (1-\alpha)\gamma_2(z) + \alpha^2\frac{\theta^2 + n(1-\sigma)^2}{\sqrt{8}(1-\theta)}\,\bar{\mu} \\ &\leqslant \theta\left(1 - \alpha + \alpha\frac{\theta^2 + n(1-\sigma)^2}{\sqrt{8}(1-\theta)\theta}\right)\bar{\mu}, \qquad (16.22)\end{aligned}$$

où on a utilisé le fait que $z \in V_2(\theta)$ et $\alpha \leqslant 1$. Dès lors, compte tenu du fait que $\bar{\mu}(z(\alpha)) = (1 - \alpha + \alpha\sigma)\bar{\mu}$ (voir le point (i) du lemme 16.6), on a

$$\gamma_2(z(\alpha)) \leqslant \theta\bar{\mu}(z(\alpha)), \quad \forall\alpha \in [0,1], \qquad (16.23)$$

si la fraction dans (16.22) est inférieure à σ. C'est ce qui impose à σ d'être une fonction de n. En prenant $\sigma = 1 - \delta/n^{1/2}$ comme dans l'algorithme, on voit qu'il faut que l'on ait

$$\frac{\theta^2 + \delta^2}{\sqrt{8}(1-\theta)\theta} \leqslant 1 - \frac{\delta}{n^{1/2}}.$$

Cette inégalité est la plus restrictive lorsque $n = 1$: c'est l'inégalité (16.21) qui est vérifiée. L'estimation (16.23) que nous venons de démontrer implique que $\gamma_2(z_+) \leqslant \theta\bar{\mu}(z_+)$ et que $x_i(\alpha)s_i(\alpha) > 0$ pour tout $\alpha \in [0,1]$. Donc les composantes de $x(\alpha)$ et $s(\alpha)$ ne peuvent s'annuler. Comme elles sont strictement positives en $\alpha = 0$, elles le reste en $\alpha = 1$. Dès lors $z_+ \in V_2(\theta)$. □

L'estimation obtenue dans le lemme précédent et le lemme de complexité 16.5 permettent d'obtenir facilement le résultat de convergence et de complexité itérative suivant.

Théorème 16.11 (convergence et complexité de l'algorithme des petits déplacements) *L'algorithme 16.8 converge ($\bar{\mu}_k \to 0$ q-linéairement) et pour tout $\varepsilon > 0$, il existe un indice $K = O(n^{1/2} \log \varepsilon^{-1})$ tel que $\bar{\mu}_k \leqslant \varepsilon \bar{\mu}_0$, dès que $k \geqslant K$.*

Même si la réduction du saut de dualité $\bar{\mu}_k$ par le facteur $1 - \delta/n^{1/2}$ assure à l'algorithme des petits déplacements la meilleure complexité itérative obtenue à ce jour, $\bar{\mu}_k$ tend vers zéro assez lentement lorsque n est grand. Par exemple, si on prend $\delta = 2/5$ et si $n = 10^4$, il faudra 575 itérations pour réduire le saut de dualité d'un facteur 10. C'est beaucoup. Cet algorithme n'est donc guère utilisé en pratique. Il nous a toutefois permis de présenter de manière concise un des meilleurs résultats de complexité que peuvent apporter les méthodes de points intérieurs en optimisation linéaire.

16.3.3 Algorithme des grands déplacements

On obtient de plus grands déplacements, et donc une efficacité numérique meilleure en pratique, en utilisant $V_\infty^-(\theta)$ comme voisinage du chemin central devant contrôler les itérés. La complexité itérative théorique est cependant moins bonne ; elle est en $O(n \log \varepsilon^{-1})$. Dans l'algorithme proposé ci-dessous, on prend un pas α le long de la direction de Newton le plus grand possible.

Algorithme 16.12 (PIL grands pas)

On se donne :
– un voisinage du chemin central $V_\infty^-(\theta)$, avec $\theta \in]0, 1[$,
– des bornes $0 < \sigma_{\min} < \sigma_{\max} < 1$ pour le facteur de réduction de $\bar{\mu}$.
L'itéré courant z est supposé dans $V_\infty^-(\theta)$.
L'itéré suivant $z_+ \in V_\infty^-(\theta)$ s'obtient par les étapes suivantes.

1. Choix de $\sigma \in [\sigma_{\min}, \sigma_{\max}]$.
2. Calcul de la direction de Newton d, solution de (16.18) avec $\mu = \sigma \bar{\mu}(z)$.
3. Calcul du pas α le plus grand possible dans $]0, 1]$ tel que $z + \alpha d \in V_\infty^-(\theta)$.
4. Nouvel itéré : $z_+ = z + \alpha d$.

Typiquement, on prend $\theta = 0.99$, ce qui permet à $V_\infty^-(\theta)$ d'occuper une grande partie de $\mathcal{F}^s$. L'étape 3 demande de calculer le plus grand pas α permettant à $z(\alpha) = z + \alpha d$ de rester dans $V_\infty^-(\theta)$. Il faut donc vérifier que $x_i(\alpha) s_i(\alpha) \geqslant (1-\theta)\bar{\mu}(z(\alpha))$ pour tout i. Comme $x_i(\alpha)$, $s_i(\alpha)$ et $\bar{\mu}(z(\alpha))$ dépendent linéairement de α (lemme 16.6), on voit que cela revient à trouver les racines de n fonctions quadratiques.

L'analyse de l'algorithme 16.12 commence par l'estimation de $\|dX ds\|_2$.

Lemme 16.13 *Dans l'algorithme 16.12, on a*

$$\|dX ds\|_2 \leqslant \frac{n(2-\theta)}{\sqrt{8}(1-\theta)} \bar{\mu}.$$

DÉMONSTRATION. Comme $(D^{-1}dx)^{\mathsf{T}}(Dds) = 0$, on peut appliquer le lemme de Mizuno sur l'identité (16.20). Cela donne

$$\|dXds\|_2 \leqslant \frac{1}{\sqrt{8}}\|(XS)^{-\frac{1}{2}}(\sigma\bar{\mu}e - Xs)\|_2^2.$$

Lorsque $z \in V_\infty^-(\theta)$, on a $x_i s_i \geqslant (1-\theta)\bar{\mu}$. Dès lors, en développant le carré

$$\begin{aligned}\|dXds\|_2 &\leqslant \frac{1}{\sqrt{8}}\|\sigma\bar{\mu}(XS)^{-\frac{1}{2}}e - (XS)^{\frac{1}{2}}e\|_2^2\\ &\leqslant \frac{1}{\sqrt{8}}\left(\sigma^2\bar{\mu}^2\frac{n}{(1-\theta)\bar{\mu}} - 2n\sigma\bar{\mu} + n\bar{\mu}\right)\\ &\leqslant \frac{1}{\sqrt{8}}\left(\frac{1}{(1-\theta)} + 1\right)n\bar{\mu},\end{aligned}$$

où on a majoré $\sigma^2 \leqslant 1$ et négligé $-2n\sigma\bar{\mu} \leqslant 0$. □

Lemme 16.14 *Dans l'algorithme 16.12, il existe une constante δ indépendante de n telle que*

$$\bar{\mu}(z_+) \leqslant \left(1 - \frac{\delta}{n}\right)\bar{\mu}(z).$$

DÉMONSTRATION. Il s'agit d'obtenir une borne inférieure sur le pas maximal α permettant de rester dans $V_\infty^-(\theta)$, qui soit en $O(n^{-1})$. Le résultat se trouve alors en appliquant le point (i) du lemme 16.6.

D'après le lemme précédent, il existe une constante $C_1 > 0$ indépendante de n telle $dx_i ds_i \geqslant -C_1 n\bar{\mu}$. En utilisant (16.19) comme dans le lemme 16.6, l'équation de Newton et $x_i s_i \geqslant (1-\theta)\bar{\mu}$ (car $z \in V_\infty^-(\theta)$), on trouve pour $t > 0$:

$$\begin{aligned}x_i(t)s_i(t) &= (1-t)x_i s_i + t\sigma\bar{\mu} + t^2 dx_i ds_i\\ &\geqslant (1-t)(1-\theta)\bar{\mu} + t\sigma\bar{\mu} - C_1 t^2 n\bar{\mu}.\end{aligned}$$

D'après le point (i) du lemme 16.6, $\bar{\mu}(z(t)) = (1-t+t\sigma)\bar{\mu}$. Alors l'inégalité ci-dessus montre que l'on aura $x_i(t)s_i(t) \geqslant (1-\theta)\bar{\mu}(z(t)) \equiv (1-\theta)(1-t+t\sigma)\bar{\mu}$ et $x_i(t)s_i(t) > 0$ si

$$t \leqslant \frac{\theta\sigma}{C_1 n} \quad \text{et} \quad t < \frac{1}{1-\sigma}.$$

Comme α est le plus grand $t > 0$ tel que $x_i(t)s_i(t) \geqslant (1-\theta)\bar{\mu}(z(t))$, $x_i(t) > 0$ et $s_i(t) > 0$, pour tout i, on a

$$\alpha \geqslant \min\left(\frac{\theta\sigma}{C_1 n}, \frac{1}{2(1-\sigma)}\right).$$

On note à présent qu'avec les bornes encadrant $\sigma \in [\sigma_{\min}, \sigma_{\max}]$, on a $\sigma(1-\sigma) \geqslant C_2$, une constante strictement positive indépendante de n. Dès lors, la formule de $\bar{\mu}(z(\alpha))$ du lemme 16.6, conduit à l'estimation cherchée :

$$\bar{\mu}(z(\alpha)) = [1 - \alpha(1-\sigma)]\bar{\mu} \leqslant \left(1 - \frac{\delta}{n}\right)\bar{\mu},$$

où $\delta = \min(\theta C_2/C_1, 1/2)$. □

On peut maintenant conclure aisément en appliquant le lemme de complexité 16.5.

Théorème 16.15 (convergence et complexité de l'algorithme des grands déplacements) *L'algorithme 16.12 converge ($\bar{\mu}_k \to 0$ q-linéairement) et pour tout $\varepsilon > 0$, il existe un indice $K = O(n \log \varepsilon^{-1})$ tel que $\bar{\mu}_k \leqslant \varepsilon \bar{\mu}_0$, dès que $k \geqslant K$.*

16.3.4 Un algorithme prédicteur-correcteur

Les algorithmes précédents souffrent du fait que le facteur de réduction σ du saut de dualité est imposé (il vaut $1 - \delta/n^{1/2}$ dans l'algorithme des petits déplacements) ou minoré (par $\sigma_{\min}$ dans l'algorithme des grands déplacements) a priori. Il semble en effet préférable de laisser l'algorithme choisir lui-même une réduction maximale de $\bar{\mu}(z)$. C'est ce qui motive l'algorithme prédicteur-correcteur, que nous présentons dans cette section.

Cet algorithme doit son nom au fait qu'il alterne des *phases de prédiction* et des *phases de correction* (voir la figure 16.3). La phase de prédiction en $z \in \mathcal{F}^s$ a pour

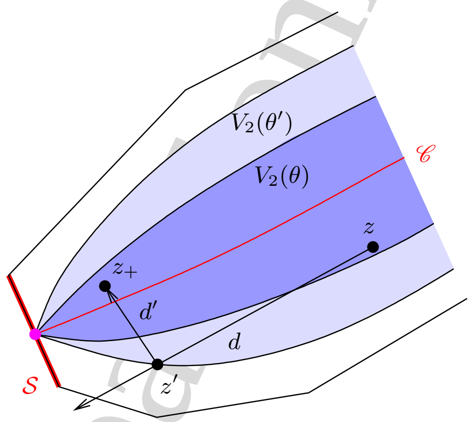


Fig. 16.3. Un algorithme prédicteur-correcteur

but de faire décroître le saut de dualité $\bar{\mu}$ le plus possible, ce qui s'obtient en suivant la direction de Newton d avec $\sigma = 0$ (voir la proposition 16.6 (i)) et en prenant le plus grand pas $\alpha > 0$ le long de cette direction, de manière toutefois à ce que $z' = z + \alpha d$ reste dans un voisinage $V_2(\theta')$ (avec un pas unité, z' serait vraisemblablement en dehors de l'ensemble admissible). Le point z' ne peut être le nouvel itéré car une direction de prédiction en ce point aurait de grande chance de sortir immédiatement de $V_2(\theta')$. L'étape de correction a donc pour but de revenir dans un voisinage du chemin central $V_2(\theta)$ plus petit (avec $0 < \theta < \theta' < 1$). Ce recentrage se fait par un

pas unité le long de la direction de Newton d' avec $\sigma = 1$, donc sans modification du saut de dualité. Il faut que θ et θ' vérifient les inégalités

$$0 < \theta < \theta' < 1 \quad \text{et} \quad \frac{(\theta')^2}{1-\theta'} \leqslant \sqrt{8}\theta, \tag{16.24}$$

pour que le pas unité le long de d' conduise en un point z_+ dans $V_2(\theta)$. Les valeurs $\theta = \frac{1}{4}$ et $\theta' = \frac{1}{2}$ conviennent. On considère qu'une itération est formée d'une phase de prédiction suivie d'une phase de correction.

Algorithme 16.16 (PIL prédicteur-correcteur)

On considère deux voisinages $V_2(\theta)$ et $V_2(\theta')$, avec θ et θ' vérifiant (16.24).
On suppose que l'itéré courant $z := (x, y, s) \in V_2(\theta)$.
L'itéré suivant $z_+ \in V_2(\theta)$ s'obtient par les étapes suivantes.

1. *Phase de prédiction* :
   - 1.1. Calcul du déplacement de Newton d, solution de (16.18) avec $\mu = 0$.
   - 1.2. Calcul d'un pas α le plus grand possible dans $]0, 1]$ tel que $z + \alpha d \in V_2(\theta')$.
   - 1.3. Itéré intermédiaire : $z' = z + \alpha d$.
2. *Phase de correction* :
   - 2.1. Calcul du déplacement de Newton d', solution de (16.18) en $z = z'$, avec $\mu = \bar{\mu}' := \bar{\mu}(z')$.
   - 2.2. Nouvel itéré : $z_+ = z' + d'$ (pas unité).

L'étape 1.2 demande de calculer le plus grand pas α permettant à $z(\alpha) = z + \alpha d$ de rester dans $V_2(\theta')$. Il faut donc vérifier que $\|X(\alpha)s(\alpha) - \bar{\mu}(z(\alpha))e\|_2^2 = (\theta')^2\bar{\mu}(z(\alpha))^2$. Comme $x(\alpha)$, $s(\alpha)$ et $\bar{\mu}(z(\alpha))$ dépendent linéairement de α (lemme 16.6), on voit que cela revient à trouver la racine maximale d'un polynôme quartique (d'ordre 4).

Nous analysons dans les deux lemmes suivants les phases de prédiction et de correction, avant de conclure par un résultat de convergence et de complexité. Dans la phase de prédiction la décroissance du saut de dualité se fait par un facteur semblable à celui de l'algorithme des petits déplacements, mais cette fois l'algorithme a la possibilité de faire décroître $\bar{\mu}$ plus rapidement.

Lemme 16.17 (phase de prédiction) *Si $0 < \theta < \theta' < 1$, il existe une constante $\delta > 0$ indépendante de n telle que, lorsque $z \in V_2(\theta)$, la phase de prédiction conduit à un point $z' \in V_2(\theta')$ avec*

$$\bar{\mu}' \leqslant \left(1 - \frac{\delta}{n^{1/2}}\right)\bar{\mu}.$$

Démonstration. On cherche à estimer le pas maximal α tel que $z + \alpha d$ reste dans $V_2(\theta')$. Ceci se fait en contrôlant l'évolution du centrage le long de d.

On applique le lemme de Mizuno en considérant (16.20) avec $\sigma = 0$, ce qui est licite car $(D^{-1}dx)^{\mathsf{T}}(Dds) = 0$. On a

$$\|dXds\|_2 = \|(D^{-1}dX)(Dds)\|_2 \leqslant \frac{1}{\sqrt{8}}\|(XS)^{-\frac{1}{2}}Xs\|_2^2 = \frac{n}{\sqrt{8}}\bar{\mu}.$$

Alors le point (ii) du lemme 16.6 donne pour $z \in V_2(\theta)$ et $z(t) := z + td$:

$$\gamma_2(z(t)) \leqslant \left[(1-t)\theta + t^2\frac{n}{\sqrt{8}}\right]\bar{\mu}.$$

D'après le point (i) du lemme 16.6, $\bar{\mu}(z(t)) = (1-t)\bar{\mu} > 0$, si $t < 1$. Dès lors $z(t)$ sera certainement dans $V_2(\theta')$ si $t < 1$ et si le membre de droite ci-dessus est inférieur à $\theta'\bar{\mu}(z(t)) = \theta'(1-t)\bar{\mu}$, ce qui s'écrit encore

$$\frac{n}{\sqrt{8}}t^2 \leqslant (\theta' - \theta)(1-t).$$

Cette inégalité est vérifiée pour tout $t \in [0, \delta/\sqrt{n}]$, où $\delta > 0$ est fixé indépendamment de n par :

$$\frac{\delta^2}{\sqrt{8}} \leqslant (\theta' - \theta)(1-\delta).$$

Il suffit en effet d'observer que pour $t \in [0, \delta/\sqrt{n}]$, on a $nt^2 \leqslant \delta^2$ et $1 - \delta \leqslant 1 - \delta/\sqrt{n} \leqslant 1 - t$. Comme la phase de prédiction détermine le plus grand pas α tel que $z(\alpha) \in V_2(\theta')$, ce pas vérifie $\alpha \geqslant \delta/\sqrt{n}$. Dès lors

$$\bar{\mu}(z(\alpha)) = (1-\alpha)\bar{\mu} \leqslant \left(1 - \frac{\delta}{n^{1/2}}\right)\bar{\mu}.$$

□

Lemme 16.18 (phase de correction) *Si θ et θ' vérifient (16.24) et si $z' \in V_2(\theta')$, alors la phase de correction donne un point $z_+ \in V_2(\theta)$ tel que $\bar{\mu}_+ = \bar{\mu}'$.*

Démonstration. Le point (i) du lemme 16.6 et $\sigma = 1$ montrent immédiatement que $\bar{\mu}_+ = \bar{\mu}'$. Il reste à montrer que $z_+ \in V_2(\theta)$.

D'après le lemme de Mizuno et (16.20) avec $\mu = \bar{\mu}$, la direction de Newton $d' = (dx', dy', ds')$ calculée en z' vérifie

$$\|dX'ds'\|_2 \leqslant \frac{1}{\sqrt{8}}\|(X'S')^{-\frac{1}{2}}(\bar{\mu}'e - X's')\|_2^2 = \frac{1}{\sqrt{8}}\sum_{i=1}^{n}\frac{(x_i's_i' - \bar{\mu}')^2}{x_i's_i'}.$$

Puisque $z' \in V_2(\theta')$, on a pour tout i : $\|X's' - \bar{\mu}'e\|_2 \leqslant \theta'\bar{\mu}'$, donc $x_i's_i' \geqslant (1-\theta')\bar{\mu}'$, si bien que

$$\|dX'ds'\|_2 \leqslant \frac{1}{\sqrt{8}(1-\theta')\bar{\mu}'}\|X's' - \bar{\mu}'e\|_2^2 \leqslant \frac{(\theta')^2}{\sqrt{8}(1-\theta')}\bar{\mu}'.$$

Le point (ii) du lemme 16.6 avec $\alpha = 1$ et (16.24) donnent

$$\|X_+s_+ - \bar{\mu}_+e\|_2 \leqslant \frac{(\theta')^2}{\sqrt{8}(1-\theta')}\bar{\mu}_+ \leqslant \theta\bar{\mu}_+.$$

Pour conclure que $z_+ \in V_2(\theta)$, il reste à montrer que $x_+ > 0$, $s_+ > 0$, mais ceci se déduit du fait aisément démontrable que $z' + td' \in V_2(\theta')$ pour tout $t \in [0,1]$. □

Théorème 16.19 (convergence et complexité de l'algorithme prédicteur-correcteur) *L'algorithme prédicteur-correcteur 16.16 converge* ($\bar\mu_k \to 0$ *q-linéairement*) *et pour tout* $\varepsilon > 0$, *il existe un indice* $K = O(n^{1/2}\log\varepsilon^{-1})$ *tel que* $\bar\mu_k \leqslant \varepsilon\bar\mu_0$, *dès que* $k \geqslant K$.

Démonstration. D'après les lemmes 16.17 et 16.18, on a

$$\bar\mu_{k+1} \leqslant \left(1 - \frac{\delta}{n^{1/2}}\right)\bar\mu_k.$$

On utilise alors le lemme de complexité 16.5. □

En pratique, le pas $\alpha > 0$ le long de la direction de prédiction est souvent proche de 1, si bien que l'algorithme converge souvent très rapidement. On peut d'ailleurs montrer que la convergence de $\bar\mu_k \to 0$ est superlinéaire. Malgré cela, l'algorithme peut être gêné par le petitesse du voisinage $V_2(\theta)$, surtout dans les premières itérations.

16.4 Un algorithme sans admissibilité forcée

On ne dispose pas toujours d'un itéré primal-dual strictement admissible. Parfois même il n'y en a pas, alors que le problème est parfaitement bien posé. Cette situation se rencontre, par exemple, si l'on transforme un problème d'optimisation linéaire de la forme $\inf\{c^\mathsf{T}x : Ax \leqslant b\}$ sous la forme standard : $\inf\{c^\mathsf{T}u - c^\mathsf{T}v : Au - Av + z = b, (u,v,z) \geqslant 0\}$, où z est un vecteur de variables d'écart et $u - v$ joue le rôle de x. Dans ce cas, les contraintes du problème dual s'écrivent : $A^\mathsf{T}y + s^1 = c$, $-A^\mathsf{T}y + s^2 = -c$, $y + s^3 = 0$ et $(s^1, s^2, s^3) \geqslant 0$. En sommant les deux premières contraintes, on voit que s^1 et s^2 sont nuls : il n'y a pas de point strictement admissible pour le dual. Il est donc intéressant de développer des algorithmes dans lesquels les itérés ne vérifient pas les contraintes linéaires de (16.1).

Dans les algorithmes n'obligeant pas les itérés à rester dans $\mathcal{F}^s$, quoique maintenant $x > 0$ et $s > 0$ (c'est leur aspect « points intérieurs »), il y a deux objectifs à réaliser : annuler les résidus $(r_b, r_c) = (Ax - b, A^\mathsf{T}y + s - c)$ et le saut de dualité $\bar\mu = x^\mathsf{T}s/n$. Ces algorithmes opèrent comme précédemment, en faisant des déplacements le long de la direction de Newton d, solution de (16.34).

On s'est longtemps demandé si l'on pourrait un jour trouver des algorithmes polynomiaux dans lesquels les itérés ne sont pas admissibles. Une façon d'y arriver est de ne pas faire décroître le saut de dualité plus vite que l'admissibilité. La possibilité de réaliser ce principe est fondé sur les observations de l'évolution des résidus et du saut de dualité le long de la direction de Newton, disons en $z + \alpha d$, $\alpha \geqslant 0$, alors que le point courant z n'annule pas les résidus. On note

$$r(z) := (r_b(z), r_c(z)) = (Ax - b, A^\mathsf{T}y + s - c).$$

On vérifie facilement que les résidus varient de façon affine :

$$r(z + \alpha d) = (1 - \alpha)r(z).$$

De même pour les normes, pour autant que $\alpha \leqslant 1$:

$$\|r(z+\alpha d)\|_2 = (1-\alpha)\|r(z)\|_2. \tag{16.25}$$

Le saut de dualité évolue quant à lui de façon non linéaire. En utilisant la troisième équation de (16.34), on a $s^{\mathsf{T}}dx + x^{\mathsf{T}}ds = n\mu - x^{\mathsf{T}}s = n(\mu - \bar{\mu})$ et donc

$$\bar{\mu}(z+\alpha d) = \frac{1}{n}(x+\alpha dx)^{\mathsf{T}}(s+\alpha ds) = \bar{\mu} + \alpha(\mu-\bar{\mu}) + \frac{\alpha^2}{n}dx^{\mathsf{T}}ds.$$

Sans admissibilité, on n'a plus $dx^{\mathsf{T}}ds = 0$, si bien que la décroissance de $\bar{\mu}(z(\alpha))$ pour de petit pas $\alpha > 0$ n'est assurée que si on prend $\mu < \bar{\mu}$ (on n'est pas maître du signe de $dx^{\mathsf{T}}ds$) et on se fera à l'idée de prendre comme précédemment

$$\mu = \sigma\bar{\mu}, \quad \text{avec un } \sigma \in]0,1[.$$

On verra par la suite qu'il faut être plus contraignant sur la valeur de σ. On a alors

$$\bar{\mu}(z+\alpha d) = (1-\alpha)\bar{\mu} + \alpha\sigma\bar{\mu} + \frac{\alpha^2}{n}dx^{\mathsf{T}}ds. \tag{16.26}$$

On en déduit que

$$\bar{\mu}(z+\alpha d) \geqslant (1-\alpha)\bar{\mu}, \quad \text{pour } \alpha > 0 \text{ petit.} \tag{16.27}$$

En comparant (16.25) et (16.27), on voit que si $\|r\|_2 \leqslant \rho\bar{\mu}$ à l'itéré courant (pour une constante $\rho > 0$), on a pour $\alpha > 0$ petit :

$$\|r(z+\alpha d)\|_2 \leqslant (1-\alpha)\rho\bar{\mu} \leqslant \rho\bar{\mu}(z+\alpha d).$$

L'inégalité $\|r\|_2 \leqslant \rho\bar{\mu}$ est donc conservée à l'itération suivante. Autrement dit, de petits pas le long de la direction de Newton maintiennent les itérés dans le voisinage du chemin central suivant :

$$V_\infty^- \equiv V_\infty^-(\theta,\rho) := \{z := (x,y,s) : (x,s) > 0,\ \|r(z)\|_2 \leqslant \rho\bar{\mu}(z),\ Xs \geqslant (1-\theta)\bar{\mu}(z)e\}.$$

On prend $\theta \in]0,1[$ et de manière à ce que le premier itéré soit dans ce voisinage, on prend

$$\rho = \rho' \frac{\|r^0\|_2}{\bar{\mu}_0}, \quad \text{avec } \rho' \geqslant 1. \tag{16.28}$$

Ce voisinage diffère de $V_\infty^-(\theta)$ par le fait que le résidu $r = (r_b, r_c)$ ne doit pas nécessairement être nul.

Nous donnons ci-dessous une itération d'un algorithme de suivi de chemin fondé sur les observations précédentes. Il ne demande donc pas d'avoir un premier itéré admissible et permet de faire de grands déplacements via l'utilisation du voisinage V_∞^-. L'algorithme est très simple. À chaque itération, on fait un pas $\alpha > 0$ le long de la direction de Newton d, de manière à rester dans V_∞^-, tout en faisant décroître le saut de dualité $\bar{\mu}$. Une recherche linéaire sur $\alpha \mapsto \bar{\mu}(z+\alpha d)$ assure la décroissance du saut de dualité et du même coup celle des résidus (puisque les itérés restent dans V_∞^-). Cette stratégie est possible car, comme nous l'avons montré ci-dessus, la direction de Newton rentre dans V_∞^- et est une direction de descente de $\bar{\mu}$.

Algorithme 16.20 (PIL sans admissibilité)

On se donne des constantes :
– $\omega \in]0,1[$ est utilisé dans la recherche linéaire sur $\bar{\mu}(\cdot)$,
– $\sigma \in]0, 1-\omega[$ est le facteur de réduction de $\bar{\mu}$ dans le système de newton,
– $\theta \in]0,1[$ et ρ vérifiant (16.28) définissent le voisinage $V_\infty^-(\theta,\rho)$.
On suppose que l'itéré courant $z \in V_\infty^-(\theta,\rho)$.
L'itéré suivant $z_+ \in V_\infty^-(\theta,\rho)$ s'obtient par les étapes suivantes.

1. *Direction de Newton.* Calcul de la direction de Newton $d = (dx, dy, ds)$, solution de (16.34), avec $\mu = \sigma\bar{\mu}(z)$.
2. *Recherche linéaire.* Prendre un pas α le plus grand possible dans $]0,1]$ tel que $z + \alpha d \in V_\infty^-(\theta,\rho)$ et
$$\bar{\mu}(z+\alpha d) \leqslant (1-\omega\alpha)\bar{\mu}(z). \tag{16.29}$$
3. *Nouvel itéré.* $z^+ := z + \alpha d$.

Les valeurs typiques des constantes sont

$$\omega = 10^{-2}, \quad \sigma = 0.25 \quad \text{et} \quad \theta = 0.99.$$

On note z^k les itérés, α_k le pas pris à l'étape 2, $r_b^k := Ax^k - b$, $r_c^k := A^\mathsf{T} y^k + s^k - c$, $r^k := (r_b^k, r_c^k)$, $\bar{\mu}_k := \bar{\mu}(z^k)$ et

$$D_k := X_k^{1/2} S_k^{-1/2}.$$

On simplifiera $\bar{\mu}(z^k + \alpha d^k)$ en $\bar{\mu}_k(\alpha)$ sans que cela ne porte à confusion (la dimension de l'argument change).

La preuve de convergence vise essentiellement à montrer que le pas α_k pris à l'étape 2 de l'algorithme est borné inférieurement par une constante $\bar{\alpha} > 0$. Dans ce cas, grâce à (16.29), $\bar{\mu}_{k+1} \leqslant (1-\omega\bar{\alpha})\bar{\mu}_k$, ce qui montre la convergence q-linéaire de $\bar{\mu}_k$. De même, en utilisant (16.25), on a $\|r^{k+1}\|_2 \leqslant (1-\bar{\alpha})\|r^k\|_2$, si bien que la convergence q-linéaire des résidus sera aussi une conséquence immédiate de l'estimation $\alpha_k \geqslant \bar{\alpha}$.

La convergence de cet algorithme s'obtient sans hypothèse supplémentaire, mais on n'a pu démontrer sa polynomialité qu'en supposant z^0 de la forme

$$z^0 = (\zeta_0 e, 0, \zeta_0 e), \quad \text{avec un scalaire } \zeta_0 \geqslant \|(x^*, s^*)\|_\infty, \tag{16.30}$$

où z^* est une solution primale-duale arbitraire [552]. Évidemment, en pratique, on ne peut pas réaliser (16.30) car on ne connaît pas de solution primale-duale, mais on a observé que l'algorithme est plus rapide si l'itéré initial est bien centré ($X^0 s^0 = \zeta_0^2 e$ sous l'hypothèse (16.30)) avec un rapport $\|r^0\|_2/\bar{\mu}_0$ petit (il est de l'ordre $1/\zeta_0$ sous l'hypothèse (16.30)). En pratique, on prend donc $z^0 = (\zeta_0 e, 0, \zeta_0 e)$, avec ζ_0 « grand ».

La formule (16.26) montre que nous avons besoin d'une estimation de $|(dx^k)^\mathsf{T}(ds^k)|$. Celle-ci découlera des estimations de $D_k^{-1} dx^k$ et $D_k ds^k$ données dans le lemme très technique suivant.

Lemme 16.21 *Il existe une constante $C_1 > 0$ telle que pour tout $k \geqslant 0$:*

$$\|D_k^{-1} dx^k\|_2 \leqslant C_1 \bar{\mu}_k^{1/2} \quad et \quad \|D_k ds^k\|_2 \leqslant C_1 \bar{\mu}_k^{1/2}.$$

Si z^0 vérifie (16.30), alors $C_1 = \frac{9\rho'}{(1-\theta)^{1/2}} n$ est indépendante de ζ_0.

Démonstration. D'après (16.25) et par récurrence, on a

$$r^k = \beta_k r^0, \quad \text{où} \quad \beta_k := \prod_{i=0}^{k-1} (1 - \alpha_k). \tag{16.31}$$

Première étape : *il existe une constante C_1' $(= 4\rho' n/\zeta_0$ si (16.30) a lieu) telle que*

$$\beta_k \|(x^k, s^k)\|_1 \leqslant C_1' \bar{\mu}_k. \tag{16.32}$$

Soit z^* une solution du problème (P). On introduit

$$\bar{z} := \beta_k z^0 + (1 - \beta_k) z^* - z^k.$$

On voit facilement que $A\bar{x} = 0$ et $A^T \bar{y} + \bar{s} = 0$, si bien que $\bar{x}^T \bar{s} = 0$, ce que l'on exploite :

$$\begin{aligned} 0 &= \left(\beta_k x^0 + (1-\beta_k) x^* - x^k\right)^T \left(\beta_k s^0 + (1-\beta_k) s^* - s^k\right) \\ &= \beta_k^2 (x^0)^T s^0 + (1-\beta_k)^2 (x^*)^T s^* + (x^k)^T s^k \\ &\quad + \beta_k (1-\beta_k) \left[(x^0)^T s^* + (x^*)^T s^0\right] - \beta_k \left[(x^0)^T s^k + (x^k)^T s^0\right] \\ &\quad - (1-\beta_k) \left[(x^*)^T s^k + (x^k)^T s^*\right]. \end{aligned}$$

La majoration que l'on cherche vient de l'avant dernier terme que l'on fait passer dans le membre de gauche. D'autre part, le dernier terme est négatif ($(x^*, s^*, x^k, s^k) \geqslant 0$ et $\beta_k \leqslant 1$) et on le néglige, $(x^0)^T s^0 = n\bar{\mu}_0$, $(x^*)^T s^* = 0$ par optimalité, $(x^k)^T s^k = n\bar{\mu}_k$, $(x^0)^T s^* \leqslant \|x^0\|_\infty \|s^*\|_1$ et $(x^*)^T s^0 \leqslant \|s^0\|_\infty \|x^*\|_1$. Cela donne

$$\beta_k \left[(x^0)^T s^k + (x^k)^T s^0\right] \leqslant n\beta_k^2 \bar{\mu}_0 + n\bar{\mu}_k + \beta_k (1-\beta_k) \|(x^0, s^0)\|_\infty \|(x^*, s^*)\|_1.$$

Ensuite, le membre de gauche est minoré par $\beta_k \xi_0 \|(x^k, s^k)\|_1$, où

$$\xi_0 := \min_{1 \leqslant i \leqslant n} \min\{x_i^0, s_i^0\}.$$

On obtient aussi un facteur commun $\bar{\mu}_k$ à tous les termes à droite, car, d'après (16.31) et l'appartenance de $z^k \in V_\infty^-$, on a $\beta_k = \|r_k\|_2 / \|r^0\|_2 \leqslant \rho\bar{\mu}_k / \|r^0\|_2$. En utilisant également $0 \leqslant \beta_k \leqslant 1$, on obtient finalement l'inégalité

$$\beta_k \xi_0 \|(x^k, s^k)\|_1 \leqslant n \frac{\rho\bar{\mu}_0}{\|r^0\|_2} \bar{\mu}_k + n\bar{\mu}_k + \frac{\rho}{\|r^0\|_2} \bar{\mu}_k \|(x^0, s^0)\|_\infty \|(x^*, s^*)\|_1,$$

qui est bien de la forme (16.32).

Supposons à présent que z^0 vérifie (16.30). On note

$$\rho' := \frac{\rho\bar{\mu}_0}{\|r^0\|_2},$$

qui est $\geqslant 1$ et peut être considéré comme une constante ne dépendant pas de l'itéré initial. D'autre part, en utilisant (16.30) : $\xi_0 = \zeta_0$, $\bar{\mu}_0 = \zeta_0^2$, $\|(x^0, s^0)\|_\infty = \zeta_0$ et $\|(x^*, s^*)\|_1 \leqslant 2n\|(x^*, s^*)\|_\infty \leqslant 2n\zeta_0$. Dès lors, l'inégalité précédente devient

$$\beta_k\zeta_0\|(x^k, s^k)\|_1 \leqslant n\rho'\bar{\mu}_k + n\bar{\mu}_k + 2n\rho'\bar{\mu}_k \leqslant 4n\rho'\bar{\mu}_k.$$

Ce qui montre que l'on peut prendre $C_1 = 4\rho' n/\zeta_0$.

Deuxième étape : *démonstration du lemme*. Comme dans la première partie on construit deux vecteurs orthogonaux, ici formés à partir de dx^k et ds^k. Dans ce but, on introduit $\bar{d} = (\bar{dx}, \bar{dy}, \bar{ds})$ défini par

$$\bar{d} := d^k + \beta_k(z^0 - z^*),$$

où z^* est une solution du problème (P). On vérifie facilement que $A\bar{dx} = 0$ et $A^{\mathsf{T}}\bar{dy} + \bar{ds} = 0$, si bien que $\bar{dx}^{\mathsf{T}}\bar{ds} = 0$, ce que l'on va exploiter.

Auparavant, observons que par la troisième équation du système de (16.34)

$$\begin{aligned} &S_k\left(dx^k + \beta_k(x^0 - x^*)\right) + X_k\left(ds^k + \beta_k(s^0 - s^*)\right) \\ &\quad = \quad -(X_kS_ke - \sigma\bar{\mu}_ke) + \beta_kS_k(x^0 - x^*) + \beta_kX_k(s^0 - s^*). \end{aligned}$$

Après multiplication par $(X_kS_k)^{-1/2}$, on a

$$\begin{aligned} &D_k^{-1}\left(dx^k + \beta_k(x^0 - x^*)\right) + D_k\left(ds^k + \beta_k(s^0 - s^*)\right) \\ &\quad = \quad -(X_kS_k)^{-1/2}(X_kS_ke - \sigma\bar{\mu}_ke) + \beta_kD_k^{-1}(x^0 - x^*) + \beta_kD_k(s^0 - s^*). \end{aligned}$$

On utilise maintenant le fait démontré ci-dessus, que les deux premiers termes sont orthogonaux. En prenant la norme au carré, on obtient

$$\begin{aligned} &\|D_k^{-1}(dx^k + \beta_k(x^0 - x^*))\|_2^2 + \|D_k(ds^k + \beta_k(s^0 - s^*))\|_2^2 \\ &\quad \leqslant \quad \Big(\|(X_kS_k)^{-1/2}(X_kS_ke - \sigma\bar{\mu}_ke)\|_2 + \beta_k\|D_k^{-1}(x^0 - x^*)\|_2 + \beta_k\|D_k(s^0 - s^*)\|_2\Big)^2. \end{aligned}$$

On traite maintenant séparément les deux termes du membre de gauche en utilisant l'inégalité triangulaire :

$$\begin{aligned} &\|D_k^{-1}dx^k\|_2 \text{ et } \|D_kds^k\|_2 \\ &\quad \leqslant \quad \|(X_kS_k)^{-1/2}(X_kS_ke - \sigma\bar{\mu}_ke)\|_2 + 2\beta_k\|D_k^{-1}(x^0 - x^*)\|_2 + 2\beta_k\|D_k(s^0 - s^*)\|_2. \end{aligned}$$

Il reste à montrer que chaque terme du membre de droite de cette inégalité est en $O(\bar{\mu}_k^{1/2})$.

Pour le premier terme, on a en utilisant l'appartenance de z^k à $V_\infty^-(\theta, \rho)$:

$$\|(X_kS_k)^{-1/2}\|_2 = \max_{1\leqslant i\leqslant n}\frac{1}{(x_i^ks_i^k)^{1/2}} \leqslant \frac{1}{(1-\theta)^{1/2}\bar{\mu}_k^{1/2}}$$

D'autre part, comme $\sigma < 1$ et $(x^k)^{\mathsf{T}}s^k = n\bar{\mu}_k$:

$$\|X_kS_ke - \sigma\bar{\mu}_ke\|_2^2 = \|X_kS_ke\|_2^2 - 2\sigma\bar{\mu}_k(x^k)^{\mathsf{T}}s^k + n\sigma^2\bar{\mu}_k^2 \leqslant \|X_kS_ke\|_1^2 = n^2\bar{\mu}_k^2.$$

Le premier terme est donc majoré par $(1-\theta)^{-1/2}n\bar{\mu}_k^{1/2}$.

Pour le second terme, on observe d'abord que

$$\|D_k^{-1}\|_2 = \max_{1\leqslant i\leqslant n} \frac{s_i^k}{(x_i^k s_i^k)^{1/2}} \leqslant \frac{\|s^k\|_\infty}{(1-\theta)^{1/2}\bar\mu_k^{1/2}} \leqslant \frac{\|s^k\|_1}{(1-\theta)^{1/2}\bar\mu_k^{1/2}}.$$

En utilisant alors le résultat (16.32) de la première partie de la démonstration, on a

$$\beta_k\|D_k^{-1}(x^0-x^*)\|_2 \leqslant \frac{\beta_k\|s^k\|_1}{(1-\theta)^{1/2}\bar\mu_k^{1/2}}\,\|x^0-x^*\|_2 \leqslant \frac{C_1'}{(1-\theta)^{1/2}}\,\bar\mu_k^{1/2}\|x^0-x^*\|_2,$$

qui est bien un majorant en $O(\bar\mu_k^{1/2})$. On s'y prend de la même manière pour le troisième terme, avec la majoration $\|D_k\|_2 \leqslant \|x^k\|_1\bar\mu_k^{1/2}/(1-\theta)^{1/2}$.

Enfin, si z^0 vérifie (16.30), on s'y prend différemment pour majorer les deux derniers termes. Dans ce cas, on a

$$0 \leqslant x^0 - x^* \leqslant \zeta_0 \quad \text{et} \quad 0 \leqslant s^0 - s^* \leqslant \zeta_0.$$

On en déduit, avec (16.32), que

$$\begin{aligned}
&\beta_k\|D_k^{-1}(x^0-x^*)\|_2 + \beta_k\|D_k(s^0-s^*)\|_2\\
&\quad\leqslant\ \beta_k\zeta_0\left(\|D_k^{-1}e\|_2 + \|D_k e\|_2\right)\\
&\quad=\ \beta_k\zeta_0\left(\|(X_kS_k)^{-1/2}s^k\|_2 + \|(X_kS_k)^{-1/2}x^k\|_2\right)\\
&\quad\leqslant\ \zeta_0\|(X_kS_k)^{-1/2}\|_2(\beta_k\|(x^k,s^k)\|_1)\\
&\quad\leqslant\ \frac{\zeta_0}{(1-\theta)^{1/2}\bar\mu_k^{1/2}}\,\frac{4\rho' n}{\zeta_0}\,\bar\mu_k\\
&\quad=\ \frac{4\rho'}{(1-\theta)^{1/2}}\,n\bar\mu_k^{1/2}.
\end{aligned}$$

Dès lors la constante C_1 peut être prise comme suit

$$\frac{1}{(1-\theta)^{1/2}}\,n + \frac{8\rho'}{(1-\theta)^{1/2}}\,n \leqslant \frac{9\rho'}{(1-\theta)^{1/2}}\,n =: C_1.$$

□

Lemme 16.22 *Il existe une constante $\bar\alpha \in]0,1]$, telle que pour tout $\alpha \in [0,\bar\alpha]$, on a*

$$(1-\alpha)\bar\mu_k \leqslant \bar\mu(z^k+\alpha d^k) \leqslant (1-\omega\alpha)\bar\mu_k$$
$$(x_i^k+\alpha dx_i^k)(s_i^k+\alpha ds_i^k) \geqslant (1-\theta)\bar\mu(z^k+\alpha d^k).$$

Si z^0 vérifie (16.30), alors il existe une constante $C_2 > 0$ indépendante de n telle que $\bar\alpha \geqslant C_2 n^{-2}$.

Démonstration. On laisse tomber l'indice k. Avec la constante C_1 donnée par le lemme 16.21 et l'inégalité de Cauchy-Schwarz, on a $dx^{\mathsf T}ds \geqslant -C_1^2\bar\mu$. Alors (16.26) conduit à

$$\bar\mu(z+\alpha d) \geqslant (1-\alpha)\bar\mu + \alpha\bar\mu\left(\sigma - \frac{\alpha C_1^2}{n}\right) \geqslant (1-\alpha)\bar\mu,$$

dès que

$$\alpha \leqslant \bar{\alpha}_a := \frac{n\sigma}{C_1^2}.$$

En majorant cette fois $dx^{\mathsf{T}} dx \leqslant C_1^2 \bar{\mu}$, on obtient de (16.26)

$$\begin{aligned} \bar{\mu}(z(\alpha)) &\leqslant \bar{\mu} - \alpha\bar{\mu} + \alpha\sigma\bar{\mu} + \frac{\alpha^2 C_1^2}{n}\bar{\mu} \\ &\leqslant \bar{\mu} - \omega\alpha\bar{\mu}, \end{aligned} \tag{16.33}$$

dès que

$$\alpha \leqslant \bar{\alpha}_b := \frac{n(1-\omega-\sigma)}{C_1^2}.$$

En utilisant le fait que $x_i s_i \geqslant (1-\theta)\bar{\mu}$ lorsque $z \in V_\infty^-(\theta, \rho)$, on trouve

$$\begin{aligned} (x_i + \alpha dx_i)(s_i + \alpha ds_i) &= x_i s_i + \alpha(\underbrace{x_i ds_i + s_i dx_i}_{\sigma\bar{\mu} - x_i s_i}) + \alpha^2 dx_i ds_i \\ &\geqslant (1-\alpha)(1-\theta)\bar{\mu} + \alpha\sigma\bar{\mu} + \alpha^2 dx_i ds_i, \quad [\text{si } \alpha \leqslant 1] \\ &\geqslant ((1-\alpha)(1-\theta) + \alpha\sigma - \alpha^2 C_1^2)\bar{\mu} \\ &\geqslant (1-\theta)\left(1 - \alpha + \alpha\sigma + \frac{1}{n}\alpha^2 C_1^2\right)\bar{\mu} \\ &\geqslant (1-\theta)\bar{\mu}(z(\alpha)), \quad [\text{par (16.33)}], \end{aligned}$$

où l'avant-dernière inégalité est vraie dès que

$$\alpha \leqslant \bar{\alpha}_c := \min\left(1, \frac{\theta\sigma}{C_1^2(1 + \frac{1-\theta}{n})}\right).$$

Il suffit alors de prendre $\bar{\alpha} := \min(\bar{\alpha}_a, \bar{\alpha}_b, \bar{\alpha}_c) \leqslant 1$. On observe aussi que si z^0 vérifie (16.30), $C_1 = O(n)$ par le lemme 16.21. On en déduit alors que $\bar{\alpha} \geqslant C_2/n^2$. □

Théorème 16.23 (convergence de l'algorithme 16.20) *L'algorithme 16.20 converge : $\bar{\mu} \to 0$ et $(r_b^k, r_c^k) \to 0$ q-linéairement. De plus, si z^0 vérifie (16.30), alors, pour tout $\varepsilon > 0$, il existe un indice $K = O(n^2 \log \varepsilon^{-1})$ tel que $\bar{\mu}_k \leqslant \varepsilon\bar{\mu}_0$, dès que $k \geqslant K$.*

Démonstration. Comme l'algorithme choisit le plus grand pas tel que l'on ait (16.29), α_k est certainement supérieur à $\bar{\alpha} > 0$ donné par le lemme 16.22. Alors l'inégalité (16.29) montre que l'on a

$$\bar{\mu}_{k+1} \leqslant (1 - \omega\bar{\alpha})\bar{\mu}_k.$$

Ce qui implique la convergence q-linéaire de $\bar{\mu}_k$ vers zéro. Le même raisonnement et

$$\|(r_b^{k+1}, r_c^{k+1})\|_2 = (1-\alpha_k)\|(r_b^k, r_c^k)\|_2 \leqslant (1-\bar{\alpha})\|(r_b^k, r_c^k)\|_2$$

montre que (r_b^k, r_c^k) converge vers zéro q-linéairement.

Enfin, si z^0 vérifie (16.30), $\bar{\alpha} \geqslant C_2/n^2$ pour une constante $C_2 > 0$ indépendante de n, si bien que

$$\bar{\mu}_{k+1} \leqslant \left(1 - \frac{\omega C_2}{n^2}\right) \bar{\mu}_k.$$

On conclut en utilisant le lemme de complexité 16.5. □

16.5 Mise en œuvre

16.5.1 Calcul du déplacement de Newton

Les algorithmes primaux-duaux calculent l'itéré suivant en se déplaçant le long de la direction de Newton obtenue par linéarisation du système d'optimalité perturbé (16.3). Cette direction est solution de l'*équation de Newton*

$$\begin{pmatrix} 0 & A^\mathsf{T} & I \\ A & 0 & 0 \\ S & 0 & X \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dx \\ dy \\ ds \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -r_c \\ -r_b \\ \mu e - Xs \end{pmatrix}. \tag{16.34}$$

On a noté les *résidus*

$$r_c \equiv r_c(z) := A^\mathsf{T} y + s - c \quad \text{et} \quad r_b \equiv r_b(z) := Ax - b.$$

Intéressons-nous aux méthodes de calcul d'une solution du système de Newton (16.34). On peut éliminer ds grâce à la dernière équation, qui donne

$$ds = -X^{-1} S dx + \mu X^{-1} e - s.$$

On obtient alors ce que l'on appelle le *système linéaire augmenté*

$$\begin{pmatrix} -X^{-1}S & A^\mathsf{T} \\ A & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dx \\ dy \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -r_c - \mu X^{-1} e + s \\ -r_b \end{pmatrix}.$$

La matrice de ce système est symétrique, mais indéfinie, et garde le caractère creux éventuel de A. On peut le résoudre par la *factorisation de Bunch et Parlett* ou de *Bunch et Kaufman*.

On peut poursuivre la réduction de la dimension du système linéaire à résoudre en éliminant dx grâce à la première équation

$$dx = XS^{-1} A^\mathsf{T} dy + \mu S^{-1} e - x + XS^{-1} r_c.$$

On obtient ce que l'on appelle le *système normal* ou l'*équation normale*

$$(AXS^{-1}A^\mathsf{T}) dy = -r_b - A(\mu S^{-1} e - x + XS^{-1} r_c).$$

Si A est surjective, la matrice de ce système est symétrique définie positive. En pratique, c'est souvent ce système qui est résolu, par *factorisation de Cholesky creuse*.

Le mauvais conditionnement dû au facteur XS^{-1} requiert toutefois une factorisation adaptée [553]. Par ailleurs, si A a une colonne dense, la matrice $AXS^{-1}A^{\mathsf{T}}$ perd son caractère creux. Si celles-ci ne sont pas trop nombreuses, on peut faire face à la difficulté de la manière suivante. Si C (resp. D) désigne l'ensemble des indices des colonnes creuses (resp. denses) de A, on écrit

$$AXS^{-1}A^{\mathsf{T}} = A_C X_C S_C^{-1} A_C^{\mathsf{T}} + A_D X_D S_D^{-1} A_C^{\mathsf{T}}.$$

On calcule les facteurs de Cholesky creux de $A_C X_C S_C^{-1} A_C^{\mathsf{T}}$ et on prend en compte le second terme $A_D X_D S_D^{-1} A_C^{\mathsf{T}}$ par la technique de Sherman-Morrison-Woodbury.

16.5.2 Logiciels

La difficulté principale des méthodes de points intérieurs est due à la résolution des systèmes linéaires mal conditionnés que l'on y rencontre (section 16.5.1). Si l'on dispose de solveurs linéaires adéquats, les algorithmes peuvent s'écrire facilement et être ainsi adaptés à des situations particulières.

Logiciels généralistes : CPLEX [480], HOPDM [249], LIPSOL (en Matlab avec solveurs linéaires en Fortran) [562], LOQO, MOSEK [10, 481], OSX, PCx (en C) [136] et SEDUMI [510, 482].

Notes

L'algorithme des petits déplacements de la section 16.3.2 a été mis au point par Kojima, Mizuno et Yoshise [333 ; 1989] et par Monteiro et Adler [394 ; 1989] ; celui des grands déplacements de la section 16.3.3 est dû à Kojima, Mizuno et Yoshise [332 ; 1989]. L'algorithme prédicteur-correcteur de la section 16.3.4 fut énoncé et analysé par Mizuno, Todd et Ye [392 ; 1993], mais son principe est fondé sur les travaux antérieurs de Monteiro et Adler [394 ; 1989] et de Sonnevend, Stoer et Zhao [499, 500 ; 1989-1991]. L'algorithme prédicteur-correcteur de Mehrotra [386 ; 1992], que nous n'avons pas présenté, en est une version plus élaborée. Il suit le chemin central avec plus de précision en en construisant une approximation d'ordre plus élevé ; c'est important pour ne pas perdre du temps dans le suivi des coudes que peut former le chemin central. Il permet aussi d'adapter à l'itération courante le facteur σ de réduction de $\bar{\mu}$, alors qu'il est donné *a priori* dans l'algorithme 16.16. C'est cette méthode qui est la plus souvent implémentée dans les codes de points intérieurs pour l'optimisation linéaire.

Le lecteur trouvera des compléments à cette brève introduction dans la monographie de S. Wright [552], qui est une très bonne référence sur les algorithmes de points intérieurs primaux-duaux en optimisation linéaire ; nous nous en sommes souvent inspiré dans la partie algorithmique de ce chapitre. D'autres aspects de l'approche par points intérieurs en optimisation linéaire sont exposés par den Hertog [151], Saigal [478] (algorithmes affines), Terlaky [515], Jansen [311], Roos, Terlaky et Vial [474], Vanderbei [529] et Ye [555].

Les méthodes de points intérieurs sont utilisées pour résoudre d'autres classes de problèmes convexes, ayant un côté combinatoire provenant de relations de complémentarité. On pourra consulter [66] pour les problèmes de complémentarité linéaire

monotone (incluant l'optimisation quadratique convexe), [549] pour l'optimisation semi-définie positive (voir aussi le chapitre **??**), [457] pour l'optimisation conique (qui permet une extension à la dimension infinie), [415] pour l'optimisation convexe (voir aussi la section **??**). Ces sujets sont aussi abordés par Ben-Tal et Nemirovski [37], qui présentent de nombreux exemples et applications.

L'utilisation des points intérieurs pour résoudre les problèmes d'optimisation non linéaire remonte à l'ouvrage pionnier de Fiacco et McCormick [192 ; 1968]. Il faut également citer l'article parfois oublié de McLinden [385 ; 1980], qui contient des résultats qualitatifs sur les problèmes convexes. En optimisation non linéaire, les techniques sont moins bien maîtrisées, les algorithmes ne sont pas encore stabilisés et l'intérêt de l'approche est débattu [223]. On trouvera dans [90] une étude de convergence d'un algorithme se ramenant à une suite de problèmes-barrières sous contraintes d'égalité non linéaires globalisés par régions de confiance (voir aussi la section **??**) ; les codes KNITRO [417] et OPINL [209] s'en inspirent chacun à leur manière. Un état de l'art est présenté dans [202].

Exercices

16.1. On suppose que c, A et b sont donnés comme en optimisation linéaire (avec A surjective) et que (16.2) a lieu. Soit $\mu > 0$. Démontrez les affirmations suivantes.

(*i*) Le problème $(D_\mu) \equiv$ (16.5) a une solution et une seule.
(*ii*) Si l'on note (x_μ, y_μ, s_μ) le point central correspondant à μ, c'est-à-dire la solution unique de (16.3), la solution de (D_μ) n'est autre que (y_μ, s_μ) et x_μ est le multiplicateur optimal associé à la contrainte de (D_μ).

16.2. On suppose que c, A et b sont donnés comme en optimisation linéaire et que (16.2) a lieu. Soit $w \in \mathbb{R}^n_{++}$. Montrez qu'il existe un unique triplet (x, y, s), unique si A est surjective, vérifiant

$$\begin{cases} A^{\mathsf{T}} y + s = c, & s > 0 \\ Ax = b, & x > 0 \\ Xs = w. \end{cases}$$

En conséquence, l'application p définie en (16.15) est surjective (et bijective si A est surjective).

16.3. *Problèmes singuliers.* Supposons que (P) ait une solution $\bar{x}$ telle que $\bar{x} > 0$. Alors

(*i*) $c \perp \mathcal{N}(A)$,
(*ii*) tout point admissible de (P) est solution primale,
(*iii*) si (16.2) a lieu et $\mu \mapsto (x_\mu, s_\mu, s_\mu)$ est le chemin central, alors $x_\mu = \check{x}$ pour tout $\mu > 0$, où $\check{x}$ est le centre analytique de $\mathcal{F}_{\text{P}}$.

Supposons maintenant que (D) ait une solution $(\bar{y}, \bar{s})$ telle que $\bar{s} > 0$. Alors

(*iv*) $b = 0$,
(*v*) tout point admissible de (D) est solution duale,
(*vi*) si (16.2) a lieu, si A est surjective et si $\mu \mapsto (x_\mu, y_\mu, s_\mu)$ est le chemin central, alors $(y_\mu, s_\mu) = (\check{y}, \check{s})$ pour tout $\mu > 0$, où $(\check{y}, \check{s})$ est le centre analytique de $\mathcal{F}_{\text{D}}$.

16.4. *Le centre analytique n'est pas géométrique.* Montrez que le centre analytique de l'ensemble $\{x \in \mathbb{R}^2 : x \geqslant 0,\ x_1 + x_2 \leqslant 1\}$ est $(\frac{1}{3}, \frac{1}{3})$, alors que si le même ensemble est décrit par $\{x \in \mathbb{R}^2 : x \geqslant 0,\ x_1 + x_2 \leqslant 1,\ x_1 \leqslant 1\}$, on trouve $(\frac{1}{4}, \frac{3}{8})$.

16.5. *Autre définition du chemin central.* On considère le problème d'optimisation linéaire (P) et on suppose que (16.2) a lieu. Montrez que pour $\alpha > \text{val}(P)$, $X_\alpha := \{x \in \mathcal{F}_{\text{P}} :$

$c^\mathsf{T}x \leqslant \alpha\}$ est non vide, qu'il a un centre analytique et que celui-ci est situé sur le chemin central de (P).

16.6. *Tangente au chemin central.* Soit $z(\mu) = (x(\mu), y(\mu), s(\mu)) = (x, y, s)$ un point central, vérifiant donc $A^\mathsf{T}y + s = c$, $Ax = b$ et $Xs = \mu e$ pour un certain $\mu > 0$. On suppose que A est surjective. Soit $d = (dx, dy, ds)$ la dérivée de $\mu \mapsto (x(\mu), y(\mu), s(\mu))$ en μ. Montrez que l'on a

$$\begin{aligned} c^\mathsf{T}dx &= \frac{1}{\mu}c^\mathsf{T}Z^-(Z^{-\mathsf{T}}X^{-1}SZ^-)^{-1}Z^{-\mathsf{T}}c, \\ b^\mathsf{T}dy &= -\frac{1}{\mu}b^\mathsf{T}(AXS^{-1}A^\mathsf{T})^{-1}b, \\ s^\mathsf{T}dx + x^\mathsf{T}ds &= n, \end{aligned}$$

où Z^- est une matrice dont les colonnes forment une base de $\mathcal{N}(A)$.

Remarque. On voit que le critère primal $\mu \mapsto c^\mathsf{T}x(\mu)$ croît strictement (si $Z^{-\mathsf{T}}c \neq 0$ c'est-à-dire si $c \notin \mathcal{R}(A^\mathsf{T})$), que le critère dual $\mu \mapsto b^\mathsf{T}y(\mu)$ décroît strictement (si $b \neq 0$) et que le saut de dualité $\mu \mapsto x(\mu)^\mathsf{T}s(\mu)$ croît strictement. On pourra rapprocher cela du résultat de la proposition 16.4 (ii).

16.7. *Voisinages du chemin central.* On suppose que c, A et b sont donnés comme en optimisation linéaire (avec A surjective) et que (16.2) a lieu. On considère les voisinages $V_p(\theta)$ et $V_\infty^-(\theta)$ définis par (16.16) et (16.17), avec $p \in [1, \infty]$ et $\theta \in [0, 1[$.

1) On dit qu'un espace topologique E est *connexe par arcs* si deux quelconques de ses points peuvent être joints par un *chemin continu*, c'est-à-dire une application continue $\gamma : [0, 1] \mapsto E$ telle que $\gamma(0)$ est le premier point et $\gamma(1)$ le second. Montrez que $V_p(\theta)$ et $V_\infty^-(\theta)$ sont connexes par arcs si ces ensembles sont munis de la topologie induite de celle de $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n$.
2) Montrez que tout point (x, y, s) de $V_p(\theta)$ et de $V_\infty^-(\theta)$ vérifie $x > 0$ et $s > 0$, ce qui peut s'écrire $V_p(\theta) \subseteq \mathcal{F}^s$ et $V_\infty^-(\theta) \subseteq \mathcal{F}^s$.
3) Démontrez les affirmations suivantes.
   (a) Si $1 \leqslant p < +\infty$ et $n \geqslant 2$, alors $\bigcup_{0\leqslant\theta<1} V_p(\theta) \neq \mathcal{F}^s$.
   (b) Si $n \geqslant 3$, alors $\bigcup_{0\leqslant\theta<1} V_\infty(\theta) \neq \mathcal{F}^s$.
   (c) Par contre, $\bigcup_{0\leqslant\theta<1} V_\infty^-(\theta) = \mathcal{F}^s$.

17 Systèmes non déterminés

On rencontre souvent des problèmes de moindres-carrés. Mathématiquement, ces problèmes consistent à minimiser le carré de la norme euclidienne d'une fonction à valeurs vectorielles, qui peut être linéaire (on parle alors de moindres-carrés linéaire, voir la section 17.1) ou non linéaire (on parle alors de moindres-carrés non linéaire, voir la section 17.3). Ce chapitre leur est consacré. Étant donné la grande variété de problèmes qui peuvent être modélisés comme problème de moindres-carrés, on les rencontre sous des appellations différentes : *estimation de paramètres*, problème *d'identification*, de *calibration* ou de *régression* en statistiques [185, 310].

17.1 Moindres-carrés linéaire

> *Presque chaque soir, je fais une nouvelle édition du tableau, qu'il est facile d'améliorer n'importe où. Contre la monotonie du travail d'arpentage, c'est toujours une plaisante distraction ; on peut aussi voir immédiatement si quelque chose de douteux s'est glissé, ce qui reste à obtenir, etc. Je vous recommande cette méthode comme modèle. Il ne vous arrivera presque plus jamais de pratiquer une élimination directe, du moins quand vous avez plus de deux inconnues. La procédure indirecte peut se faire à moitié endormi, ou en pensant à autre chose.*
>
> C.F. Gauss, extrait d'une lettre à G.L. Gerling, datée du 26 décembre 1823, dans laquelle il loue les mérites de sa méthode de relaxation, par rapport aux méthodes directes, pour résoudre l'équation normale d'un problème de moindres-carrés linéaire. Traduction de A. Michel-Pajus [99].

17.1.1 Définition du problème

Un *problème de moindres-carrés linéaire* (MCL) est un problème d'optimisation qui s'écrit de la manière suivante :

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \left(f(x) = \frac{1}{2}\|Ax-b\|_2^2 \right), \tag{17.1}$$

où $\|\cdot\|_2$ est la norme ℓ_2, A est une matrice de type $m \times n$ et $b \in \mathbb{R}^m$. Lorsque $m = n$, on parle de problème *d'interpolation linéaire*. Ce problème peut se voir de différentes manières.

Le premier point de vue 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 supposée linéaire. Le problème de moindres-carrés linéaire permet de déterminer les paramètres x qui donnent des quantités mesurées Ax au plus proche des mesures b. De ce point de vue, le problème consiste à projeter b sur l'image de A au moyen du produit scalaire euclidien (voir la section 2.5.2, on pourrait prendre d'autres produits scalaires d'ailleurs).

Le second point de vue 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. 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. On note

$$r = \operatorname{rg} A$$

le rang de A.

17.1.2 L'ensemble des solutions

La condition d'optimalité du premier ordre de ce problème s'écrit $\nabla f(x) = 0$ ou encore

$$A^\mathsf{T} A x = A^\mathsf{T} b. \tag{17.2}$$

Celle-ci porte le nom d'*équation normale* de (17.1).

La proposition suivante règle la question de l'existence et de l'unicité des solutions de (17.1).

Proposition 17.1 (ensemble des solutions) *Le problème (17.1) est convexe et admet toujours une solution. Celle-ci est unique si, et seulement si, A est injective. L'ensemble des solutions de (17.1) s'écrit $x_p + \mathcal{N}(A)$, où x_p est une solution particulière de (17.1) et la valeur optimale est $\frac{1}{2}\|Pb\|_2^2$, où P est le projecteur orthogonal (pour le produit scalaire euclidien) sur $\mathcal{R}(A)^\perp$.*

Démonstration. Le problème (17.1) consiste à projeter b sur l'image de A (voir la section 2.5.2), qui est un convexe fermé non vide. Il existe donc un unique élément $y \in \mathcal{R}(A)$ qui est le plus proche de b (proposition 2.24). Cet élément est de la forme $y = Ax$, où x est une solution de (17.1).

Si A est injective f est strictement convexe ($A^\mathsf{T} A$ est définie positive) et donc (17.1) a une solution unique. Si A n'est pas injective et x est solution, tous les points de $x + \mathcal{N}(A)$ ($\neq \{x\}$) sont aussi solutions ; par ailleurs, si x et x' sont deux solutions de (17.1), elles vérifient l'équation normale et donc $x - x' \in \mathcal{N}(A^\mathsf{T} A) = \mathcal{N}(A)$.

Enfin, $Q = I - P$ étant le projecteur orthogonal sur $\mathcal{R}(A)$, la valeur optimale s'écrit $\frac{1}{2}\|Qb - b\|_2^2 = \frac{1}{2}\|Pb\|_2^2$. □

Il existe de nombreuses démonstrations de l'existence d'une solution de (17.1). Celle donnée ci-dessus considère directement le problème d'optimisation. On peut

aussi s'intéresser à son système d'optimalité (17.2) (du fait de la convexité du critère — sa hessienne $A^\mathsf{T}A$ est semi-défini positif — il y a équivalence entre les solutions (17.1) et celles de son système d'optimalité ; théorème 4.9). Pour montrer que ce dernier a toujours une solution, il suffit d'observer que $A^\mathsf{T}b \in \mathcal{R}(A^\mathsf{T}A)$.

L'ensemble des solutions de (17.1) sont donc les solutions de l'équation normale (17.2). On peut s'intéresser à la *solution de norme minimale*, qui est donc définie par

$$\begin{cases} \min \frac{1}{2}\|x\|_2^2 \\ A^\mathsf{T}Ax = A^\mathsf{T}b. \end{cases} \tag{17.3}$$

On peut bien parler de « la » solution de norme minimale, car le critère de ce problème étant strictement convexe, il y a exactement une unique solution de norme minimale. On peut caractériser la solution de ce problème. Comme celui-ci est convexe, ses conditions d'optimalité du premier ordre sont nécessaires et suffisantes (on notera en effet que les contraintes sont qualifiées, car affines). Donc $\hat{x}$ est la solution de norme minimale si, et seulement si, il existe un multiplicateur $\lambda \in \mathbb{R}^n$ (non nécessairement unique) tel que

$$\begin{cases} \hat{x} + A^\mathsf{T}A\lambda = 0 \\ A^\mathsf{T}A\hat{x} = A^\mathsf{T}b. \end{cases} \tag{17.4}$$

La première condition s'écrit aussi $\hat{x} \in \mathcal{R}(A^\mathsf{T}A) = \mathcal{R}(A^\mathsf{T})$. Dès lors, $\hat{x}$ est solution de norme minimale de (17.1), c'est-à-dire solution de (17.3), si, et seulement si,

$$\begin{cases} \hat{x} \in \mathcal{R}(A^\mathsf{T}) \\ A^\mathsf{T}A\hat{x} = A^\mathsf{T}b. \end{cases} \tag{17.5}$$

Comme $\hat{x}$ est univoquement déterminé par le système linéaire d'optimalité (17.4) (il peut cependant avoir de multiples solutions en λ si A n'est pas injective), qui se récrit

$$\begin{pmatrix} I & A^\mathsf{T}A \\ A^\mathsf{T}A & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{x} \\ \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ A^\mathsf{T}b \end{pmatrix},$$

l'application qui à $b \in \mathbb{R}^m$ fait correspondre $\hat{x}$ est linéaire et la matrice qui la représente est appelée le pseudo-inverse (de Moore-Penrose) de A. On note cette matrice $A^\dagger$ et la solution de norme minimale s'écrit

$$\hat{x} = A^\dagger b.$$

On peut voir $\hat{x}$ comme le résultat d'une tentative de trouver une solution au système $Ax = b$, qui n'en n'a pas nécessairement (on se rappelle, en particulier, que A n'est pas carrée), au moyen de deux opérations :

- la première force l'*existence* d'une solution en relaxant « $Ax = b$ » en un problème de minimisation, celui que l'on trouve dans (17.1),
- la seconde force l'*unicité* de la solution par le problème d'optimisation (17.3).

17.1.3 Résolution numérique

On distingue les algorithmes qui utilisent l'équation normale (17.2) (résolution par factorisation de Cholesky ou par gradient conjugué) et ceux qui s'attaquent directement à la formulation originale (17.1) (résolution par factorisation QR ou par factorisation en valeurs singulières).

Résolution de l'équation normale par factorisation

L'approche la plus simple est de faire la *factorisation de Cholesky* de $A^\mathsf{T}A$ et de calculer la solution de l'équation normale en résolvant les deux systèmes triangulaires qui en découlent. Cette approche n'est pas sans inconvénients. D'une part elle oblige de former la matrice $A^\mathsf{T}A$, ce qui demande $O(mn^2)$ opérations (ce n'est souvent pas négligeable). Ensuite, on perd aussi en précision, du fait de l'annulation de l'influence des petits éléments de A (en particulier dans les termes diagonaux $(A^\mathsf{T}A)_{ii} = \sum_j A_{ji}^2$). Enfin, cette approche peut éventuellement détruire la creusité éventuelle de A (si A a une ligne pleine, $A^\mathsf{T}A$ sera en général une matrice pleine).

Une autre possibilité, bien adaptée aux matrices A creuses est de résoudre ce que l'on appelle le *système linéaire augmenté*, équivalent à l'équation normale, que l'on obtient à partir de celle-ci en posant $y = -Ax$:

$$\begin{pmatrix} I & A \\ A^\mathsf{T} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y \\ x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -A^\mathsf{T}b \end{pmatrix}.$$

La matrice K de ce système linéaire est symétrique, mais n'est pas définie positive. D'autre part, l'ordre $n+m$ de K peut être beaucoup plus important que l'ordre n de l'équation normale ; mais si A est creuse, K l'est aussi. On peut alors la factoriser par des méthodes pouvant prendre en compte son caractère creux (comme les solveurs MA27/MA47 de Duff et Reid [167, 168, 169]). On se rappellera que K n'est en général pas définie positive (si A est injective, K a n valeurs propres strictement négatives et m valeurs propres strictement positives), si bien qu'une factorisation de Cholesky ne convient pas.

Résolution de l'équation normale par gradient conjugué

Dans cette approche, on minimise f par l'algorithme du gradient conjugué (GC), ce qui revient à résoudre l'équation normale par le même algorithme. Théoriquement, cet algorithme n'est bien défini que lorsque la matrice du système à résoudre, ici $A^\mathsf{T}A$, est définie positive. Toutefois, grâce à la structure de l'équation normale, le GC peut être utilisé pour résoudre cette équation. C'est ce qu'affirme la proposition suivante. On rappelle que $r = \operatorname{rg} A$.

Proposition 17.2 *L'algorithme du gradient conjugué pour minimiser* (17.1) *est bien défini et converge en au plus r itérations. De plus, si l'itéré initial est pris dans $\mathcal{R}(A^\mathsf{T})$ (par exemple $x_1 = 0$), les itérés convergent vers la solution de norme minimale de* (17.1).

Démonstration. C'est une application directe du point 2 de la proposition 8.11. Le système linéaire à résoudre est l'équation normale (17.2) : on a bien $A^\mathsf{T}A \succcurlyeq 0$, $A^\mathsf{T}b \in \mathcal{R}(A^\mathsf{T}) = \mathcal{R}(A^\mathsf{T}A)$ et $\dim \mathcal{R}(A^\mathsf{T}A) = \dim \mathcal{R}(A^\mathsf{T}) = \dim \mathcal{R}(A) = r$. □

Le principal avantage du GC est d'être utilisable pour les grands problèmes. Cependant, cette approche est sensible aux erreurs d'arrondi et présente des problèmes de stabilité numérique (difficultés si A a des valeurs singulières nulles ou presque nulles).

En particulier, *il ne faut pas implémenter l'algorithme du GC standard directement sur l'équation normale*. L'algorithme recommandé dans [55], appelé CGLS ci-dessous, est celui déjà proposé par Hestenes et Steifel [290, 506]. Ces deux algorithmes sont équivalents en arithmétique exacte, mais c'est ce dernier qui a les meilleures propriétés de stabilité numérique.

L'algorithme CGLS génère des itérés x_k, en faisant un pas $\alpha_k > 0$ le long d'une direction d_k : $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$. C'est ici le résidu $r_k := b - Ax_k$, dont on cherche à minimiser la norme, qui est mis à jour récursivement (par $r_{k+1} = x_k - \alpha_k p_k$, où $p_k := Ad_k$) et non pas le résidu de l'équation normale, lequel est calculé par $s_k := A^\mathsf{T} r_k$. C'est essentiellement par cette mise-à-jour du résidu que CGLS diffère d'une application directe du GC standard.

Algorithme 17.3 (CGLS)

1. On se donne $x_1 \in \mathbb{R}^n$;
2. On calcule le résidu $r_1 = b - Ax_1$, l'opposé du gradient $s_1 = A^\mathsf{T} r_1$ et sa norme au carré $\gamma_1 = \|s_1\|_2^2$;
3. Pour $k = 1, 2, \ldots$ faire :
   3.1. Si $\gamma_k \simeq 0$, on s'arrête ;
   3.2. *Paramètre de conjugaison* : si $k \geqslant 2$, $\beta_k = \gamma_k / \gamma_{k-1}$;
   3.3. *Déplacement en x* :

$$d_k = \begin{cases} s_k & \text{si } k = 1 \\ s_k + \beta_k d_{k-1} & \text{si } k \geqslant 2 \,; \end{cases}$$

   3.4. *Déplacement en r* : $p_k = Ad_k$;
   3.5. *Calcul du pas* : $\alpha_k = \gamma_k / \|p_k\|_2^2$;
   3.6. *Nouveau point* : $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$;
   3.7. *Nouveau résidu* : $r_{k+1} = r_k - \alpha_k p_k$;
   3.8. *Nouveau gradient* : $s_{k+1} = A^\mathsf{T} r_{k+1}$; $\gamma_{k+1} = \|s_{k+1}\|_2^2$;

On peut encore noter que l'algorithme CGLS évite de faire les produits $A^\mathsf{T}(Ad)$ qui, en calcul flottant, peuvent détériorer la performance lorsque le système est mal conditionné ; voir [423 ; section 7.1] et [55 ; section 4.2]. Un autre algorithme à l'efficacité semblable est LSQR de Paige et Saunders [423]. C'est une autre version stable du GC, fondée sur la bidiagonalisation de Lanczos et la factorisation QR.

Résolution par factorisation QR de A

Soit

$$A = QR$$

une factorisation QR de A, où Q est une matrice orthogonale et R est de la forme

$$R = \begin{pmatrix} R_1 \\ 0_{(m-r)\times n} \end{pmatrix}.$$

On a noté $0_{(m-r)\times n}$ la matrice nulle de type $(m-r)\times n$. On sait que R_1 est triangulaire supérieure ($(R_1)_{ij} = 0$ si $i > j$) et que ses éléments diagonaux $(R_1)_{ii}$ $(1 \leqslant i \leqslant r)$ sont non nuls.

On a $\|Q^\mathsf{T} y\|_2 = \|y\|_2$ par orthogonalité de Q, si bien que

$$\begin{aligned} \|Ax - b\|_2^2 &= \|Q^\mathsf{T}(Ax - b)\|_2^2 \\ &= \|Rx - Q^\mathsf{T} b\|_2^2 \\ &= \sum_{i=1}^{r} (Rx - Q^\mathsf{T} b)_i^2 + \sum_{i=r+1}^{m} (Q^\mathsf{T} b)_i^2. \end{aligned}$$

La somme du second terme ne dépend pas de x et la somme du premier terme peut être annulée en résolvant

$$R_1 x = \tilde{b}, \tag{17.6}$$

où $\tilde{b} \in \mathbb{R}^n$ est défini par $\tilde{b}_i = (Q^\mathsf{T} b)_i$ pour $1 \leqslant i \leqslant r$. Du fait de la structure de R_1, cette équation a toujours une solution. Celle-ci est aussi une solution du problème (17.1) puisqu'elle donne au critère f sa valeur minimale $\frac{1}{2}\sum_{i=r+1}^{m} (Q^\mathsf{T} b)_i^2$.

La solution de (17.6) est unique si A est injective, car alors $r = n$ et le système (17.6) est carré. Si A n'est pas injective ($r < n$), ce système permet d'écrire les r premières composantes de x comme fonction de ses $n - r$ dernières composantes, celles-ci pouvant être choisies arbitrairement. On obtiendra la solution de (17.1) avec le plus de zéros en prenant $x_i = 0$ pour $r + 1 \leqslant i \leqslant n$.

Numériquement, la résolution de (17.1) par la factorisation QR de A est très stable. Mais la solution peut être très différente de celle de norme minimale. Mieux vaut utiliser la factorisation SVD (plus coûteuse).

Résolution par factorisation en valeurs singulières (SVD) de A ▲

La décomposition en valeurs singulières de A, de type $m \times n$ et de rang r, s'écrit

$$A = U \Sigma V^\mathsf{T},$$

où U est une matrice de type $m \times r$ dont les colonnes sont orthogonales ($U^\mathsf{T} U = I_r$), V est une matrice de type $n \times r$ dont les colonnes sont orthogonales ($V^\mathsf{T} V = I_r$) et Σ est une matrice d'ordre r diagonale définie positive ($\Sigma_{ij} = 0$ si $i \neq j$ et $\Sigma_{ii} = \sigma_i > 0$). Le pseudo-inverse de A s'écrit

$$A^\dagger = V \Sigma^{-1} U^\mathsf{T}.$$

17.2 Moindres-carrés polyédrique ⊖

Voir le syllabus complet.

17.3 Moindres-carrés non linéaire

17.3.1 Définition du problème

Soit $r : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ une fonction régulière, que l'on appelle ci-dessous le *résidu*. On cherche à minimiser celui-ci au sens des moindres carrés, c'est-à-dire :

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \Big(f(x) = \frac{1}{2}\|r(x)\|^2 \Big), \tag{17.7}$$

où $\|\cdot\|$ désigne la norme ℓ_2. Un problème de ce type porte le nom de *problème de moindres-carrés non linéaire*, parce qu'on y minimise la somme des carrés des résidus non linéaires r_i. C'est une version non linéaire du problème de moindres-carrés linéaire (17.1), puisque l'on retrouve ce dernier en définissant r en x par $r(x) = Ax - b$. En pratique, on a $m \gg n$, mais, sauf mention contraire, nous ne faisons pas d'hypothèse systématique sur la grandeur relative de m et n ci-dessous.

On note

$$J(x) = r'(x)$$

la jacobienne de r en x, qui est une matrice de type $m \times n$. On calcule aisément le gradient et la hessienne du critère de (17.7) pour le produit scalaire euclidien :

$$\nabla f(x) = J(x)^T r(x) \quad \text{et} \quad \nabla^2 f(x) = J(x)^T J(x) + \sum_{i=1}^{p} r_i(x)\nabla^2 r_i(x). \tag{17.8}$$

Dans un contexte où une suite $\{x_k\} \subseteq \mathbb{R}^n$ est définie, on note encore

$$r_k := r(x_k), \qquad g_k := \nabla f(x_k) \qquad \text{et} \qquad J_k := J(x_k). \tag{17.9}$$

17.3.2 Algorithme de Gauss-Newton

L'application de la méthode de Newton pour minimiser la fonction f définie en (17.7) requiert le calcul de la hessienne $\nabla^2 f(x)$ et, comme le montre la formule (17.8), le calcul des dérivées secondes du résidu. Pour certains problèmes de moindres-carrés, ce calcul peut être très coûteux, si bien que l'on s'intéresse à l'algorithme qui néglige ces termes de la hessienne et calcule donc en x_k une direction d_k en résolvant le système linéaire suivant :

$$\boxed{(J_k^T J_k)\, d_k = -J_k^T r_k.} \tag{17.10}$$

On a noté $J_k = J(x_k)$ et $r_k = r(x_k)$ (il y a une petite ambiguïté de notation — r_k n'est pas la k-ième composant du résidu — mais celle-ci sera toujours facilement levée par le contexte).

On peut obtenir la même direction en raisonnant comme suit. On considère le modèle quadratique de f obtenu, non pas par son développement au deuxième ordre (ce serait l'algorithme de Newton et l'on cherche à simplifier celui-ci ici), mais en linéarisant le résidu à l'intérieur de la norme dans (17.7). Ceci donne :

$$\min_{d\in\mathbb{R}^n} \frac{1}{2}\|r_k + J_k d\|^2. \tag{17.11}$$

On observe que ce problème définit les mêmes directions d_k que précédemment, car l'équation d'optimalité du premier ordre de (17.11) n'est autre que (17.10). De plus celle-ci est nécessaire et suffisante car le problème (17.11) est convexe.

Le résultat suivant montre qu'il est raisonnable de construire une méthode à direction de descente en prenant d_k comme direction le long desquelles on se déplace.

Proposition 17.4 (direction de descente de Gauss-Newton) *Le système linéaire* (17.10) *a une solution* d_k*. Si* x_k *n'est pas un point stationnaire du problème de moindres-carrés non linéaire* (17.7)*, alors* d_k *est une direction de descente de* f *en* x_k*.*

Démonstration. Le problème (17.11) a toujours au moins une solution car c'est un problème de moindres-carrés linéaire (proposition 17.1). D'autre part, en prenant le produit scalaires des deux membres de (17.7) avec d_k, on trouve

$$g_k^T d_k = -\|J_k d_k\|^2,$$

qui est strictement négatif lorsque x_k n'est pas stationnaire (car alors $J_k^T r_k \neq 0$ et donc $J_k d_k \neq 0$ par (17.10)). □

Ceci nous conduit à l'*algorithme de Gauss-Newton*, dont nous décrivons une itération ci-dessous.

Algorithme 17.5 (Gauss-Newton) L'algorithme calcule l'itéré x_{k+1} à partir de l'étéré x_k de la manière suivante.

1. *Test d'arrêt.* Si $J_k^T r_k \simeq 0$, arrêt de l'algorithme.
2. *Direction de descente.* Calculer une solution d_k de (17.10).
3. *Recherche linéaire.* Trouver un pas $\alpha_k > 0$ en x_k le long de d_k par une règle de recherche linéaire « convenable ».
4. *Nouvel itéré.* $x_{k+1} := x_k + \alpha_k d_k$.

À l'étape 3, on entend par règle de recherche linéaire « convenable », une règle satisfaisant la condition de Zoutendijk (6.19) ou (6.26a). Une règle appropriée est celle d'Armijo ou de Goldstein (voir la section 6.3.3).

Des conditions de convergence globale et de complexité itérative globale de cet algorithme sont données dans le théorème qui suit. On y requiert une hypothèse assez forte, qui est celle de l'*injectivité uniforme* de la suite $\{J_k\}$, ce qui veut dire qu'il existe une constante $\alpha_J > 0$ telle que pour tout indice $k \geqslant 1$ et tout vecteur $v \in \mathbb{R}^n$, on ait

$$\|J_k v\| \geqslant \alpha_J \|v\|.$$

Dans ce cas, la direction de Gauss-Newton est déterminée de manière unique par (17.10) et la convergence globale *vers un point stationnaire* de f est assurée (point 1) avec une complexité itérative en $O(\varepsilon^{-2})$ (point 2) ; cette complexité ne dépend pas de n et m.

Les résultats s'améliorent beaucoup s'il s'avère que $\{J_k^T\}$ est uniformément injective, puisqu'alors, l'algorithme assure la convergence de $\{r_k\}$ vers zéro (point 3), avec une complexité itérative en $O(\log \varepsilon^{-1})$ (point 4), ce qui est spectaculairement mieux ; cette complexité ne dépend pas de n et m. D'ailleurs, dans ce cas, on doit avoir $m = n$ (car J_k est déclarée bijective) et l'on cherche donc un zéro du système de n équations à n inconnues $r(x) = 0$.

Théorème 17.6 (convergence et complexité itérative de l'algorithme de Gauss-Newton) *Supposons que f donnée par (17.7) soit $\mathcal{C}^{1,1}$ dans un voisinage de $\mathcal{N}_1 := \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leqslant f(x_1)\}$. Soit $\{x_k\}$ une suite générée par l'algorithme 17.5 de Gauss-Newton, telle que $\{J_k\}$ soit bornée et uniformément injective. Alors,*

1) $J_k^T r_k \to 0$,
2) *il existe une constante $C > 0$, indépendante de n et m, telle que, pour tout $\varepsilon > 0$, $\|J_k^T r_k\| \leqslant \varepsilon$ pour un indice k inférieur à $\lceil C\varepsilon^{-2} \rceil$,*
3) *si, de plus, $\{J_k^T\}$ est uniformément injective, alors*
   a) *$f(x_k) \to 0$ linéairement,*
   b) *il existe une constante $C' > 0$, indépendante de $n = m$, telle que, pour tout $\varepsilon > 0$, $\|r_k\| \leqslant \varepsilon \|r_0\|$ pour tout indice $k \geqslant \lceil C' \log \varepsilon^{-1} \rceil$.*

Démonstration. 1) Si la condition de Zoutendijk (6.19) a lieu, on utilise la proposition 6.8 et sa conclusion (6.21). Pour cela, on observe que $f_* := \inf_k f(x_k) \in [0, f(x_1)]$ est bien fini et que le cosinus de l'angle θ_k entre d_k et $-g_k$ est minoré par une constantestrictement positive :

$$\cos \theta_k = \frac{-g_k^T d_k}{\|g_k\| \, \|d_k\|} = \frac{\|J_k d_k\|^2}{\|J_k^T r_k\| \, \|d_k\|} \geqslant \frac{\alpha_J \|J_k d_k\|}{\|J_k^T J_k d_k\|} \geqslant \frac{\alpha_J}{\beta_J}. \tag{17.12}$$

Alors, (6.21) implique que $g_k = J_k^T r_k \to 0$.

Si la condition (6.26a) a lieu, $|g_k^T d_k| = \|J_k d_k\|^2$ doit tendre vers zéro (car $f(x_k)$ et $f(x_{k+1})$ tendent vers la même valeur) et comme $\|J_k d_k\| \geqslant \alpha_J \|d_k\|$ (injectivité uniforme de $\{J_k\}$), on a $d_k \to 0$. Par (17.10) et la bornitude de $\{J_k\}$, ceci implique aussi $g_k = J_k^T r_k \to 0$.

2) Si la condition de Zoutendijk (6.19) a lieu, le résultat se déduit de la seconde partie de la proposition 6.8 qui affirme que, pour tout $\varepsilon > 0$, $\|J_k^T r_k\| \leqslant \varepsilon$ dès que k est supérieur à K_ε donné par (6.22), avec $\gamma = \alpha_J / \beta_J$.

Considérons maintenant le cas où la condition (6.26a) a lieu. Par (17.10) et l'existence d'une borne β_J sur $\{\|J_k^T\|\}$, on a

$$\|g_k\|^2 = \|J_k^T J_k d_k\|^2 \leqslant \beta_J^2 \|J_k d_k\|^2 = \beta_J^2 |g_k^T d_k|.$$

Alors la condition (6.26a) se récrit

$$f(x_{k+1}) \leqslant f(x_k) - C\beta_J^{-2} \|g_k\|^2 \qquad \text{ou} \qquad C\beta_J^{-2} \|g_k\|^2 \leqslant f(x_k) - f(x_{k+1}). \tag{17.13}$$

En sommant de $k = 1$ à K, on trouve

$$\min_{k\in[1:K]} \|g_k\|^2 \leqslant \frac{1}{K}\sum_{k=1}^{K} \|g_k\|^2 \leqslant \frac{f(x_1)-f_*}{C\beta_J^{-2}K}.$$

Donc un des $\|g_k\|$, avec $k \in [1:K]$, est inférieur à un $\varepsilon > 0$ donné si le membre de droite est inférieur à ε^2, c'est-à-dire si $K \geqslant C^{-1}\beta_J^2(f(x_1)-f_*)\varepsilon^{-2}$.

3) Pour une constante strictement positive C_1, on a

$$f(x_{k+1}) \leqslant f(x_k) - C_1\|g_k\|^2,$$

soit par la condition de Zoutendijk (6.19) et (17.12), soit par la condition (6.26a) et (17.13). Alors, en utilisant $g_k = J_k^{\mathsf{T}} r_k$ et $\|J_k^{\mathsf{T}} r_k\|^2 \geqslant (\alpha'_J)^2\|r_k\|^2 = 2(\alpha'_J)^2 f(x_k)$ par l'injectivité uniforme de J_k^{T}, on trouve

$$f(x_{k+1}) \leqslant (1-C_2)f(x_k),$$

pour la constante strictement positive $C_2 = 2C_1(\alpha'_J)^2$. Ceci montre la convergence linéaire de $f(x_k)$ vers zéro (point 3.a). Puis par récurrence,

$$\frac{f(x_k)}{f(x_0)} \leqslant (1-C_2)^k.$$

Dès lors, $\|r_k\| \leqslant \varepsilon\|r_0\|$ si $f(x_k)/f(x_0) \leqslant \varepsilon^2$ et donc certainement si le membre de droite ci-dessus est inférieur à ε^2 :

$$(1-C_2)^k \leqslant \varepsilon^2.$$

En prenant les logarithmes et en tenant compte du fait que $\log(1-C_2) < 0$, on obtient comme condition sur k :

$$k \geqslant \frac{2\log\varepsilon^{-1}}{\log(1-C_2)^{-1}}.$$

On obtient donc le résultat du point 3.b avec la constante $C' := 2/\log(1-C_2)^{-1}$. □

Cette étude montre que, contrairement à la méthode de Newton, l'algorithme de Gauss-Newton est toujours bien défini et génère toujours des directions de descente, au prix toutefois de devoir résoudre le système linéaire (17.10), qui est moins bien conditionné que (9.3). Sa convergence est assurée sous des conditions souvent vérifiées, mais pas toujours. L'algorithme de Levenberg-Morrison-Marquardt de la section suivante permet de se défaire de la condition d'injectivité uniforme de $\{J_k\}$. Par contre, la vitesse de convergence peut être assez lente si le résidu n'est pas nul en la solution ou si r y est fortement non linéaire (r'' non nul), car l'algorithme s'écarte alors de la méthode de Newton par un terme significativement non nul $\nabla^2 f(x) - J(x)^{\mathsf{T}}J(x) = \sum_i r_i(x)\nabla^2 r_i(x)$ (voir (17.8)).

17.3.3 Algorithme de Levenberg-Morrison-Marquardt ⊖

L'algorithme

L'algorithme de Levenberg-Morrison-Marquardt (LMM) cherche à résoudre le problème de moindres-carrés non linéaire (17.1) en générant une suite $\{x_k\} \subseteq \mathbb{R}^n$

de la manière suivante. Il définit le déplacement $s_k \in \mathbb{R}^n$ de l'itéré courant x_k à l'itéré suivant $x_{k+1} := x_k + s_k$ en résolvant le système linéaire

$$\boxed{\left(J_k^T J_k + \lambda_k M_k\right) s_k = -J_k^T r_k,} \tag{17.14}$$

où l'on a utilisé les notations (17.9). Dans ce système, $M_k \in \mathcal{S}^n_{++}$ est une matrice symétrique définie positive, dont le rôle et les règles qu'elle doit vérifier seront précisés plus loin, et $\lambda_k > 0$ est un paramètre, appelé tantôt *facteur de pénalisation*, tantôt *multiplicateur*, selon l'interprétation que l'on en fait. Ce multiplicateur joue un rôle important dans l'algorithme, qui le détermine lui-même à chaque itération, alors que M_k peut être laissé au choix de l'utilisateur. Ce multiplicateur est l'élément nouveau par rapport à la direction de l'algorithme de Gauss-Newton, calculée comme solution de (17.10), qui n'est autre que (17.14) avec $\lambda_k = 0$. Remarquons qu'ici, grâce à la stricte positivité de λ_k et la définie positivité de M_k, la matrice du système linéaire (17.14) est symétrique définie positive, si bien que s_k y est déterminé de manière unique. Lorsqu'il sera important de mentionner la dépendance en λ_k de la solution de (17.14), on notera celle-ci

$$s_k(\lambda_k).$$

Insistons sur le fait que s_k est le déplacement de x_k à x_{k+1} et pas une direction de déplacement le long de laquelle on ferait un pas pouvant être différent de un ; pour le dire autrement, l'algorithme présenté ci-dessous n'utilise pas de recherche linéaire pour déterminer l'itéré suivant, comme c'est le cas pour l'algorithme de Gauss-Newton de la section 17.3.2. Sur ce plan, l'algorithme s'apparente davantage aux méthodes à régions de confiance. En particulier, comme nous allons le voir, c'est en augmentant λ_k que l'on diminue la grandeur du déplacement $s_k(\lambda_k)$, ce qui explique pourquoi c'est l'algorithme lui-même qui doit prendre en charge la détermination de λ_k. C'est aussi ce réglage du multiplicateur λ_k qui permettra de faire décroître f suffisamment à chaque itération.

On voit que si $g_k = 0$, le déplacement donné par (17.14) est nul, si bien que l'algorithme ne peut pas progresser. Par conséquent, l'algorithme de LMM ne peut pas trouver mieux qu'un point stationnaire de la fonction de mérite de moindres-carrés f, mais un tel point peut être un zéro de r si sa jacobienne y est injective. C'est donc en ces termes que se formuleront le test d'arrêt de l'algorithme 17.7 et le résultat de convergence globale du théorème 17.9.

Il est utile de constater que le déplacement s_k de l'algorithme de LMM, solution de l'équation (17.14), est aussi solution du problème de moindres-carrés linéaire *pénalisé* suivant

$$\min_{s \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \|r_k + J_k s\|^2 + \frac{\lambda_k}{2} s^T M_k s, \tag{17.15}$$

où $\|\cdot\|$ désigne la norme ℓ_2 dans $\mathbb{R}^m$, que l'on pourra comparer à (17.11). En effet, la condition nécessaire et suffisante d'optimalité de ce problème quadratique convexe, c'est-à-dire la nullité du gradient de son critère par rapport à s, n'est autre que (17.14). De ce point de vue, λ est un *facteur de pénalisation*. Il sera utile d'introduire une notation pour la fonction qui intervient dans le critère de ce problème, qui est la fonction $\varphi_k : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ définie en $(x, \lambda) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$ par

$$\varphi_k(s,\lambda) := \frac{1}{2}\,\|J_k s + r_k\|^2 + \frac{\lambda}{2}\,s^T M_k s.$$

Au terme $-\lambda\Delta^2/2$ indépendant de s près, cette fonction est le lagrangien du problème

$$\begin{cases} \min_{s\in\mathbb{R}^n} \frac{1}{2}\,\|J_k s + r_k\|^2 \\ s^T M_k s \leqslant \Delta^2. \end{cases} \tag{17.16}$$

où $\Delta > 0$ est le *rayon de confiance* du problème (voir le chapitre **??**). De ce point de vue, λ est un *multiplicateur* associé à la contrainte de région de confiance $\{s \in \mathbb{R}^n : s^T M_k s \leqslant \Delta^2\}$ de ce problème.

On déduit des points de vue présentés dans le paragraphe précédent que, $\|s_k(\lambda)\|$ décroît lorsque λ croît (proposition 12.2). De plus (proposition 17.8 et exercice 17.1), lorsque $\lambda \to \infty$ et $g_k \neq 0$, on a $s_k(\lambda) \to 0$ et $\lambda M_k s_k(\lambda) \to -g_k$, si bien que, dans ces circonstances, $s_k(\lambda)$ s'aligne sur $-M_k^{-1}g_k$:

$$s_k(\lambda) = -\frac{\|s_k(\lambda)\|}{\|M_k^{-1}g_k\|}\,M_k^{-1}g_k + o(\|s_k(\lambda)\|), \qquad \text{lorsque } \lambda \to \infty.$$

Par la différentiabilité supposée de la fonction f définie en (17.7), on en déduit que

$$f(x_k + s_k(\lambda)) = f(x_k) - \frac{g_k^T M_k^{-1} g_k}{\|M_k^{-1}g_k\|}\,\|s_k(\lambda)\| + o(\|s_k(\lambda)\|), \quad \text{lorsque } \lambda \to \infty.$$

Dès lors, toujours si $g_k \neq 0$, $f(x_k + s_k(\lambda)) < f(x_k)$ si λ est pris assez grand. C'est en ajustant λ à chaque itération que l'algorithme de LMM assure la décroissance suffisante de f et la convergence de g_k vers zéro.

Il y a plusieurs manières de déterminer λ_k à chaque itération. Nous présentons ci-dessous celle proposée par Osborne [421] qui prend racine sur la méthode des régions de confiance. Son intérêt est de ne pas devoir résoudre le problème de région de confiance (17.16) à chaque itération, lequel peut être coûteux pour certains problèmes. L'idée est similaire à celle utilisée par les régions de confiance et fait entrer en jeu le rapport ρ_k entre la décroissance réelle de f apportée par le déplacement $s_k(\lambda)$, pour un certain $\lambda > 0$, et la décroissance prédite par modèle φ_k :

$$\rho_k(\lambda) := \frac{1}{2}\,\frac{f(x_k) - f(x_k + s_k(\lambda))}{f(x_k) - \varphi_k(s_k(\lambda),\lambda)}.$$

Le facteur $1/2$ est placé pour que la variation au premier ordre du numérateur, qui vaut $-g_k^T s_k$, soit identique à celle du dénominateur, si bien que fonction et modèle sont alors « tangents ». Le dénominateur vaut en effet

$$\begin{aligned} 2[f(x_k) - \varphi_k(s_k(\lambda),\lambda)] &= -2\,r_k^T J_k s_k(\lambda) - \|J_k s_k(\lambda)\|^2 - \lambda\, s_k(\lambda)^T M_k s_k(\lambda) \\ &= -g_k^T s_k(\lambda), \end{aligned} \tag{17.17}$$

où l'on a utilisé $g_k = J_k^T r_k$ et (17.14) pour obtenir la dernière égalité. Comme g_k est supposé non nul au cours de l'itération (l'algorithme s'arrête dès qu'il trouve un point stationnaire de f) et que $s_k(\lambda)$ minimise $\varphi_k(\cdot,\lambda)$, le dénominateur de ρ_k est strictement positif. En effet, par (17.14), $s_k(\lambda)$ est non nul lorsque $g_k \neq 0$ et comme $s_k(\lambda)$ est l'unique point qui minimise le critère de (17.15), on a nécessairement

$\varphi_k(s_k(\lambda),\lambda) < \varphi_k(0,\lambda) = f(x_k)$. Au passage, nous avons montré que, quel que soit $\lambda > 0$,

$$g_k^T s_k(\lambda) < 0.$$

Alors, si le rapport $\rho_k(\lambda)$ est supérieur à un seuil préfixé $\eta_1 \in \mathbb{R}$, l'on a grâce à (17.17)

$$f(x_k + s_k(\lambda)) \leqslant f(x_k) + \eta_1\, g_k^T s_k(\lambda), \tag{17.18}$$

qui rappelle la condition de décroissance suffisante (6.9) utilisée en recherche linéaire, sauf qu'ici le pas α_k est intégré à $s_k(\lambda)$. On considère qu'une décroissance suffisante de f est obtenue lorsque cette inégalité est vérifiée pour un certain $\lambda > 0$ (cet considération sera validée par le résultat de convergence ci-dessous) et on accepte $s_k(\lambda)$ comme déplacement de l'itération k. Dans le cas contraire, tant que l'inégalité ci-dessus n'est pas vérifiée, on augmente λ, on résout à nouveau (17.14) (on montrera par la proposition 17.8 que cette procédure se conclut en un nombre fini d'étapes).

Nous avons à présent sous la main et à l'esprit, tous les éléments permettant d'énoncer et de comprendre *une itération* de l'algorithme de LMM, dans la version d'Osborne [421]. On suppose qu'au début de l'itération k, l'on dispose d'un itéré $x_k \in \mathbb{R}^n$, d'un multiplicateur $\lambda_{k-1} > 0$ et d'une matrice $M_k \in \mathcal{S}^n_{++}$. L'itéré x_k et le multiplicateur λ_{k-1} sont mis à jour par l'itération et une nouvelle matrice M_k pourra être choisie en fin d'itération. Par constante, la description ci-dessous entend une valeur qui ne dépend pas de l'itération.

Algorithme 17.7 (Levenberg-Morrison-Marquardt revisité)
L'algorithme utilise les constantes suivantes : $0 < \tau_1 < 1 < \tau_2$ pour la mise à jour de λ_{k-1} et $0 < \eta_1 \leqslant \eta_2 < 1$ comme seuils de satisfaction de la décroissance de f.

1. *Test d'arrêt.* Si $J_k^T r_k \simeq 0$, arrêt de l'algorithme.
2. *Déplacement.* Prendre $\lambda_{k,0} := \lambda_{k-1}$ et répéter les opérations suivantes pour $i \in \mathbb{N}$ jusqu'à satisfaction du test de sortie (17.20).
   2.1. Calculer la solution $s_{k,i}$ du système linéaire
   $$\left(J_k J_k^T + \lambda_{k,i} M_k\right) s_{k,i} = -J_k^T r_k, \tag{17.19}$$
   2.2. Si
   $$f(x_k + s_{k,i}) \leqslant f(x_k) + \eta_1 g_k^T s_{k,i}, \tag{17.20}$$
   sortir de la boucle courante avec $s_k := s_{k,i}$ (on va à l'étape 3), sinon $\lambda_{k,i+1} = \tau_2 \lambda_{k,i}$.
3. *Nouveau facteur de pénalisation.* Si
   $$f(x_k + s_k) \geqslant f(x_k) + \eta_2 g_k^T s_k,$$
   $\lambda_k := \lambda_{k,i}$, sinon $\lambda_k = \tau_1 \lambda_{k,i}$.
4. *Nouvel itéré.* $x_{k+1} := x_k + s_k$.
5. *Nouvelle matrice.* Choix de $M_{k+1} \in \mathcal{S}^n_{++}$.

Voici quelques remarques sur cet algorithme.

- Le coût de cet algorithme est principalement lié au nombre de systèmes linéaires (17.19) qu'il faut résoudre.
- Typiquement, on prendra $\eta_1 \simeq 10^{-4}$, comme pour la constante ω_1 de (6.9) en recherche linéaire.
- L'étape 3 et la constante η_2 ne jouent pas de rôle dans la convergence mais sont introduites pour ne pas imposer la croissance de la suite $\{\lambda_k\}$, ce qui ne serait pas adéquat (le premier multiplicateur λ_1 choisi peut être trop grand et donc conduire à des déplacements s_k trop petits, ce qui ralentirait la convergence).
- Au lieu de régler λ_k, certains auteurs [523] préfèrent prendre le multiplicateur de la forme $\lambda_k = \mu_k \|r_k\|^\delta$, avec $\delta \geqslant 0$ ($\delta = 0$ dans notre cas), et ajuster μ_k au lieu de λ_k à chaque itération.

Le caractère *bien défini* de l'algorithme de LMM, c'est-à-dire le fait qu'il sorte de la boucle de l'étape 2 en un nombre fini de cycles, est suggéré par la discussion qui précède son énoncé. Avec la proposition suivante, nous le montrons de manière rigoureuse.

Proposition 17.8 (descente suffisante) *Si f est différentiable en x_k avec un gradient $g_k \neq 0$, si $M_k \in \mathcal{S}^n_{++}$ et si $\eta_1 < 1$, alors (17.18) est vérifiée pour tout λ suffisamment grand. En particulier, l'algorithme 17.7 est bien défini.*

Démonstration. Observons d'abord que $s_k(\lambda) \to 0$ avec $s_k(\lambda) \neq 0$ lorsque $\lambda \to \infty$. En effet, selon (17.14), $s_k(\lambda)$ est non nul parce que $g_k \neq 0$. Sa convergence vers zéro est due au fait que $s_k(\lambda)$ minimise $\varphi_k(\cdot, \lambda)$ et donc

$$0 \leqslant \frac{\lambda}{2} s_k(\lambda)^T M_k s_k(\lambda) \leqslant \varphi_k(s_k(\lambda), \lambda) \leqslant \varphi_k(0, \lambda) = f(x_k).$$

En divisant les membres extrêmes par $\lambda > 0$ et en faisant tendre $\lambda \to \infty$, on voit que $s_k(\lambda)^T M_k s_k(\lambda) \to 0$ et donc $s_k(\lambda) \to 0$, car $M_k \in \mathcal{S}^n_{++}$.

Montrons maintenant que $s_k(\lambda)/\|s_k(\lambda)\| \to -M_k^{-1} g_k / \|M_k^{-1} g_k\|$ lorsque $\lambda \to \infty$. En effet, d'après (17.14) et $s_k(\lambda) \to 0$, on voit que $\lambda M_k s_k(\lambda) \to -g_k$, ce qui implique que $\lambda s_k(\lambda) \to -M_k^{-1} g_k$ et donc $s_k(\lambda)/\|s_k(\lambda)\| \to -M_k^{-1} g_k / \|M_k^{-1} g_k\|$.

On raisonne maintenant par l'absurde en supposant que (17.18) n'est pas vérifiée pour une suite de $\lambda \to \infty$. Alors pour ces $\lambda \to \infty$, on a

$$\frac{f(x_k + s_k(\lambda)) - f(x_k) - g_k^T s_k(\lambda)}{\|s_k(\lambda)\|} > (1 - \eta_1) \frac{-g_k^T s_k(\lambda)}{\|s_k(\lambda)\|}.$$

Par la différentiabilité de f en x_k, le membre de gauche tend vers zéro. Par le paragraphe précédent, le membre de droite tend vers $(1 - \eta_1) g_k^T M_k^{-1} g_k / \|M_k^{-1} g_k\|$, qui est strictement positif. On a obtenu la contradiction souhaitée. □

Convergence globale et complexité itérative

On pourrait penser que le surcout de l'algorithme 17.7, dû au besoin de devoir résoudre un nouveau système linéaire (17.19) chaque fois que l'inégalité de décroissance suffisante (17.20) n'est pas vérifiée, est trop important et qu'il serait préférable

de faire de la recherche linéaire bien moins coûteuse le long de la première direction $s_{k,0}$ calculée si celle-ci n'est pas acceptée par (17.20). C'est ce que propose de faire certains auteurs. Cependant, l'algorithme décrit a l'avantage d'avoir un résultat de convergence globale, sans requérir l'injectivité uniforme des J_k, alors que celle-ci est requise par l'algorithme de Gauss-Newton (théorème 17.6). Seule intervient la bornitude de la suite $\{(J_k, M_k)\}$ (la bornitude de $\{M_k\}$ peut-être contrôlée par un choix d'implémentation de l'algorithme, mais pas celle de $\{J_k\}$ qui dépend du problème considéré). Comme annoncé dans la description de l'algorithme, sans hypothèse supplémentaire, sa convergence s'exprime en termes du gradient $g_k = J_k^T r_k$.

Le résultat qui demande le moins d'hypothèse est le suivant. Il suppose qu'une suite est générée par l'algorithme de LMM et donc que celui-ci ne trouve pas un point stationnaire de f en un nombre fini d'itérations.

Théorème 17.9 (convergence de l'algorithme LMM) *Supposons que la fonction de moindres-carrés f soit différentiable. Soit $\{(x_k, \lambda_k)\}$ une suite générée par l'algorithme 17.7. Alors,*

1) *$\{f(x_k)\}$ converge,*
2) *pour toute partie infinie $\mathcal{K}$ de $\mathbb{N}$ telle que $\{(J_k, M_k)\}_{k\in\mathcal{K}}$ est bornée, on a $\{J_k^T r_k\}_{k\in\mathcal{K}} \to 0$ lorsque $k \to \infty$ dans $\mathcal{K}$.*

Démonstration. 1) La convergence de la suite $\{f(x_k)\}$ découle de sa décroissance et du fait qu'elle est bornée inférieurement (par zéro).

2) D'après l'inégalité (17.20) et la convergence de $f(x_k)$, on a

$$g_k^T s_k \to 0, \qquad \text{lorsque } k \to \infty. \tag{17.21}$$

Il s'agit à présent de montrer que la convergence dans (17.21) est due à un gradient g_k qui tend vers zéro et pas à la convergence de s_k vers zéro (qui a probablement aussi lieu). D'après (17.14) et la semi-définie positivité de M_k,

$$-g_k^T s_k = \|J_k s_k\|^2 + \lambda_k s_k^T M_k s_k = \|J_k s_k\|^2 + \lambda_k \|M_k^{1/2} s_k\|^2.$$

On déduit alors de (17.21) et de la positivité de λ_k que

$$J_k s_k \to 0 \quad \text{et} \quad \lambda_k M_k^{1/2} s_k \to 0, \qquad \text{lorsque } k \to \infty.$$

Dès lors, si $\{(J_k, M_k)\}_{k\in\mathcal{K}}$ est bornée, on a

$$J_k^T J_k s_k \to 0 \quad \text{et} \quad \lambda_k M_k s_k \to 0, \qquad \text{lorsque } k \to \infty \text{ dans } \mathcal{K}.$$

La définition (17.14) de l'itération implique maintenant que $g_k \to 0$ lorsque $k \to \infty$ dans $\mathcal{K}$. □

Pour avoir des résultats plus forts, on a besoin d'un peu plus de régularité sur f, à savoir le caractère lipschitzien de sa dérivée, et sur les matrices M_k, à savoir leur uniforme définie positivité. On peut alors montrer, dans un premier temps, que la suite $\{\lambda_k\}$ des multiplicateurs est bornée.

Lemme 17.10 (CS pour avoir des multiplicateurs bornés) *Supposons que la fonction de moindres-carrés f soit $\mathcal{C}^{1,1}_L$ et qu'il existe une constante β_M telle que pour tout k on ait $\|M_k^{-1}\| \leqslant \beta_M$. Alors, pour tout $k \geqslant 1$, on a*

$$\lambda_k \leqslant \beta_\lambda := \max\left(\lambda_0, \frac{\tau_2 \beta_M L}{1-\eta_1}\right). \tag{17.22}$$

Démonstration. Il suffit de trouver une borne supérieure pour les multiplicateurs λ_k tels que $\hat{\lambda}_k = \lambda_k/\tau_2$ n'a pas été accepté par l'inégalité de décroissance suffisante (17.20). Les autres multiplicateurs sont en effet plus petits que ces derniers ou que λ_0. Si l'on note $\hat{s}_k := s_k(\hat{\lambda}_k)$, on a $f(x_k + \hat{s}_k) > f(x_k) + \eta_1 g_k^T \hat{s}_k$ et donc

$$\frac{f(x_k+\hat{s}_k) - f(x_k) - g_k^T\hat{s}_k}{\|\hat{s}_k\|^2} > (1-\eta_1)\frac{-g_k^T\hat{s}_k}{\|\hat{s}_k\|^2}. \tag{17.23}$$

Le théorème des accroissements finis (corollaire C.13) et la L-lipschitzianité de f conduisent à la majoration suivante

$$|f(x_k+\hat{s}_k) - f(x_k) - g_k^T\hat{s}_k| \leqslant \left(\sup_{t\in]0,1[} \|\nabla f(x_k + t\hat{s}_k) - \nabla f(x_k)\|\right)\|\hat{s}_k\| \leqslant L\|\hat{s}_k\|^2.$$

Dès lors, le membre de gauche de l'inégalité (17.23) est majoré par L. Le membre de droite de cette même inégalité (17.23) peut être minoré en observant que $(J_k^T J_k + \hat{\lambda}_k M_k)\hat{s}_k = -g_k$ et donc que

$$-g_k\hat{s}_k = \hat{s}_k^T(J_k^T J_k + \hat{\lambda}_k M_k)\hat{s}_k \geqslant \hat{\lambda}_k \beta_M^{-1}\|\hat{s}_k\|^2.$$

L'inégalité (17.23) permet donc d'écrire

$$L > (1-\eta_1)\beta_M^{-1}\hat{\lambda}_k,$$

ce qui donne la majoration (17.22), puisque $\hat{\lambda}_k = \lambda_k/\tau_2$. □

On aurait pu affaiblir une hypothèse du résultat précédent en n'exigeant le caractère $\mathcal{C}^{1,1}_L$ de f que sur un voisinage suffisamment étendu de l'ensemble de sous-niveau $\mathcal{N}_1 := \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leqslant f(x_1)\}$, auquel appartiennent les itérés x_k, pour que tous les points rejetés $x_k + \hat{s}_k$ (voir la démonstration) y soient contenus. Ce soin apporté à la démonstration est présent dans [522].

En bref, le résultat suivant nous apprend que, sans avoir besoin de l'injectivité uniforme de $\{J_k\}$ ce qui est à comparer avec le théorème 17.6 sur la convergence de l'algorithme de Gauss-Newton, la complexité itérative de l'algorithme 17.7 de LMM est au pire en $O(\varepsilon^{-2})$, qui est la complexité itérative des algorithmes du gradient (proposition 6.8) et de Gauss-Newton (théorème 17.6), ce qui veut dire que l'on peut obtenir un gradient g_k de norme inférieure à un seuil $\varepsilon > 0$ arbitraire en moins de $O(\varepsilon^{-2})$ itérations. C'est une borne très grande, mais elle a l'intérêt de ne pas dépendre de la dimension du problème. Lorsque la suite générée $\{J_k^T\}$ est uniformément

injective, la situation devient beacoup plus favorable, puisqu'alors la suite $\{f(x_k)\}$ converge linéairement vers zéro et la complexité itérative est en $O(\log \varepsilon^{-1})$.

Théorème 17.11 (complexité itérative de l'algorithme LMM) *Supposons que la fonction de moindres-carrés f soit $\mathcal{C}^{1,1}$. Soit $\{(x_k, \lambda_k)\}$ une suite générée par l'algorithme 17.7. On suppose en outre que la suite $\{(J_k, M_k, M_k^{-1})\}$ est bornée. Alors,*

1) *il existe une constante C, indépendante de n et m, telle que, pour tout $\varepsilon > 0$, $\|J_k^T r_k\| \leqslant \varepsilon$ pour un indice k inférieur à $\lceil C\varepsilon^{-2} \rceil$,*
2) *si, de plus, $\{J_k^T\}$ est uniformément injective, alors*
   a) *$f(x_k) \to 0$ linéairement,*
   b) *il existe une constante $C' > 0$, indépendante de n et m, telle que, pour tout $\varepsilon > 0$, $\|r_k\| \leqslant \varepsilon \|r_0\|$ pour tout indice $k \geqslant \lceil C' \log \varepsilon^{-1} \rceil$.*

Démonstration. 1) En sommant les K premières inégalités (17.20), on obtient

$$-\eta_1 \sum_{k=1}^{K} g_k^T s_k \leqslant f(x_1) - f(x_{K+1}) \leqslant f(x_1) - f_*.$$

où $f_* := \min_k f(x_k)$. Comme dans la démonstration du théorème 17.9, $-g_k^T s_k = \|J_k s_k\|^2 + \lambda_k \|M_k^{1/2} s_k\|^2$ et donc, par la positivité de λ_k, l'inégalité précédente apporte les majorations suivantes

$$\sum_{k=1}^{K} \|J_k s_k\|^2 \leqslant \frac{f(x_1) - f_*}{\eta_1} \quad \text{et} \quad \sum_{k=1}^{K} \lambda_k \|M_k^{1/2} s_k\|^2 \leqslant \frac{f(x_1) - f_*}{\eta_1}.$$

Soient β_J un majorant de $\{\|J_k\|\}$, β_M un majorant de $\{\|M_k\|\}$ et β_λ un majorant de $\{\|\lambda_k\|\}$, que existent par hypothèse et par le lemme 17.10. Il vient

$$\sum_{k=1}^{K} \|J_k^T J_k s_k\|^2 \leqslant \frac{\beta_J^2 [f(x_1) - f_*]}{\eta_1} \quad \text{et} \quad \sum_{k=1}^{K} \lambda_k^2 \|M_k s_k\|^2 \leqslant \frac{\beta_\lambda \beta_M [f(x_1) - f_*]}{\eta_1}.$$

Par ailleurs,

$$\begin{aligned} \|g_k\|^2 &= \|J_k^T J_k s_k + \lambda_k M_k s_k\|^2 && [(17.14)] \\ &\leqslant \left(\|J_k^T J_k s_k\| + \lambda_k \|M_k s_k\|\right)^2 && [\text{inégalité triangulaire}] \\ &\leqslant 2\left(\|J_k^T J_k s_k\|^2 + \lambda_k^2 \|M_k s_k\|^2\right) && [(a+b)^2 \leqslant 2(a^2+b^2)]. \end{aligned} \quad (17.24)$$

Avec les majorations précédentes, on trouve que

$$K \left(\min_{k \in [1:K]} \|g_k\|^2 \right) \leqslant \sum_{k=1}^{K} \|g_k\|^2 \leqslant 2(\beta_J^2 + \beta_\lambda \beta_M) \frac{f(x_1) - f_*}{\eta_1}.$$

Dès lors, $\min\{\|g_k\| : k \in [1:K]\}$ est plus petit qu'un $\varepsilon > 0$ arbitraire donné, dès que le membre de droite ci-dessus est inférieur à $K\varepsilon^2$, ce qui s'écrit

$$K \geqslant K_\varepsilon := \left\lceil 2\varepsilon^{-2}(\beta_J^2 + \beta_\lambda \beta_M)\frac{f(x_1) - f_*}{\eta_1} \right\rceil .$$

On a donc montré qu'un des $\|g_k\|$, avec $k \leqslant K_\varepsilon$, est inférieur à ε.

2) On part de (17.20) :

$$f(x_{k+1}) \leqslant f(x_k) + \eta_1 g_k^\mathsf{T} s_k \leqslant f(x_k) - C_1 \|g_k\|^2, \tag{17.25}$$

où la dernière inégalité provient de

$$\begin{aligned}
\|g_k\|^2 &\leqslant 2\left(\|J_k^\mathsf{T} J_k s_k\|^2 + \lambda_k^2 \|M_k s_k\|^2\right) && [(17.24)] \\
&\leqslant 2\beta_J^2 \|J_k s_k\|^2 + 2\beta_\lambda \beta_M \lambda_k s_k^\mathsf{T} M_k s_k && [\|J_k^\mathsf{T}\| \leqslant \beta_J,\ \|M_k\| \leqslant \beta_M] \\
&\leqslant (\eta_1/C_1)(\|J_k s_k\|^2 + \lambda_k s_k^\mathsf{T} M_k s_k) && [C_1 := \eta_1 \max(2\beta_J^2, 2\beta_\lambda \beta_M)^{-1}] \\
&= -(\eta_1/C_1) g_k^\mathsf{T} s_k && [(17.14)]
\end{aligned}$$

On poursuit comme dans la démonstration du point 3 du théorème 17.6 : $\|g_k\|^2 = \|J_k^\mathsf{T} r_k\|^2 \geqslant (\alpha'_J)^2 \|r_k\|^2 = 2(\alpha'_J)^2 f(x_k)$ par l'injectivité uniforme de J_k^T, si bien que (17.25) devient

$$f(x_{k+1}) \leqslant (1 - C_2) f(x_k),$$

pour la constante strictement positive $C_2 = 2C_1(\alpha'_J)^2$. Ceci montre la convergence linéaire de $f(x_k)$ vers zéro (point 2.a). Puis par récurrence,

$$\frac{f(x_k)}{f(x_0)} \leqslant (1 - C_2)^k.$$

Dès lors, $\|r_k\| \leqslant \varepsilon \|r_0\|$ si $f(x_k)/f(x_0) \leqslant \varepsilon^2$ et donc certainement si le membre de droite ci-dessus est inférieur à ε^2 :

$$(1 - C_2)^k \leqslant \varepsilon^2.$$

En prenant les logarithmes et en tenant compte du fait que $\log(1 - C_2) < 0$, on obtient comme condition sur k :

$$k \geqslant \frac{2 \log \varepsilon^{-1}}{\log(1 - C_2)^{-1}}.$$

On obtient donc le résultat du point 2.b avec la constante $C' := 2/\log(1 - C_2)^{-1}$. □

17.4 Recherche de solution parcimonieuse ▲ ⊖

Voir le syllabus complet.

Notes

La méthode des moindres-carrés pour l'identification de paramètres a été proposée par Gauss. Cette approche lui permit de déterminer l'orbite de la planète Cérès en

1801 [54], découverte fortuitement la même année par Piazzi. Cette méthode fut introduite indépendamment par Legendre dans ses « *Nouvelles méthodes pour la détermination des orbites des comètes* » en 1806 et celui-ci a un temps revendiqué cette découverte. Il s'est finalement avéré que Gauss fut le premier à en avoir fait l'exposition, mais dans des notes non publiées datant de 1799. La première référence de Gauss traitant de ce sujet est sa « *Theoria motus corporum coelestium* » de 1809 [257]. D'autres éléments historiques sont relatés par Goldstine [246 ; 1977].

Les problèmes de moindres-carrés linéaires et leurs techniques de résolution sont passés en revue dans les livres et monographies de Hanson et Lawson [284] et de Björck [53, 54]. Autres ouvrages sur l'estimation de paramètres par moindres-carrés : Bard [32 ; 1974] ; Arnold et Beck [19 ; 1977]. Mentionnons aussi la technique de régularisation de ces problèmes due à Tikhonov [516 ; 1963]. Les *problèmes de moindres-carrés linéaires totaux* sont passés en revue par Van Huffel et Vandewalle [300].

Le résultat de complexité en $O(\log \varepsilon^{-1})$ des théorèmes 17.6 et 17.11 a été obtenu en reprenant un argument de [523] pour l'algorithme de Levenberg-Morrison-Marquardt, mais qui peut aussi s'utiliser pour l'analyse de l'algorithme de Gauss-Newton.

L'algorithme de Levenberg-Morrison-Marquardt (LMM) présenté et étudié à la section 17.3.3 a été proposé par Levenberg [361 ; 1944], avec des notations qui rendent son texte difficile à suivre aujourd'hui ; l'article ne donne pas de résultat de convergence. Si l'on en croît le titre de son article non publié dans une revue et donc difficilement accessible, cette dernière semble avoir été donnée par Morrison [405 ; 1960]. L'approche fut ensuite redécouverte et analysée par Marquardt [377 ; 1963]. La détermination du paramètre de pénalisation présentée ici est due à Osborne [421 ; 1976]. Le résultat de convergence globale (théorème 17.9) que nous donnons est plus fort que celui travaillé dans [421], car il ne requiert pas la bornitude de $\{\lambda_k\}$, ni d'hypothèse entraînant celle-ci. La complexité itérative de l'algorithme de LMM a été étudiée dans [522, 523] ; l'analyse que nous en donnons dans la démonstration du théorème 17.11 nous semble plus rapide et est directement inspirée de celle sur la complexité itérative de l'algorithme du gradient (proposition 6.8). Pour d'autres approches et contributions, voir [399, 563] et leurs références.

Exercices

17.1. *Problème de moindres-carrés linéaire régularisé.* Soient $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ deux espaces vectoriels normés de dimension finie et de normes notées $\|\cdot\|_{\mathbb{E}}$ et $\|\cdot\|_{\mathbb{F}}$ respectivement, $A : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ une application linéaire et $b \in \mathbb{F}$. On considère le problème

$$(P) \quad \inf_{x \in \mathbb{E}} \|Ax - b\|_{\mathbb{F}}$$

et sa version régularisée

$$(P_\varepsilon) \quad \inf_{x \in \mathbb{E}} \|Ax - b\|_{\mathbb{F}}^{\alpha} + \varepsilon \|x\|_{\mathbb{E}}^{\beta},$$

où $\alpha > 0$, $\beta > 0$ et $\varepsilon > 0$.

1) (P) a une solution.
2) (P_ε) a une solution. On en sélectionne une, notée $\bar{x}_\varepsilon$.
3) Lorsque $\varepsilon \to \infty$, $\bar{x}_\varepsilon \to 0$.

4) Lorsque $\varepsilon \downarrow 0$, $\|\bar{x}_\varepsilon\|_{\mathbb{E}}$ croît ; la suite $\{\bar{x}_\varepsilon\}_{\varepsilon\downarrow 0}$ est bornée et ses points d'adhérence sont solutions de $\min\{\|x\|_{\mathbb{E}} : x \in S\}$, où S est l'ensemble des solutions de (P).
5) Si $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ sont euclidiens, si $\|\cdot\|_{\mathbb{E}}$ et $\|\cdot\|_{\mathbb{F}}$ sont associées à un produit scalaire, si $\alpha = \beta = 2$, alors
   - (P_ε) a une solution unique,
   - $\varepsilon\bar{x}_\varepsilon$ converge vers A^*b si $\varepsilon \to \infty$ (A^* est l'opérateur adjoint de $A : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$) et si, de plus, $A^*b \neq 0$, alors $\bar{x}_\varepsilon/\|\bar{x}_\varepsilon\| \to A^*b/\|A^*b\|$ (où $\|\cdot\|$ est une norme quelconque),
   - $\bar{x}_\varepsilon$ converge vers la solution de norme minimale de (P) si $\varepsilon \downarrow 0$.

17.2. *Problème de moindres-carrés linéaire sous région de confiance.* Soient $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ une matrice, $b \in \mathbb{R}^m$ et $\Delta > 0$. On considère le problème suivant

$$\begin{cases} \min \|Ax - b\| \\ \|x\| \leqslant \Delta. \end{cases} \tag{17.26}$$

dans lequel $\|\cdot\|$ désigne la norme euclidienne sur $\mathbb{R}^m$ ou $\mathbb{R}^n$.

1) Montrez que le problème (17.26) a une solution.
2) *Justifiez* et *écrivez* les conditions d'optimalité de Karush, Kuhn et Tucker de (17.26) (de manière à rendre le calcul plus aisé, on pourra élever certaines quantités au carré). Montrez que ces conditions sont nécessaires et suffisantes pour l'optimalité.
3) Montrez que l'on peut trouver une solution de (17.26) qui soit dans $\mathcal{R}(A^{\mathsf{T}})$.
4) Montrez que (17.26) a une unique solution si, et seulement si,

$$\bar{B}(0,\Delta) \cap \{x : A^{\mathsf{T}}(Ax - b) = 0\} \text{ a au plus un élément.}$$

On a noté $\bar{B}(0,\Delta)$ la boule fermée de centre 0 et de rayon Δ pour la norme euclidienne.

17.3. *Approximation de Tchebychev d'un système linéaire surdéterminé* [75 ; ex. 5.6]. Soient A une matrice de type $m \times n$ et $b \in \mathbb{R}^m$. On considère le problème d'*approximation au sens de Tchebychev* ou en norme ℓ_∞ suivant :

$$v_{\text{tch}} := \min_{x\in\mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_\infty. \tag{17.27}$$

Le problème (17.27) n'a pas nécessairement une unique solution, mais il en a au moins une, d'où l'utilisation du « min ».

1) Montrez que le problème (17.27) a une solution.

On ne connait pas d'expression analytique de v_{tch}, ni a fortiori l'expression analytique des solutions de (17.27), alors que les solutions du problème de moindres-carrés sont connues. En particulier, on connait la forme de ses solutions x_{mc} et son résidu optimal

$$r_{\text{mc}} := Ax_{\text{mc}} - b.$$

Il est donc naturel de chercher à savoir si ce résidu permet d'estimer v_{tch} et plus précisément d'en donner une borne inférieure (positive bien sûr).

2) Montrez que

$$\frac{1}{\sqrt{m}} \|r_{\text{mc}}\|_\infty \leqslant v_{\text{tch}}. \tag{17.28}$$

On montre maintenant que la dualité permet de resserrer cette estimation de v_{tch}.

3) Montrez dans quel sens on peut considérer que le problème

$$\max_{\substack{y\in\mathbb{R}^m \\ \|y\|_1\leqslant 1 \\ A^\mathsf{T}y=0}} b^\mathsf{T}y \tag{17.29}$$

est dual du problème (17.27). Montrez que (17.29) a une solution.

4) On suppose ici que $r_{\mathrm{mc}} \neq 0$ (dans le cas contraire, $v_{\mathrm{tch}} = 0$ et il n'y a donc pas lieu de trouver un minorant strictement positif de v_{tch}). En choisissant bien un point admissible du problème dual (17.29), montrez que l'on a

$$\frac{\|r_{\mathrm{mc}}\|_2^2}{\|r_{\mathrm{mc}}\|_1} \leqslant v_{\mathrm{tch}}.$$

Montrez que ce minorant est meilleur que celui donné en (17.28).

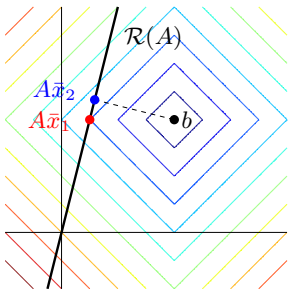
17.4. *Meilleure résolution d'un système linéaire non réalisable.* On considère le problème d'optimisation en $x \in \mathbb{R}^n$ suivant

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

où $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$ et $\|\cdot\|$ est une norme *quelconque* sur $\mathbb{R}^m$. On note $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ la fonction *convexe* définie en $x \in \mathbb{R}^n$ par $f(x) = \|Ax - b\|$.

1) Montrez que le sous-différentiel de f en $x \in \mathbb{R}^n$, pour le produit scalaire euclidien, s'écrit
$$\partial f(x) = \{A^\mathsf{T}y : \|y\|_{\mathrm{D}} \leqslant 1,\ y^\mathsf{T}(Ax - b) = \|Ax - b\|\}, \tag{17.30}$$
où $\|\cdot\|_{\mathrm{D}}$ désigne la norme duale de $\|\cdot\|$ pour le produit scalaire euclidien.
2) Montrez dans quel sens on peut considérer le problème (D) ci-dessous comme un problème dual min-max (section 13.1.1) de (P) :
$$(D) \qquad \begin{cases} \sup_{y\in\mathbb{R}^m} b^\mathsf{T}y \\ A^\mathsf{T}y = 0 \\ \|y\|_{\mathrm{D}} \leqslant 1. \end{cases}$$
3) Montrez que (P) et (D) ont une solution et qu'il n'y a pas de saut de dualité.
4) Montrez que l'ensemble des solutions de (P) s'écrit
$$\mathrm{Sol}(P) = C + \mathcal{N}(A),$$
où C est le convexe $\{x \in \mathcal{R}(A^\mathsf{T}) : \|Ax - b\| = \mathrm{val}(P)\}$ et que C est réduit à un point lorsque $\|\cdot\|$ est la norme ℓ_2 de $\mathbb{R}^m$.
5) Montrez que, lorsque la norme utilisée dans (P) est la norme ℓ_1, le problème (P) peut s'écrire comme un problème d'optimisation linéaire.

Remarque. Si $\|\cdot\|$ est la norme ℓ_1, en résolvant (P), on cherche à satisfaire exactement le plus grand nombre possible d'équations scalaires du système $Ax = b$ (qui est éventuellement non réalisable), tout en minimisant l'erreur $\|Ax - b\|_1$, sans savoir a priori quelles sont ces équations scalaires qui peuvent être résolues exactement. Ceci est illustré en dimension $m = 2$ à la figure ci-jointe. On voit que la solution $\bar{x}_1$, obtenue avec la norme ℓ_1 rend la seconde composante de $A\bar{x}_1$ égale à celle de b, donc la seconde équation du système, c'est-à-dire $(A\bar{x}_1 - b)_2 = 0$, est vérifiée. Par contre, la solution $\bar{x}_2$, obtenue avec la norme ℓ_2, rend toutes les composantes de $A\bar{x}_2$ différentes de celles de b. Par ailleurs, la résolution en norme ℓ_2, qui ne demande que la résolution d'un système linéaire, est moins coûteuse que la résolution en norme ℓ_1, laquelle requiert la résolution d'un problème d'optimisation linéaire.



Annexes

A Analyse ▲

A.1 Topologie

During the 20th century, real and complex analysis relied heavily on the concepts of open set, closed set, and limit point of a set. The earliest idea was that of the limit point of a set, due to Weierstrass, while that of a closed set (due to Cantor) arose somewhat later. The idea of an open set came latest of all. The very slow diffusion of the concept of open set is surprising in view of its importance now.

G. H. Moore [397 ; 2008].

Une *topologie* sur un ensemble $\mathbb{E}$ est une famille de parties de $\mathbb{E}$, appelées *ouverts*, vérifiant les propriétés suivantes : (i) $\mathbb{E}$ et l'ensemble vide (noté $\varnothing$) sont des ouverts, (ii) une intersection finie d'ouverts est un ouvert et (iii) une réunion quelconque d'ouverts est un ouvert. Un *espace topologique* $\mathbb{E}$ est un ensemble $\mathbb{E}$ muni d'une topologie.

Une partie d'un espace topologique $\mathbb{E}$ est un *fermé* si son complémentaire est ouvert. Par complémentarité des propriétés axiomatiques des ouverts, on voit que $\mathbb{E}$ et $\varnothing$ sont aussi des fermés, qu'une réunion finie de fermés est un fermé et qu'une intersection quelconque de fermés est un fermé.

Un *voisinage* d'un point $x \in \mathbb{E}$ est une partie V de $\mathbb{E}$ qui contient un ouvert contenant x. Une partie est ouverte si, et seulement si, elle est voisinage de tous ses points (c'est une caractérisation souvent utilisée). On dit qu'une topologie est *séparée* si deux points distincts quelconques de $\mathbb{E}$ ont des voisinages disjoints (d'intersection vide). Dans une topologie séparée, les singletons sont des fermés.

Une *suite* d'un ensemble $\mathbb{E}$ est une application de l'ensemble des entiers $\mathbb{N}$ dans $\mathbb{E}$, $k \in \mathbb{N} \mapsto x_k \in \mathbb{E}$, que l'on désigne souvent par son image $\{x_k\}_{k\in\mathbb{N}}$ ou simplement $\{x_k\}$. On dit qu'une suite $\{x_k\}_{k\in\mathbb{N}}$ de $\mathbb{E}$ *converge* vers $x \in \mathbb{E}$, ou encore que x est *limite* de cette suite, si pour tout voisinage V de x, il existe un indice $k_V \in \mathbb{N}$, tel que pour tout $k \geqslant k_V$, on ait $x_k \in V$. On peut exprimer cela en utilisant des quantificateurs :

$$\forall\, V \text{ voisinage de } x, \quad \exists\, k_V \in \mathbb{N}, \quad \forall\, k \geqslant k_V : \qquad x_k \in V.$$

Dans une topologie séparée, les suites ont au plus une limite. Un exemple trivial de suite convergente est une *suite stationnaire* qui, par définition, est telle que $x_{k+1} = x_k$ pour tout indice k supérieur à un indice donné.

L'*intérieur* d'une partie A de $\mathbb{E}$, notée A° ou $\mathrm{int}(A)$, est la réunion de tous les ouverts contenus dans A. C'est donc un ouvert et même le plus grand ouvert contenu

dans A. L'*adhérence* d'une partie A de $\mathbb{E}$, notée $\overline{A}$ ou $\mathrm{adh}(A)$, est l'intersection de tous les fermés contenant A. C'est donc un fermé et même le plus petit fermé contenant A. Un point est dans l'adhérence de A si, et seulement si, tout voisinage de ce point rencontre A. On dit qu'une partie A de $\mathbb{E}$ est *dense* dans $\mathbb{E}$ si $\overline{A} = \mathbb{E}$. La *frontière* d'une partie A de $\mathbb{E}$, notée ∂A, est l'ensemble des points de $\overline{A}$ qui ne sont pas dans A° : $\partial A = \overline{A} \setminus A^\circ$.

Si $\mathbb{E}_0$ est une partie d'un espace topologique $\mathbb{E}$, on peut mettre une topologie sur $\mathbb{E}_0$ à partir de celle de $\mathbb{E}$. On appelle *topologie induite* de $\mathbb{E}_0$, celle qui est définie comme suit : on dit qu'une partie de $\mathbb{E}_0$ est ouverte dans $\mathbb{E}_0$ si elle est l'intersection avec $\mathbb{E}_0$ d'un ouvert de $\mathbb{E}$.

A.2 Compacité

Pour étudier un problème, on est souvent amené à examiner une suite de problèmes « voisins », plus faciles à traiter. On pourra étendre les propriétés de ces problèmes au problème original si le passage à la limite peut se faire. La notion de compacité est très utile dans ce cas car elle permet d'extraire des sous-suites convergentes à partir de suites bornées (en tout cas dans les espaces normés), facilitant ainsi le passage à la limite.

On dit qu'un espace topologique $\mathbb{E}$ est *compact* s'il est séparé et si la *propriété de Heine-Borel-Lebesgue* suivante est vérifiée : de tout recouvrement de $\mathbb{E}$ par des ouverts on peut extraire un sous-recouvrement fini. Une partie d'un espace topologique est dite *compacte* si, munie de la topologie induite, cet ensemble est compact. La propriété de Heine-Borel-Lebesgue ne donne pas une idée claire de ce qu'est un compact, mais c'est un outil très utile pour démontrer la compacité d'un espace topologique. Ce seront plutôt les propriétés qu'ont les ensembles compacts qui permettront de se familiariser avec le concept de compacité.

Une partie compacte est fermée [obtenir un recouvrement en utilisant la propriété de séparation entre les points de cette partie et un point qui ne lui appartient pas]. Un fermé dans un espace compact est aussi compact (pour la topologie induite) [c'est clair en utilisant la propriété de Heine-Borel-Lebesgue].

On dit que x est un *point d'accumulation* d'une suite $\{x_k\}_{k\geqslant 1}$ si tout voisinage de x contient des points x_k pour une infinité d'indices k. Toute suite d'une espace compact admet un point d'accumulation [car l'intersection de la suite décroissante de fermés non vides $\overline{\{x_i\}_{i\geqslant k}}$ est non vide].

A.3 Continuité

Soient $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ deux espaces topologiques et $f : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ une application. On définit comme suit l'*image directe* (resp. l'*image réciproque*) d'une partie A de $\mathbb{E}$ (resp. B de $\mathbb{F}$) par f :

$$f(A) := \{f(x) \in \mathbb{F} : x \in A\} \quad (\text{resp. } f^{-1}(B) := \{x \in \mathbb{E} : f(x) \in B\}).$$

On dit que f est *continue en un point* $x \in \mathbb{E}$, si pour tout voisinage V de $f(x)$ dans $\mathbb{F}$, il existe un voisinage U de x dans $\mathbb{E}$ tel que $f(U) \subseteq V$. Il revient au même de dire

que l'image réciproque $f^{-1}(V)$ de tout voisinage V de $f(x)$ est un voisinage de x. On dit que f est *continue* si elle est continue en tout point de $\mathbb{E}$. Il en sera ainsi si, et seulement si, l'image réciproque d'un ouvert de $\mathbb{F}$ est un ouvert de $\mathbb{E}$ ou encore si, et seulement si, l'image réciproque d'un fermé de $\mathbb{F}$ est un fermé de $\mathbb{E}$. D'autre part, si $f : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ est continue et si $K \subseteq \mathbb{E}$ est une partie compacte de $\mathbb{E}$, alors l'image directe $f(K)$ de K par f est compacte [utiliser la propriété de Heine-Borel-Lebesgue].

On note $\overline{\mathbb{R}} := \mathbb{R} \cup \{-\infty, +\infty\}$ la *droite achevée*. Soit $\mathbb{E}$ un ensemble et $\varphi : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ une fonction pouvant prendre les valeurs $-\infty$ et $+\infty$. On appelle *épigraphe* de φ, l'ensemble

$$\operatorname{epi} \varphi := \{(x, \alpha) \in \mathbb{E} \times \mathbb{R} : \varphi(x) \leqslant \alpha\}.$$

C'est donc la partie de $\mathbb{E} \times \mathbb{R}$ qui est « au-dessus » du graphe de φ (du grec *epi* signifiant *sur*).

Soit $\{a_k\}_{k\in\mathbb{N}}$ une suite d'éléments de $\overline{\mathbb{R}}$. Comme la suite $\{\inf_{k'\geqslant k} a_{k'}\}_{k\in\mathbb{N}}$ est croissante, elle a une limite dans $\overline{\mathbb{R}}$ que l'on appelle la *limite inférieure* de la suite $\{a_k\}_{k\in\mathbb{N}}$ et que l'on note

$$\liminf_{k\to\infty} a_k := \lim_{k\to\infty} \left(\inf_{k'\geqslant k} a_{k'} \right) \in \overline{\mathbb{R}}.$$

De manière similaire, on définit la *limite supérieure* de $\{a_k\}_{k\in\mathbb{N}}$ par

$$\limsup_{k\to\infty} a_k := \lim_{k\to\infty} \left(\sup_{k'\geqslant k} a_{k'} \right) \in \overline{\mathbb{R}}.$$

Comme $\sup_k a_k = -\inf_k (-a_k)$, on a

$$\limsup_{k\to\infty} a_k = -\liminf_{k\to\infty} (-a_k). \tag{A.1}$$

Si $\{a_k\}_{k\in\mathbb{N}}$ et $\{b_k\}_{k\in\mathbb{N}}$ sont deux suites de $\overline{\mathbb{R}}$, alors

$$\liminf_{k\to\infty} (a_k + b_k) \geqslant \liminf_{k\to\infty} a_k + \liminf_{k\to\infty} b_k, \tag{A.2a}$$

$$\limsup_{k\to\infty} (a_k + b_k) \leqslant \limsup_{k\to\infty} a_k + \limsup_{k\to\infty} b_k, \tag{A.2b}$$

pourvu que l'une des limites inférieures ou supérieures des membres de droite ne vaille pas $-\infty$ et l'autre $+\infty$. On a des égalités dans (A.2a) et (A.2b) si l'une des deux suites converge. Si $\{a_k\}_{k\in\mathbb{N}}$ et $\{b_k\}_{k\in\mathbb{N}}$ sont des suites positives de $\overline{\mathbb{R}}$, alors

$$\liminf_{k\to\infty} a_k b_k \geqslant \left(\liminf_{k\to\infty} a_k \right) \left(\liminf_{k\to\infty} b_k \right), \tag{A.3}$$

pourvu qu'un des facteurs à droite ne soit pas nul et l'autre $+\infty$.

Soient $\mathbb{E}$ est un espace topologique et $\varphi : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ une fonction. On dit que φ est *semi-continue inférieurement* (*s.c.i.* en abrégé) en $x \in \mathbb{E}$ si

$$\forall \{x_k\} \to x : \qquad \varphi(x) \leqslant \liminf_{k\to\infty} \varphi(x_k).$$

On dit que φ est *s.c.i.* si elle est s.c.i. en tout point de $\mathbb{E}$. On dit que φ est *fermée* si son épigraphe est fermé dans $\mathbb{E} \times \mathbb{R}$. Comme l'affirme la proposition suivante, dont la démonstration est proposée à l'exercice A.2, il s'agit de deux notions équivalentes.

Proposition A.1 *Soient $\mathbb{E}$ est un espace topologique et $\varphi : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ une fonction. Les trois propriétés suivantes sont équivalentes:*
(i) φ est fermée,
(ii) φ est s.c.i.,
(iii) $\forall\, \alpha \in \mathbb{R}$, l'ensemble $\{x \in \mathbb{E} : \varphi(x) \leqslant \alpha\}$ est fermé.

On dit que φ est *semi-continue supérieurement* (*s.c.s.* en abrégé) [en $x \in \mathbb{E}$] si $-\varphi$ est s.c.i [en $x \in \mathbb{E}$]. Clairement, φ est *continue* [en $x \in \mathbb{E}$] si, et seulement si, elle est s.c.i. et s.c.s. [en $x \in \mathbb{E}$].

A.4 Espace métrique

Définition

Soit $\mathbb{E}$ un ensemble. Une *distance* sur $\mathbb{E}$ est une application $\mathrm{d} : \mathbb{E} \times \mathbb{E} \to \mathbb{R}$ ayant les propriétés suivantes : pour tout x, y, $z \in \mathbb{E}$, *(i)* $\mathrm{d}(x, y) = 0$ si, et seulement si, $x = y$, *(ii) symétrie* : $\mathrm{d}(x, y) = \mathrm{d}(y, x)$, *(iii) inégalité triangulaire* : $\mathrm{d}(x, z) \leqslant \mathrm{d}(x, y) + \mathrm{d}(y, z)$. On a tout de suite les propriétés suivantes : pour tout x, y, $z \in \mathbb{E}$,

$$\mathrm{d}(x, y) \geqslant 0 \qquad \text{et} \qquad |\,\mathrm{d}(x, y) - \mathrm{d}(y, z)| \leqslant \mathrm{d}(x, z).$$

Un *espace métrique* est un couple $(\mathbb{E}, \mathrm{d})$ formé d'un ensemble $\mathbb{E}$ muni d'une distance d. Dans un espace métrique $(\mathbb{E}, \mathrm{d})$, on définit la *distance d'un point $x \in \mathbb{E}$ à un ensemble $P \subseteq \mathbb{E}$* par

$$\mathrm{d}_P(x) = \inf_{y \in P} \mathrm{d}(x, y). \tag{A.4}$$

Un point $\bar{x} \in P$ qui réalise l'infimum ci-dessus est appelé une *projection* de x sur P. Celle-ci peut ne pas exister ou exister mais ne pas être unique (voir la section 2.5.2).

Topologie

La *topologie* canonique d'un espace métrique $(\mathbb{E}, \mathrm{d})$ est introduite comme suit. On définit d'abord la *boule ouverte* [resp. *boule fermée*] de *centre* x et de *rayon* r, comme l'ensemble

$$B(x, r) := \{y \in \mathbb{E} : \mathrm{d}(x, y) < r\} \qquad [\text{resp. } \bar{B}(x, r) := \{y \in \mathbb{E} : \mathrm{d}(x, y) \leqslant r\}].$$

On dit alors que $\Omega \subseteq \mathbb{E}$ est *ouvert* dans $\mathbb{E}$ si pour tout $x \in \Omega$, il existe un rayon $r > 0$ tel que $B(x, r) \subseteq \Omega$. La topologie d'un espace métrique est séparée ; en particulier, les singletons sont des fermés et les suites ont au plus une limite.

Fonctions lipschitzienne et contractante

Soient $(\mathbb{E}, \mathrm{d}_{\mathbb{E}})$ et $(\mathbb{F}, \mathrm{d}_{\mathbb{F}})$ deux espaces métriques et Ω un ouvert de $\mathbb{E}$.

On dit qu'une fonction $f : \Omega \to \mathbb{F}$ est *lipschitzienne* de *module* $L > 0$, si pour tout x, $y \in \Omega$,

$$\mathrm{d}_{\mathbb{F}}(f(x), f(y)) \leqslant L\ \mathrm{d}_{\mathbb{E}}(x, y).$$

Ce sont des fonctions dont la variation peut être estimée par celle de leur argument. On dit que $f : \Omega \to \mathbb{F}$ est *localement lipschitzienne* si tout point $x \in \Omega$ possède un voisinage V contenu dans Ω sur lequel f est lipschitzienne sur V.

On dit qu'une fonction $f : \Omega \to \mathbb{F}$ est *contractante*, si elle est lipschitzienne de module $L = 1$ et qu'elle est *strictement contractante*, si elle est lipschitzienne de module $L < 1$.

A.5 Espace normé

Définition

Soit $\mathbb{E}$ un espace vectoriel sur $\mathbb{R}$, une notion supposée connue. Si A et B sont des parties de $\mathbb{E}$ et $\alpha \in \mathbb{R}$ on définit la *somme de Minkowski* $A + B$ de A et B, leur différence $A - B$ et la multiplication de A par un scalaire α par

$$\begin{aligned} A + B &:= \{x + y : x \in A, y \in B\} \\ A - B &:= \{x - y : x \in A, y \in B\} \\ \alpha A &:= \{\alpha x : x \in A\}. \end{aligned}$$

On se gardera bien de penser que $A - A$ se réduit à $\{0\}$. Par exemple, avec $A := [0, 1] \subseteq \mathbb{R}$, on a $A - A = [-1, 1]$ (voir l'exercice A.6).

Une *norme* sur un espace vectoriel $\mathbb{E}$ est une application $x \in \mathbb{E} \mapsto \|x\| \in \mathbb{R}$ qui vérifie les propriétés suivantes : (i) $\|x\| = 0$ si, et seulement si, $x = 0$, (ii) pour tout $\alpha \in \mathbb{R}$ et tout $x \in \mathbb{E}$: $\|\alpha x\| = |\alpha|\,\|x\|$ et (iii) pour tout $x, y \in \mathbb{E}$: $\|x + y\| \leqslant \|x\| + \|y\|$ (*inégalité triangulaire*). Un *espace normé* est un espace vectoriel muni d'une norme. L'inégalité triangulaire implique que

$$\forall\, x, y \in \mathbb{E} : \qquad \Big|\|x\| - \|y\|\Big| \leqslant \|x - y\|.$$

On vérifie aisément que l'application $(x, y) \in \mathbb{E} \times \mathbb{E} \mapsto \|x - y\|$ est une distance sur $\mathbb{E}$; un espace normé est donc aussi un espace métrique. On définit alors la topologie canonique d'un espace normé comme la topologie canonique de l'espace métrique associé. Ses boules ouvertes [resp. fermées] sont donc de la forme

$$B(x, r) := \{y \in \mathbb{E} : \|y - x\| < r\} \qquad \text{et} \qquad \bar{B}(x, r) := \{y \in \mathbb{E} : \|y - x\| \leqslant r\}.$$

On dit qu'une partie A d'un espace normé est *bornée* s'il existe $r > 0$ tel que $A \subseteq B(0, r)$.

Sur $\mathbb{R}^n$ et pour $p \in [1, +\infty[\subseteq \mathbb{R}$, la fonction qui à $x = (x_1, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ fait correspondre

$$\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}} \tag{A.5a}$$

est une norme, dite *norme* ℓ_p ou *norme de Minkowski*. De même la fonction qui à $x = (x_1, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ fait correspondre

$$\|x\|_\infty = \max_{1\leqslant i\leqslant n} |x_i| \tag{A.5b}$$

est une norme, dite *norme* ℓ_∞. La norme ℓ_2 est aussi appelée *norme euclidienne*. On notera, qu'à $x \in \mathbb{R}^n$ fixé, l'application

$$p \in [1, +\infty[\mapsto \|x\|_p \text{ est décroissante}$$

et $\lim_{p\to\infty} \|x\|_p = \|x\|_\infty$.

Une partie compacte d'un espace normé est fermée (vrai dans tout espace topologique) et bornée. En dimension finie, la réciproque est vraie : une partie fermée et bornée est compacte. Dans un espace normé, toute suite incluse dans un compact admet une sous-suite convergente [on a vu qu'une telle suite avait un point d'accumulation ; la sous-suite s'obtient en considérant des boules centrées au point d'accumulation et de rayons décroissants].

On dit qu'une suite $\{x_k\}_{k\geqslant 1}$ est une *suite de Cauchy* si $\|x_k - x_l\|$ tend vers zéro lorsque k et l tendent vers l'infini ; de manière plus précise, elle est de Cauchy si

$$\forall\, \epsilon > 0, \quad \exists\, K \in \mathbb{N}, \quad \forall\, k, l \geqslant K : \qquad \|x_k - x_l\| < \epsilon.$$

Un espace normé est dit *complet* (on parle alors d'*espace de Banach*) si toutes ses suites de Cauchy convergent. L'intérêt de la notion de suite de Cauchy est de pouvoir, dans les espaces complets, reconnaître les suites convergentes sans en connaître la limite. Par exemple $\mathbb{R}^n$ muni d'une norme quelconque est un espace de Banach.

Soit $\{x_k\}_{k\geqslant 1}$ une suite d'un espace normé $\mathbb{E}$. On dit que la série $\sum_{k\geqslant 1} x_k$ est *convergente* si la suite des sommes partielles $\{\sum_{1\leqslant k\leqslant l} x_k\}_{l\geqslant 1}$ converge dans $\mathbb{E}$. On dit que la série $\sum_{k\geqslant 1} x_k$ est *absolument convergente* si la série des normes $\sum_{k\geqslant 1} \|x_k\|$ est convergente dans $\mathbb{R}$. Dans un espace de Banach, une série $\sum_{k\geqslant 1} x_k$ absolument convergente est convergente et vérifie $\|\sum_{k\geqslant 1} x_k\| \leqslant \sum_{k\geqslant 1} \|x_k\|$.

On dit qu'une partie A d'un espace vectoriel $\mathbb{E}$ est un *sous-espace affine* de $\mathbb{E}$, s'il existe un point $x \in \mathbb{E}$ et un sous-espace vectoriel $\mathbb{E}(A)$ de $\mathbb{E}$ tels que $A = x + \mathbb{E}(A)$. Il revient au même de dire que A est non vide et que $tx + (1-t)y \in A$ lorsque $x, y \in A$ et $t \in \mathbb{R}$ (voir l'exercice A.7 pour une autre définition équivalente). On dit que $\mathbb{E}(A)$ est le sous-espace vectoriel *parallèle* au sous-espace affine A (il est déterminé de manière unique ; c'est en fait $A - A$) et sa *dimension* définit celle de A. Une intersection quelconque de sous-espaces affines est un sous-espace affine (dont le sous-espace vectoriel parallèle est l'intersection des sous-espaces vectoriels parallèles aux sous-espaces affines intersectés).

On dit qu'une application $f : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ entre deux espaces vectoriels $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ est *affine* s'il existe une application linéaire $T : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ telle que $f(y) - f(x) = T(y - x)$ pour tout x, $y \in \mathbb{E}$. Il revient au même de dire que $f(x) = f(0) + Tx$ pour tout $x \in \mathbb{E}$ ou encore que $f((1 - tx + ty) = (1 - t)f(x) + tf(y)$ pour tout $t \in [0, 1]$ ou pour tout $t \in \mathbb{R}$.

Application linéaire continue

Soient $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ deux espaces normés, munis des normes $\|\cdot\|_\mathbb{E}$ et $\|\cdot\|_\mathbb{F}$ respectivement. On note $\mathcal{L}(\mathbb{E}, \mathbb{F})$ l'ensemble des *applications linéaires continues* (ou *opérateurs continus*) de $\mathbb{E}$ dans $\mathbb{F}$. On vérifie qu'une application linéaire $T : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ est continue si, et seulement si,

$$\|T\| := \sup_{\|x\|_{\mathbb{E}} \leqslant 1} \|Tx\|_{\mathbb{F}}$$

est fini. L'application $T \mapsto \|T\|$ définit une norme sur $\mathcal{L}(\mathbb{E}, \mathbb{F})$. Le *noyau* d'une application linéaire $T \in \mathcal{L}(\mathbb{E}, \mathbb{F})$ est la partie de $\mathbb{E}$ définie par

$$\mathcal{N}(T) := \{x \in \mathbb{E} : Tx = 0\}.$$

L'*image* de T est la partie de $\mathbb{F}$ définie par[1]

$$\mathcal{R}(T) := T(\mathbb{E}) = \{Tx : x \in \mathbb{E}\}.$$

On dit qu'une application de $\mathcal{L}(\mathbb{E}, \mathbb{F})$ est *inversible* si elle est bijective et si son application réciproque est continue (elle est nécessairement linéaire).

Lemme A.2 (de perturbation de Banach) *Soient $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ deux espaces de Banach. Si R et $T \in \mathcal{L}(\mathbb{E}, \mathbb{F})$ sont tels que R est inversible et $\|R^{-1}T\| < 1$, alors*
1) *$R - T$ est inversible,*
2) *$(R-T)^{-1} = \sum_{k \geqslant 0} (R^{-1}T)^k R^{-1}$ (série normalement convergente),*
3) *$\|(R-T)^{-1}\| \leqslant \|R^{-1}\| / (1 - \|R^{-1}T\|)$.*

Ce résultat montre en particulier que *l'ensemble des applications linéaires continues inversibles de $\mathbb{E}$ dans $\mathbb{F}$ est un ouvert de $\mathcal{L}(\mathbb{E}, \mathbb{F})$.*

Opérateur adjoint

On appelle *forme* une application à valeurs dans $\mathbb{R}$. Les formes linéaires continues sont donc les éléments de $\mathbb{E}' := \mathcal{L}(\mathbb{E}, \mathbb{R})$, appelé *espace dual* (*topologique*) de $\mathbb{E}$. Si $f \in \mathbb{E}'$, on note

$$\langle f, x \rangle_{\mathbb{E}', \mathbb{E}} := f(x).$$

Le *crochet de dualité* $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathbb{E}', \mathbb{E}}$ entre $\mathbb{E}'$ et $\mathbb{E}$ se notera aussi $\langle \cdot, \cdot \rangle$ s'il n'y a pas d'ambiguïté. On ne le confondra pas avec un produit scalaire (voir ci-dessous), qui est lui un opérateur bilinéaire sur un même espace.

Soient $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ deux espaces de Banach. L'*adjoint* d'un opérateur $T \in \mathcal{L}(\mathbb{E}, \mathbb{F})$ est l'opérateur $T^* \in \mathcal{L}(\mathbb{F}', \mathbb{E}')$, défini de la manière suivante. Soit $g \in \mathbb{F}'$. L'application $x \in \mathbb{E} \mapsto \langle g, Tx \rangle_{\mathbb{F}', \mathbb{F}} \in \mathbb{R}$ est linéaire continue ; c'est donc un élément de $\mathbb{E}'$, que l'on note T^*g. On a donc

$$\forall\, x \in \mathbb{E}, \quad \forall\, g \in \mathbb{F} : \qquad \langle g, Tx \rangle_{\mathbb{F}', \mathbb{F}} = \langle T^*g, x \rangle_{\mathbb{E}', \mathbb{E}}.$$

On remarque finalement que l'application $T^* : g \in \mathbb{F}' \mapsto T^*g \in \mathbb{E}'$ est linéaire continue. C'est l'application linéaire adjointe de T.

Voici quelques propriétés des opérateurs adjoints.

- On a l'égalité des normes :

$$\|T^*\| = \|T\|.$$

[1] $\mathcal{N}$ pour « null space » et $\mathcal{R}$ pour « range space ».

- *Théorème de l'image fermée.* Si $\mathcal{R}(T)$ est fermée (c'est toujours le cas en dimension finie), le noyau de T et l'image de T^* sont reliés par

$$\mathcal{R}(T^*) = \mathcal{N}(T)^\perp. \tag{A.6}$$

  Dans ce cas,

$$T \text{ est injective} \iff T^* \text{ est surjective.}$$

- Si T est inversible, alors T^* est aussi inversible et

$$(T^*)^{-1} = (T^{-1})^*.$$

  On note alors souvent $(T^*)^{-1} = (T^{-1})^*$ par T^{-*} .

Application bilinéaire

Soient $\mathbb{E}_1$, $\mathbb{E}_2$ et $\mathbb{F}$ trois espaces vectoriels sur $\mathbb{R}$. On dit qu'une application $b : \mathbb{E}_1 \times \mathbb{E}_2 \to \mathbb{F}$ est *bilinéaire* si elle est linéaire par rapport à chacun de ses arguments, l'autre étant fixé à une valeur arbitraire :

$$\begin{aligned} &\forall x_2 \in \mathbb{E}_2 : \quad x_1 \in \mathbb{E}_1 \mapsto b(x_1, x_2) \in \mathbb{F} \text{ est linéaire,} \\ &\forall x_1 \in \mathbb{E}_1 : \quad x_2 \in \mathbb{E}_2 \mapsto b(x_1, x_2) \in \mathbb{F} \text{ est linéaire.} \end{aligned}$$

Si $\mathbb{E}_1$, $\mathbb{E}_2$ et $\mathbb{F}$ sont maintenant des espaces normés sur $\mathbb{R}$, on sait qu'une application bilinéaire $b : \mathbb{E}_1 \times \mathbb{E}_2 \to \mathbb{F}$ est *continue*, si, et seulement si, elle est continue en zéro, ou encore si, et seulement si, la quantité

$$\|b\| := \sup_{\substack{\|x_1\| \leqslant 1 \\ \|x_2\| \leqslant 1}} \|b(x_1, x_2)\| \equiv \sup_{\substack{x_1 \neq 0 \\ x_2 \neq 0}} \frac{\|b(x_1, x_2)\|}{\|x_1\| \, \|x_2\|}$$

est finie. En réalité, $b \mapsto \|b\|$ est une *norme* sur l'ensemble des applications binliéaires continues de $\mathbb{E}_1 \times \mathbb{E}_2 \to \mathbb{F}$.

Soient $\mathbb{E}_1$ et $\mathbb{E}_2$ deux ensembles. On dit qu'une application $a : \mathbb{E}_1^2 \to \mathbb{E}_2$ est *symétrique* si

$$\forall (x_1, x_2) \in \mathbb{E}_1^2 : \quad a(x_1, x_2) = a(x_2, x_1).$$

A.6 Espace de Hilbert

Espace pré-hilbertien

Soit $\mathbb{E}$ un espace vectoriel. Un *produit scalaire* [255 ; 1847] sur $\mathbb{E}$ est une application

$$(x, y) \in \mathbb{E} \times \mathbb{E} \mapsto \langle x, y \rangle \in \mathbb{R}$$

bilinéaire ($x \mapsto \langle x, y \rangle$ et $y \mapsto \langle x, y \rangle$ sont linéaires) symétrique ($\langle x, y \rangle = \langle y, x \rangle$) et définie positive ($\langle x, x \rangle > 0$, si $x \neq 0$). L'application $x \in \mathbb{E} \mapsto \|x\| = \langle x, x \rangle^{1/2} \in \mathbb{R}$ est une norme, dite *norme associée au produit scalaire* $\langle \cdot, \cdot \rangle$. On appelle *espace pré-hilbertien* un espace vectoriel muni d'un produit scalaire. S'il est de dimension finie, on dit qu'il s'agit d'un *espace euclidien*.

Par exemple, sur $\mathbb{R}^n$, l'application qui à $x = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ et $y = (y_1, \dots, y_n) \in \mathbb{R}^n$ fait correspondre

$$x^{\mathsf{T}} y := \sum_{i=1}^{n} x_i y_i$$

est un produit scalaire, appelé *produit scalaire euclidien*. La norme associée est la norme euclidienne ou ℓ_2.

Dans un espace pré-hilbertien, le produit scalaire et la norme associée sont liés par l'*inégalité de Cauchy-Schwarz*:

$$\forall\, x, y \in \mathbb{E} : \qquad |\langle x, y\rangle| \leqslant \|x\|\, \|y\|. \tag{A.7}$$

On en déduit que (on peut aussi enlever la valeur absolue)

$$\|x\| = \sup_{\|y\| \leqslant 1} |\langle x, y\rangle|.$$

Plus généralement, si $\|\cdot\|_{\text{P}}$ est une norme sur $\mathbb{E}$, pouvant être différente de la norme associée au produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle$, on définit sa *norme duale* $\|\cdot\|_{\text{D}}$ par (voir l'exercice A.11)

$$\|y\|_{\text{D}} := \sup_{\|x\|_{\text{P}} \leqslant 1} |\langle y, x\rangle|. \tag{A.8}$$

Sa valeur ne change pas si l'on enlève les valeurs absolues. En prenant la norme duale de la norme duale, on retrouve la norme primale (voir le point 2 de l'exercice 3.28). On a l'*inégalité de Cauchy-Schwarz généralisée*:

$$\forall\, x, y \in \mathbb{E} : \qquad |\langle x, y\rangle| \leqslant \|x\|_{\text{P}}\, \|y\|_{\text{D}}. \tag{A.9}$$

Ainsi sur $\mathbb{R}^n$, muni du produit scalaire euclidien, si on se donne des *nombres conjugués* p et $p' \in [1, \infty]$, c'est-à-dire vérifiant $\frac{1}{p} + \frac{1}{p'} = 1$ ($p = 1$ si, et seulement si, $p' = +\infty$), les normes ℓ_p et $\ell_{p'}$ sont duales l'une de l'autre et l'inégalité

$$\forall\, x, y \in \mathbb{R}^n : \qquad |x^{\mathsf{T}} y| \leqslant \|x\|_p\, \|y\|_{p'},$$

porte le nom d'*inégalité de Hölder* (pour une démonstration utilisant les conditions d'optimalité, voir l'exercice 4.11).

Espace hilbertien

On dit que $\mathbb{E}$ est un *espace de Hilbert* ou un *espace hilbertien* si c'est un espace pré-hilbertien tel que, pour la norme associée, $\mathbb{E}$ est complet (c'est donc un espace de Banach).

Théorème A.3 (de représentation de Riesz-Fréchet) *Si $\mathbb{E}$ est un espace de Hilbert et si $f \in \mathbb{E}'$ alors il existe un unique $\xi \in \mathbb{E}$ tel que*

$$\forall\, x \in \mathbb{E} : \qquad f(x) = \langle \xi, x\rangle.$$

Démonstration. Donnons une démonstration en dimension finie. Pour une démonstration en dimension infinie, on pourra par exemple consulter [79 ; Théorème V.5] ou suivre l'indication donnée au cours de la démonstration.

Soit $\xi \in \mathbb{E}$. Alors l'application

$$J_\xi : \mathbb{E} \to \mathbb{R} : x \mapsto \langle \xi, x \rangle$$

est linéaire continue (sa norme vaut $\|\xi\|$). On a donc défini une application

$$J : \xi \in \mathbb{E} \mapsto J_\xi \in \mathbb{E}'.$$

Cette application J est également linéaire continue (de norme 1). Elle est aussi injective puisque si $J_\xi = 0$, c'est-à-dire $\langle \xi, x \rangle = 0$ pour tout $x \in \mathbb{E}$, on a nécessairement $\xi = 0$ (prendre $x = \xi$). En dimension finie, $\dim \mathbb{E}' = \dim \mathbb{E}$ et donc J est aussi surjective (en dimension infinie, la surjectivité de J s'obtient en montrant que l'image de J est fermée et dense dans $\mathbb{E}'$). Ceci implique que pour tout $f \in \mathbb{E}'$ il existe un unique $\xi \in \mathbb{E}$ tel que $f = J_\xi$. C'est ce que l'on cherchait à démontrer. □

Comme son nom l'indique, le théorème précédent sert à représenter des formes linéaires continues sur $\mathbb{E}$ par des vecteurs de $\mathbb{E}$. Ce résultat nous sera très utile pour définir le gradient d'une fonction différentiable et la hessienne d'une fonction deux fois différentiable.

Par le théorème de représentation de Riesz-Fréchet, le crochet de dualité entre $f \in \mathbb{E}'$ et $x \in \mathbb{E}$ n'est autre que le produit scalaire entre le représentant ξ de f et x. Alors, si $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ sont deux espaces de Hilbert et $T \in \mathcal{L}(\mathbb{E}, \mathbb{F})$, l'opérateur dual de T est identifiable à un opérateur $T^* \in \mathcal{L}(\mathbb{F}, \mathbb{E})$. Supposons à présent que $T \in \mathcal{L}(\mathbb{E}, \mathbb{E})$, où $\mathbb{E}$ est un espace de Hilbert. On dit que T est *auto-adjoint* si $T = T^*$. Cette relation a bien un sens puisque T et T^* appartiennent au même espace $\mathcal{L}(\mathbb{E}, \mathbb{E})$.

Supposons à présente que l'on prenne sur des espaces de Hilbert $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ des produits scalaires $\langle\!\langle \cdot, \cdot \rangle\!\rangle_\mathbb{E}$ et $\langle\!\langle \cdot, \cdot \rangle\!\rangle_\mathbb{F}$ différents de ceux $\langle \cdot, \cdot \rangle_\mathbb{E}$ et $\langle \cdot, \cdot \rangle_\mathbb{F}$ donnés dans leur définition. Alors, par le théorème de représentation de Riesz-Fréchet, il existe des opérateurs auto-adjoints définis positifs (donc inversibles) $S_\mathbb{E} : \mathbb{E} \to \mathbb{E}$ et $S_\mathbb{F} : \mathbb{F} \to \mathbb{F}$ tels que

$$\begin{aligned} \forall\, (x, x') \in \mathbb{E} \times \mathbb{E} : &\quad \langle\!\langle x, x' \rangle\!\rangle_\mathbb{E} = \langle S_\mathbb{E} x, x' \rangle_\mathbb{E}, \\ \forall\, (y, y') \in \mathbb{F} \times \mathbb{F} : &\quad \langle\!\langle y, y' \rangle\!\rangle_\mathbb{F} = \langle S_\mathbb{F} y, y' \rangle_\mathbb{F}. \end{aligned}$$

Si on note $T^\star \in \mathcal{L}(\mathbb{F}, \mathbb{E})$ l'opérateur adjoint de $T \in \mathcal{L}(\mathbb{E}, \mathbb{F})$ pour ces nouveaux produits scalaires, on a

$$T^\star = S_\mathbb{E}^{-1} T^* S_\mathbb{F}. \tag{A.10}$$

A.7 Multifonction

Soient $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ deux ensembles. On note $\mathcal{P}(\mathbb{F})$ l'ensemble des parties de $\mathbb{F}$. Une *multifonction* T de $\mathbb{E}$ dans $\mathbb{F}$, aussi appelée *fonction multivoque*, est une application de $\mathbb{E}$ dans $\mathcal{P}(\mathbb{F})$. On la note

$$T : \mathbb{E} \multimap \mathbb{F}$$

pour la distinguer d'une fonction $f : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$, qui prend ses valeurs dans $\mathbb{E}$ et pas dans $\mathcal{P}(\mathbb{E})$.

On définit le *domaine*, l'*image* et le *graphe* d'une multifonction T par

$$\begin{aligned} \operatorname{dom} T &:= \{x \in \mathbb{E} : T(x) \neq \varnothing\}, \\ \mathcal{R}(T) &:= \cup\{T(x) : x \in \operatorname{dom} T\}, \\ \mathcal{G}(T) &:= \{(x, y) \in \mathbb{E} \times \mathbb{F} : y \in T(x)\}. \end{aligned}$$

On notera bien que l'on a choisi de définir le graphe comme une partie de $\mathbb{E} \times \mathbb{F}$ et pas de $\mathbb{E} \times \mathcal{P}(\mathbb{F})$. L'image d'une partie $P \subseteq \mathbb{E}$ par T est définie par

$$T(P) := \bigcup_{x \in P} T(x).$$

Une multifonction est entièrement déterminée par son graphe et il y a une bijection entre l'ensemble des multifonctions est l'ensemble des parties de $\mathbb{E} \times \mathbb{F}$. Ainsi si G est une partie de $\mathbb{E} \times \mathbb{F}$, la multifonction $T : \mathbb{E} \multimap \mathbb{F}$ telle que $\mathcal{G}(T) = G$ est définie en $x \in \mathbb{E}$ par

$$T(x) := \{y \in \mathbb{F} : (x, y) \in G\}.$$

Une multifonction est donc identique à ce que l'on appelle une *relation binaire* entre deux ensembles, laquelle est spécifiée par la donnée d'une partie de leur produit cartésien. Cependant, en analyse multifonctionnelle, on donne de la structure aux ensembles $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ et on insiste sur les propriétés que l'on peut donner ainsi à la multifonction.

La *multifonction réciproque* d'une multifonction $T : \mathbb{E} \multimap \mathbb{F}$ est la multifonction notée $T^{-1} : \mathbb{F} \multimap \mathbb{E}$ définie par

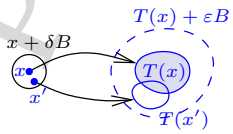
$$T^{-1}(y) = \{x \in \mathbb{E} : y \in T(x)\}.$$

Clairement, pour $x \in \mathbb{E}$ et $y \in \mathbb{F}$, on a

$$\begin{aligned} y \in T(x) &\iff x \in T^{-1}(y), \\ (x, y) \in \mathcal{G}(T) &\iff (y, x) \in \mathcal{G}(T^{-1}). \end{aligned}$$

On voit aussi que, pour une partie $P \subseteq \mathbb{E}$, $T(P) = \{y \in \mathbb{F} : T^{-1}(y) \cap P \neq \varnothing\}$.

Une multifonction $T : \mathbb{E} \multimap \mathbb{F}$ est *semi-continue supérieurement* en $x \in \mathbb{E}$ si pour tout $\varepsilon > 0$, il existe un $\delta > 0$ tel que $\forall\, x' \in x + \delta B$ on a $T(x') \subseteq T(x) + \varepsilon B$. Cette notion est illustrée à la figure ci-dessous.



Lorsque $\mathbb{E}$ est un espace euclidien de produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle$ et que $\mathbb{F} = \mathbb{E}$, on dit que T est *monotone* si

$$\forall\, (x_1, y_1) \in \mathcal{G}(T), \quad \forall\, (x_2, y_2) \in \mathcal{G}(T) : \qquad \langle y_2 - y_1, x_2 - x_1 \rangle \geqslant 0.$$

et que T est *fortement monotone* de module $\alpha > 0$ si

$$\forall\,(x_1,y_1)\in\mathcal{G}(T),\quad \forall\,(x_2,y_2)\in\mathcal{G}(T):\qquad \langle y_2-y_1,x_2-x_1\rangle\geqslant\alpha\|x_1-x_2\|^2.$$

On dit que T est *monotone maximale* si T est monotone et si son graphe n'est pas strictement contenu dans le graphe d'un autre opérateur monotone. On vérifie facilement que cette dernière propriété s'écrit aussi

$$\Big[\langle y_2-y_1,x_2-x_1\rangle\geqslant 0,\quad \forall\,(x_1,y_1)\in\mathcal{G}(T)\Big]\quad\Longrightarrow\quad (x_2,y_2)\in\mathcal{G}(T).$$

Notes

Tous les sujets abordés dans ce chapitre sont largement développés dans de nombreux ouvrages ; citons Choquet [111 ; 1969], Schwartz [485 ; 1991] et Mawhin [382 ; 1992].

Exercices

A.1. Si $\{a_k\}_{k\in\mathbb{N}}$ et $\{b_k\}_{k\in\mathbb{N}}$ sont des suites de $\mathbb{R}$ avec $a_k\geqslant 0$, $a_k\to a\in\mathbb{R}$ et $\liminf_k b_k>-\infty$, alors

$$\liminf_{k\to\infty} a_k b_k\geqslant a\left(\liminf_{k\to\infty} b_k\right),\tag{A.11}$$

pourvu que $\liminf_k b_k<+\infty$ si $a=0$.

A.2. Démontrez la proposition A.1.

A.3. Soient f et $g:\mathbb{E}\to\mathbb{R}$ deux fonctions s.c.i. en un point x d'un espace topologique $\mathbb{E}$. Alors $f+g$ est s.c.i. en x.

A.4. Soient $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ deux espaces topologiques et $\varphi:\mathbb{E}\times\mathbb{F}\to\mathbb{R}$ une fonction. On considère la *fonction marginale* $f:\mathbb{E}\to\overline{\mathbb{R}}$ définie en $x\in\mathbb{E}$ par

$$f(x)=\inf_{y\in\mathbb{F}}\varphi(x,y).$$

– Si pour tout $y\in\mathbb{F}$, $\varphi(\cdot,y)$ est s.c.s., alors f est s.c.s..
– Si $\mathbb{E}$ est un espace métrique, $\mathbb{F}$ est compact et φ est continue, alors f est continue.

A.5. *Contractilité d'une distance.* Soient $\mathbb{E}$ un espace métrique et P une partie de $\mathbb{E}$. Montrez que d_P, la distance à P, est contractante.

A.6. *Somme d'ensembles et inclusion.* Soient A, B et C trois parties non vides d'un espace vectoriel sur $\mathbb{R}$. Montrez $A+C\subseteq B\Rightarrow A\subseteq B-C$; mais $A\subseteq B+C\not\Rightarrow A-C\subseteq B$.

A.7. *Autres définitions d'une sous-espace affine.* Soit A une partie non vide d'un espace vectoriel $\mathbb{E}$. Montrez que les propriétés suivantes sont équivalentes :

(*i*) A est un sous-espace affine,
(*ii*) pour tout $x,y\in A$ et tout $t\in\mathbb{R}$, on a $(1-t)x+ty\in A$,
(*iii*) $A-A$ est un sous-espace vectoriel de $\mathbb{E}$ et $A+(A-A)=A$.

A.8. *Intersection de sous-espaces affines.* On note $\mathbb{E}(A):=A-A$ le sous-espace vectoriel parallèle à un sous-espace affine A d'un espace vectoriel $\mathbb{E}$. Soit $\{A_i\}_{i\in I}$ une famille quelconque de sous-espaces affines, d'intersection non vide. Alors $\cap_{i\in I}A_i$ est un sous-espace affine et $\mathbb{E}(\cap_{i\in I}A_i)=\cap_{i\in I}\mathbb{E}(A_i)$.

A.9. *Norme associée à un produit scalaire.* Soit $\mathbb{E}$ un espace pré-hilbertien, de produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle$ et de norme associée $\| \cdot \|$. Montrez que les identités suivantes ont lieu, quels que soient x et $y \in \mathbb{E}$:

$$\begin{aligned} \|x+y\|^2 + \|x-y\|^2 &= 2\left(\|x\|^2 + \|y\|^2\right) \qquad (\textit{identité du parallélogramme}) \\ \|x+y\|^2 - \|x-y\|^2 &= 4\langle x, y\rangle \qquad (\textit{relation de polarisation}). \end{aligned}$$

A.10. *Généralisation de l'inégalité de Cauchy-Schwarz.* Montrez que l'inégalité de Cauchy-Schwarz (A.7) reste vraie même si $\langle \cdot, \cdot \rangle$ n'est que semi-définie positive (pour tout x, on a « $\langle x, x\rangle \geqslant 0$ » au lieu de « $\langle x, x\rangle > 0$ »).

A.11. *Norme duale.* Montrez que la norme duale définie par (A.8) est effectivement une norme.

B Algèbre linéaire ▲

L'algèbre linéaire est la branche des mathématiques qui étudie les espaces vectoriels et les applications linéaires entre ceux-ci. Nous supposerons toujours que les espaces vectoriels considérés sont réels (l'espace des scalaires est $\mathbb{R}$) et de dimension finie (notion définie ci-dessous).

B.1 Espaces vectoriels

On dit que des vecteurs $u_1, \ldots, u_m$ en nombre fini d'un espace vectoriel $\mathbb{E}$ sur $\mathbb{R}$ sont *linéairement indépendants* si quels que soient les scalaires $\alpha_1, \ldots, \alpha_m \in \mathbb{R}$, on a l'implication

$$\sum_{i=1}^{m} \alpha_i u_i = 0 \qquad \Longrightarrow \qquad \forall\, i \in [1:m] : \quad \alpha_i = 0.$$

On dit aussi que la famille $\mathcal{U} := (u_1, \ldots, u_n)$ est *libre*.

Supposons que l'espace vectoriel considéré $\mathbb{E}$ ait une *base* $\mathcal{U} := (u_1, \ldots, u_n)$, c'est-à-dire une famille finie, libre et génératrice d'éléments u_i de $\mathbb{E}$. On dit alors que $\mathbb{E}$ est de *dimension finie*. Toute base de $\mathbb{E}$ a alors un nombre identique d'éléments, appelé la *dimension de l'espace vectoriel*. Cette base permet d'identifier $\mathbb{E}$ à $\mathbb{R}^n$ au moyen de l'*application-coordonnée* $\gamma_{\mathcal{U}} : \mathbb{E} \to \mathbb{R}^n$ qui donne les coordonnées $x = (x_1, \ldots, x_n) = \gamma_{\mathcal{U}}(u)$ d'un vecteur $u = \sum_{i=1}^{n} x_i u_i$ dans la base $\mathcal{U}$.

Théorème B.1 (de la base incomplète) *Toute famille libre d'un espace vectoriel de dimension finie peut être complétée de manière à en former une base.*

Si $\mathbb{E}$ est un espace vectoriel de dimension finie, on peut toujours le munir d'une structure d'espace de Hilbert. Il suffit en effet de se donner une base de $\mathbb{E}$. Le produit scalaire euclidien sur $\mathbb{R}^n$ induit alors un produit scalaire sur $\mathbb{E}$: $\langle u, v\rangle = \gamma(u)^{\mathsf{T}}\gamma(v)$, où $\gamma : \mathbb{E} \to \mathbb{R}^n$ est l'application-coordonnée. Comme l'espace normé $\mathbb{R}^n$ est complet, il en est de même de $\mathbb{E}$ (γ est en effet une isométrie pour les normes associées aux deux produits scalaires : $\|\gamma(u)\|_2 = \|u\|$, pour tout $u \in \mathbb{E}$).

Soient $\mathbb{E}_1$ et $\mathbb{E}_2$ deux sous-espaces vectoriels d'un espace vectoriel $\mathbb{E}$. On définit leur *somme* par

$$\mathbb{E}_1 + \mathbb{E}_2 := \{x_1 + x_2 : x_1 \in \mathbb{E}_1, x_2 \in \mathbb{E}_2\}.$$

On dit que $\mathbb{E}_1 + \mathbb{E}_2$ est une *somme directe* si tout élément x de $\mathbb{E}_1 + \mathbb{E}_2$ se décompose de manière unique en $x_1 + x_2$ avec $x_1 \in \mathbb{E}_1$ et $x_2 \in \mathbb{E}_2$. On note $\mathbb{E}_1 \oplus \mathbb{E}_2$ une somme

directe. On dit que $\mathbb{E}_1$ et $\mathbb{E}_2$ sont *supplémentaires* dans $\mathbb{E}$ si $\mathbb{E} = \mathbb{E}_1 \oplus \mathbb{E}_2$, ce qui est le cas si, et seulement si, $\mathbb{E}_1 \cap \mathbb{E}_2 = \{0\}$. En dimension finie, tout sous-espace vectoriel $\mathbb{E}_1$ admet un sous-espace vectoriel supplémentaire $\mathbb{E}_2$ (donc tel que $\mathbb{E}_1 \oplus \mathbb{E}_2 = \mathbb{E}$) ; on dit alors que $\dim \mathbb{E}_2$ est la *codimension* de $\mathbb{E}_1$.

B.1.1 Orthogonalité

Soit $\langle \cdot, \cdot \rangle : \mathbb{E} \times \mathbb{E} \to \mathbb{R}$ un produit scalaire sur $\mathbb{E}$ et $\| \cdot \|$ la norme associée. On dit que deux vecteurs x et y de $\mathbb{E}$ sont *orthogonaux* si $\langle x, y \rangle = 0$. Si $\mathbb{E}_0$ est un sous-espace vectoriel de $\mathbb{R}^n$, on définit son sous-espace vectoriel *orthogonal* par

$$\mathbb{E}_0^\perp := \{x \in \mathbb{R}^n : \langle x, y \rangle = 0 \text{ pour tout } y \in \mathbb{E}_0\}.$$

On a $\dim \mathbb{E} = \dim \mathbb{E}_0 + \dim \mathbb{E}_0^\perp$ et donc $(\mathbb{E}_0^\perp)^\perp = \mathbb{E}_0$.

Algorithme d'orthogonalisation de Gram-Schmidt

Soient $x_1, \ldots, x_p$ des vecteurs linéairement indépendants dans $\mathbb{E}$. L'algorithme de Gram-Schmidt construit à partir de ces vecteurs des vecteurs $u_1, \ldots, u_p$ *orthonormaux*, tels que

$$\text{pour tout } j = 1, \ldots, p : \quad \text{vect}\{u_1, \ldots, u_j\} = \text{vect}\{x_1, \ldots, x_j\}, \tag{B.1}$$

où $\text{vect}\{u_1, \ldots, u_p\}$ désigne le sous-espace vectoriel engendré par les vecteurs $u_1, \ldots, u_p$, c'est-à-dire l'ensemble des vecteurs $u \in \mathbb{E}$ de la forme

$$u = \sum_{i=1}^{p} \alpha_i u_i$$

où $\alpha_1, \ldots, \alpha_p \in \mathbb{R}$.

Algorithme B.2 (Gram-Schmidt)

1. $u_1 = x_1 / \|x_1\|$;
2. Pour $i = 2, \ldots, p$ faire :
   2.1. $\alpha_{ij} = \langle x_i, u_j \rangle$, pour $j = 1, \ldots, i-1$;
   2.2. $\tilde{u}_i = x_i - \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} u_j$;
   2.3. $u_i = \tilde{u}_i / \|\tilde{u}_i\|$.

L'algorithme B.2 est bien défini si les vecteurs $x_1, \ldots, x_p$ sont linéairement indépendants. En effet, à l'étape 1, $x_1 \neq 0$ et à l'étape 2.3, $\tilde{u}_i \neq 0$, sinon, d'après l'étape 2.2, on aurait

$$x_i = \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} u_j.$$

Or, par récurrence, on voit que u_i est combinaison linéaire des $x_1, \ldots, x_i$. Alors (B.1) impliquerait que les vecteurs $x_1, \ldots, x_i$ sont linéairement dépendants, ce qui est contraire à l'hypothèse.

On vérifie également que les vecteurs $u_1, \ldots, u_p$ sont orthonormaux. Ils sont normalisés aux étapes 1 et 2.3 de l'algorithme. Quant à l'orthogonalité, elle se montre par récurrence : si $k < i$, on a

$$\begin{aligned} \langle u_i, u_k \rangle &= \frac{1}{\|\tilde{u}_i\|} \left(\langle x_i, u_k \rangle - \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} \langle u_j, u_k \rangle \right) \\ &= \frac{1}{\|\tilde{u}_i\|} \left(\langle x_i, u_k \rangle - \alpha_{ik} \right) \qquad \text{[hypothèse de récurrence]} \\ &= 0. \end{aligned}$$

Enfin, la relation (B.1) est bien vérifiée puisqu'à chaque étape du calcul, u_i est combinaison linéaire de $x_1, \ldots, x_i$.

B.2 Applications linéaires

Supposons que $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ soient deux espaces vectoriels réels, de dimension finie n et m respectivement. Si L est une application linéaire de $\mathbb{E}$ dans $\mathbb{F}$, le *théorème du rang* affirme que

$$\boxed{\dim \mathbb{E} = \dim \mathcal{N}(L) + \dim \mathcal{R}(L).} \tag{B.2}$$

Soient $\mathcal{U} := (u_1, \ldots, u_n)$ une base de $\mathbb{E}$ et $\mathcal{V} := (v_1, \ldots, v_m)$ une base de $\mathbb{F}$. On peut associer à $L \in \mathcal{L}(\mathbb{E}, \mathbb{F})$ une *matrice* A, tableau de dimension $m \times n$, dont l'élément (i, j) est le nombre réel

$$A_{ij} := \text{composante } i \text{ de } L(u_j) \text{ dans la base } \mathcal{V}.$$

On dit que A est *de type* $m \times n$ et on note $\mathbb{R}^{m \times n}$ l'ensemble des matrices de type $m \times n$. On dit que A est *carrée* d'*ordre* n si $n = m$. On note $\mathcal{M}_{\mathcal{U},\mathcal{V}}(L) = A$, pour signifier que A est le représentant matriciel de L dans les bases $\mathcal{U}$ et $\mathcal{V}$. La *matrice identité* est la matrice carrée notée I vérifiant $I_{ij} = 0$ si $i \neq j$ et $I_{ii} = 1$ pour tout i.

La *trace* d'une matrice carrée $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ est le scalaire noté et défini par

$$\operatorname{tr} A = \sum_{i=1}^{n} A_{ii}.$$

L'ensemble $\mathbb{R}^{m \times n}$ des matrices de type $m \times n$ forme un espace vectoriel réel que l'on peut munir d'une norme. On dit que la norme matricielle est *sous-multiplcative* si lorsque $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ et $B \in \mathbb{R}^{p \times n}$, on a

$$\|AB\| \leqslant \|A\| \, \|B\|. \tag{B.3}$$

On dit que la norme matricielle $\| \cdot \|$ est *subordonnée* si elle peut être définie à partir de normes vectorielles dans $\mathbb{R}^n$ et $\mathbb{R}^m$ (notées de manière identique) par la formule

$$\|A\| = \sup_{\|x\| \leqslant 1} \|Ax\|.$$

Alors, pour tout x

$$\|Ax\| \leqslant \|A\| \, \|x\|.$$

On en déduit qu'une norme subordonnée est sous-multiplicative et vérifie $\|I\| = 1$. À chaque jeu de normes vectorielles correspond une norme matricielle subordonnée. On peut ainsi définir les normes matricielles ℓ_p à partir des normes vectorielles ℓ_p. On montre que pour $A = (A_{ij}) \in \mathbb{R}^{m \times n}$, on a

$$\|A\|_1 = \max_{1 \leqslant j \leqslant n} \|A_{\cdot j}\|_1, \tag{B.4}$$

$$\|A\|_2 = \|\sigma(A)\|_\infty, \tag{B.5}$$

$$\|A\|_\infty = \max_{1 \leqslant i \leqslant m} \|A_{i \cdot}\|_1. \tag{B.6}$$

En (B.5), on a noté $\sigma(A)$ le vecteur des valeurs singulières non nulles de A. Le calcul des normes matricielles ℓ_1 et ℓ_∞ peut se faire exactement en un temps linéaire en n. Celui de la norme ℓ_2 peut se faire à ε près en un temps polynomial en n et $\log \varepsilon^{-1}$. Celui des autres normes matricielles ℓ_p pour $p \in [1, \infty] \setminus \{1, 2, \infty\}$, de matrice avec des éléments rationnels, est NP-ardu, même de manière approchée [288].

On peut aussi munir $\mathbb{R}^{m \times n}$ du produit scalaire suivant

$$\langle \cdot, \cdot \rangle : (A, B) \in \mathbb{R}^{m \times n} \times \mathbb{R}^{m \times n} \mapsto \langle A, B \rangle := \operatorname{tr}(AB^{\mathsf{T}}) = \sum_{i,j} A_{ij} B_{ij}, \tag{B.7}$$

où $\operatorname{tr}(AB^{\mathsf{T}})$ désigne la trace de la matrice carrée AB^{T}. Il s'agit donc du produit scalaire euclidien de A et B vus comme éléments de $\mathbb{R}^{mn}$. La norme associée à ce produit scalaire est la *norme de Frobenius*, que l'on note

$$\|A\|_F := \left(\sum_{i,j} A_{ij}^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \tag{B.8}$$

Ce n'est pas une norme subordonnée si $n > 1$, puisque $\|I\|_F = \sqrt{n}$, mais c'est une norme sous-multiplcative. Pour une matrice orthogonale Q d'ordre n, on a $\|AQ\|_F = \|A\|_F$. On en déduit que si $\sigma(A)$ désigne le vecteurs des valeurs singulières non nulles de A, on a $\|A\|_F = \|\sigma(A)\|_2$ et donc aussi $\|A\|_2 \leqslant \|A\|_F$.

On note $\mathcal{N}(A) := \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = 0\}$ le *noyau* d'une matrice A et $\mathcal{R}(A) := \{Ax \in \mathbb{R}^m : x \in \mathbb{R}^n\}$ son *image*. On dit qu'une matrice A est *injective* si $\mathcal{N}(A) = \{0\}$ (dans ce cas $n \leqslant m$), qu'elle est *surjective* si $\mathcal{R}(A) = \mathbb{R}^m$ (dans ce cas $n \geqslant m$) et qu'elle est *bijective* ou *inversible* si elle est injective et surjective (dans ce cas $n = m$). Dire qu'une matrice A est d'ordre n est inversible revient à dire qu'il existe une matrice d'ordre n, notée A^{-1} et appelée *matrice inverse* de A, telle que

$$AA^{-1} = A^{-1}A = I.$$

On appelle *rang* de A la dimension de son image $\mathcal{R}(A)$.

Ayant choisi des bases sur $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$, les produits scalaires euclidiens sur $\mathbb{R}^n$ et $\mathbb{R}^m$ induisent des produits scalaires sur $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ (voir section B.1). Alors, si $L \in \mathcal{L}(\mathbb{E}, \mathbb{F})$,

on peut définir l'application linéaire adjointe $L^* \in \mathcal{L}(\mathbb{F}, \mathbb{E})$. La matrice associée à L^* est donnée par

$$\mathcal{M}_{\mathcal{V},\mathcal{U}}(L^*) = A^\mathsf{T},$$

où la composante (i, j) de la matrice A^T vaut

$$(A^\mathsf{T})_{ij} = A_{ji}.$$

La matrice A^T est appelée *matrice transposée* de A[1]. Les matrices A et A^T ont le même rang (le nombre de colonnes linéairement indépendantes est identique au nombre de lignes linéairement indépendantes). D'autre part, on a

$$\boxed{\mathcal{N}(A^\mathsf{T}) = \mathcal{R}(A)^\perp} \tag{B.9}$$

et donc aussi $\mathcal{N}(A)^\perp = \mathcal{R}(A^\mathsf{T})$ (l'orthogonal est pris ici pour le produit scalaire euclidien). On en déduit que A est injective si, et seulement si, A^T est surjective.

Une matrice carrée est dite *symétrique* si $A^\mathsf{T} = A$. Une telle matrice est dite *définie positive* si $x^\mathsf{T}Ax > 0$ pour tout vecteur x non nul dans $\mathbb{R}^n$ et elle est dite *semi-définie positive* si $x^\mathsf{T}Ax \geqslant 0$ pour tout vecteur $x \in \mathbb{R}^n$. On dit que A est *définie négative* (resp. *semi-définie négative*) si $-A$ est définie positive (resp. semi-définie positive). On note respectivement

$$\mathcal{S}^n, \quad \mathcal{S}^n_+ \quad \text{et} \quad \mathcal{S}^n_{++}$$

l'ensemble des matrices d'ordre n qui sont symétriques, symétriques semi-définies positives et symétriques définies positives. On notera aussi

$$\begin{aligned} A \succcurlyeq 0 \quad &\Longleftrightarrow \quad A \in \mathcal{S}^n_+ \\ A \succ 0 \quad &\Longleftrightarrow \quad A \in \mathcal{S}^n_{++}. \end{aligned}$$

Le lemme suivant nous sera utile, en particulier dans les méthodes de pénalisation. On trouvera à l'exercice B.15 une généralisation de ce résultat.

Lemme B.3 (Finsler, 1937) *Soient M et P deux matrices d'ordre n symétriques, avec M définie positive dans le noyau de P (c.-à-d., $u^\mathsf{T}Mu > 0$ pour tout vecteur non nul $u \in \mathcal{N}(P)$) et P semi-définie positive. Alors il existe $\bar{r} \in \mathbb{R}$ tel que, pour tout $r \geqslant \bar{r}$, $M + rP$ est définie positive.*

Démonstration. La démonstration la plus simple se fait par l'absurde. Si le résultat est faux, on peut trouver une suite $\{r_k\}$ de réels tendant vers l'infini tels que $M + r_k P$ n'est pas définie positive. Il existe alors une suite de vecteurs non nuls $\{u_k\} \subseteq \mathbb{R}^n$, tels que

$$u_k^\mathsf{T} M u_k + r_k (u_k^\mathsf{T} P u_k) \leqslant 0. \tag{B.10}$$

On peut supposer que $\|u_k\| = 1$ (il suffit en effet de diviser l'inégalité par $\|u_k\|^2 \neq 0$). En extrayant une sous-suite au besoin, on peut supposer que $u_k \to u$. En divisant l'inégalité (B.10) par r_k et en prenant la limite lorsque $k \to \infty$ on trouve $u^\mathsf{T} P u = 0$,

[1] Certains auteurs, en particulier francophones mais pas seulement, note ${}^tA$ la transposée de A. Nous avons préféré la notation A^T qui est plus répandue internationalement.

si bien que $u \in \mathcal{N}(P)$ (car $P \succcurlyeq 0$). L'inégalité (B.10) montre aussi que $u_k^\mathsf{T} M u_k \leqslant 0$, qui à la limite en k fournit $u^\mathsf{T} M u \leqslant 0$. On a obtenu une contradiction, puisque par hypothèse on doit avoir $u^\mathsf{T} M u > 0$ ($u \in \mathcal{N}(P)$ et $u \neq 0$). □

Le lemme de Finsler est illustré à la figure B.1 au moyen des courbes de niveau

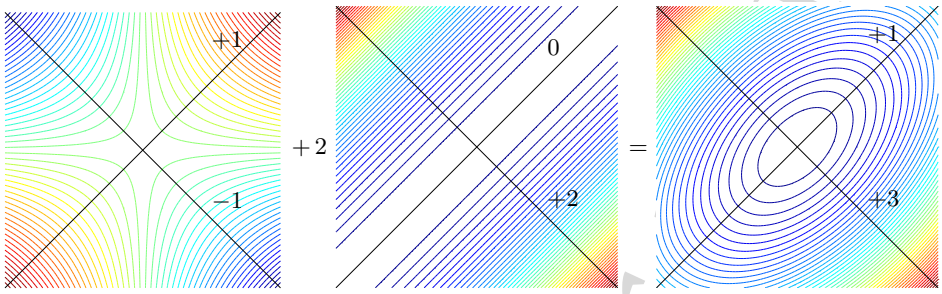


Fig. B.1. Illustration du lemme B.3 de Finsler, par les courbes de niveau des formes quadratiques associées aux matrices $M = \left(\begin{smallmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{smallmatrix}\right)$ (à gauche), $P = \left(\begin{smallmatrix} +1 & -1 \\ -1 & +1 \end{smallmatrix}\right)$ (au milieu) et $M + 2P = \left(\begin{smallmatrix} +2 & -1 \\ -1 & +2 \end{smallmatrix}\right)$ (à droite) ; M est définie positive sur $\mathcal{N}(P)$, P est semi-définie positive et $M + 2P$ définie positive.

de trois formes quadratiques : $x \mapsto x^\mathsf{T} M x$ qui est indéfinie mais définie positive sur $\mathcal{N}(P) = \mathbb{R}\left(\begin{smallmatrix} 1 \\ 1 \end{smallmatrix}\right)$ (à gauche), $x \mapsto x^\mathsf{T} P x$ qui est semi-définie positive (au centre) et $x \mapsto x^\mathsf{T}(M + 2P)x$ qui est définie positive (à droite).

Soit A une matrice de type $m \times n$. Le *pseudo-inverse* de Moore-Penrose [396, 432] de A est la matrice $A^\dagger$ de type $n \times m$ telle que, quel que soit $b \in \mathbb{R}^m$, $A^\dagger b$ est la solution de norme minimale du problème de moindres-carrés linéaire

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2.$$

On montre qu'il s'agit de l'unique matrice $A^\dagger$ de type $n \times m$ qui vérifie

$$AA^\dagger A = A, \quad A^\dagger A A^\dagger = A^\dagger, \quad (AA^\dagger)^\mathsf{T} = AA^\dagger \quad \text{et} \quad (A^\dagger A)^\mathsf{T} = A^\dagger A. \tag{B.11}$$

Si $A = V \Sigma U^\mathsf{T}$ est la factorisation en valeurs singulières de A, on a

$$A^\dagger = U \Sigma^{-1} V^\mathsf{T},$$

si bien que $AA^\dagger = VV^\mathsf{T}$ et $A^\dagger A = UU^\mathsf{T}$, qui sont les projecteurs orthogonaux sur $\mathcal{R}(A) = \mathcal{R}(V)$ et $\mathcal{R}(A^\mathsf{T}) = \mathcal{R}(U)$ respectivement.

On appelle *déterminant* l'unique application $\det : \mathbb{R}^{n \times n} \to \mathbb{R} : A \mapsto \det A$ qui considérée comme fonction des colonnes de A est multilinéaire et alternée (elle change de signe si on permute deux colonnes) et qui vérifie $\det I = 1$. De cette définition, on déduit la formule du déterminant :

$$\det A = \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_n} s_\sigma \, A_{\sigma_1 1} A_{\sigma_2 2} \cdots A_{\sigma_n n}.$$

On a noté $\mathcal{S}_n$ l'ensemble des *permutations* de $[1:n]$, c'est-à-dire des applications bijectives $\sigma : [1:n] \to [1:n]$; $\sigma(i) = \sigma_i$ la valeur en $i \in [1:n]$ de la permutation σ et s_σ la signature de σ. On sait que A est inversible si, et seulement si, son déterminant est non nul.

B.3 Analyse spectrale

Soit $A \in \mathcal{S}^n$. Alors toutes ses valeurs propres sont réelles. On les supposera ordonnées comme suit :

$$\lambda_1 \leqslant \cdots \leqslant \lambda_n.$$

On note $\Lambda = \mathrm{Diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$ et $v_1, \ldots, v_n$ les vecteurs propres associés aux λ_i. On peut supposer qu'ils forment une base orthonormale de $\mathbb{R}^n$; alors $V = (v_1 \cdots v_n)$ est une matrice orthogonale et on a $V^\mathsf{T} A V = \Lambda$, ainsi que la *factorisation spectrale*

$$A = V \Lambda V^\mathsf{T} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i v_i v_i^\mathsf{T}.$$

La première égalité se déduit de $AV = V\Lambda$ et de l'orthogonalité de V ; la seconde se vérifie en prenant l'élément (k, l) de chaque membre.

Théorème B.4 (principe du min-max de Courant-Fisher) *Soit $A \in \mathcal{S}^n$. Alors pour tout $i = 1, \ldots, n$, pour tout sous-espace vectoriel $\mathbb{E}'_i$ de dimension $n-i+1$ et pour tout sous-espace vectoriel $\mathbb{E}_i$ de dimension i, on a*

$$\min_{\substack{x \in \mathbb{E}'_i \\ \|x\|_2 = 1}} x^\mathsf{T} A x \leqslant \lambda_i \leqslant \max_{\substack{x \in \mathbb{E}_i \\ \|x\|_2 = 1}} x^\mathsf{T} A x. \tag{B.12}$$

On a égalité à gauche en prenant $\mathbb{E}'_i = \mathrm{vect}\{v_i, \ldots, v_n\}$ et égalité à droite en prenant $\mathbb{E}_i = \mathrm{vect}\{v_1, \ldots, v_i\}$. Dès lors, pour tout $i = 1, \ldots, n$:

$$\max_{\substack{s.e.v.\ \mathbb{E}' \\ \dim \mathbb{E}' = n-i+1}} \min_{\substack{x \in \mathbb{E}' \\ \|x\|_2 = 1}} x^\mathsf{T} A x = \lambda_i = \min_{\substack{s.e.v.\ \mathbb{E} \\ \dim \mathbb{E} = i}} \max_{\substack{x \in \mathbb{E} \\ \|x\|_2 = 1}} x^\mathsf{T} A x. \tag{B.13}$$

Démonstration. On peut écrire $\mathbb{E}'_i = \mathcal{R}(U)$, où U est une matrice $n \times (n-i+1)$ orthonormale ($U^\mathsf{T} U = I_{n-i+1}$). La première inégalité de (B.12) sera établie si l'on montre que $\min\{x^\mathsf{T} U^\mathsf{T} A U x : \|x\|_2 = 1\} \leqslant \lambda_i$. Comme $\dim \mathcal{R}(U) + \dim \mathrm{vect}\{v_1, \ldots, v_i\} > n$, on peut trouver un vecteur unitaire x' tel que $Ux' \in \mathrm{vect}\{v_1, \ldots, v_i\}$ (exercice B.1), ce qui s'écrit $Ux' = \sum_{k=1}^{i} \alpha_k v_k$ avec des α_k tels que $\sum_{k=1}^{i} \alpha_k^2 = 1$. On voit que $\min\{x^\mathsf{T} U^\mathsf{T} A U x : \|x\|_2 = 1\} \leqslant (x')^\mathsf{T} U^\mathsf{T} A U x' = \sum_{k=1}^{i} \alpha_k^2 \lambda_k \leqslant \lambda_i$.

On obtient la première égalité de (B.13) en prenant $\mathbb{E}' = \mathrm{vect}\{v_i, \ldots, v_n\}$ et $x = v_i$.

La seonde inéaglité de (B.12) et la seconde égalité de (B.13) se démontrent de la même manière. □

Corollaire B.5 *Soient A et $B \in \mathcal{S}^n$. Alors, pour tout $i = 1, \ldots, n$:*

$$\lambda_i(A) + \lambda_1(B) \leqslant \lambda_i(A+B) \leqslant \lambda_i(A) + \lambda_n(B),$$

ce qui implique que $\lambda_i(\cdot)$ est une application 1-lipschitzienne :

$$|\lambda_i(B) - \lambda_i(A)| \leqslant \|B - A\|_2.$$

Ce corollaire montre en particulier qu'en ajoutant à A une matrice semi-définie positive, on accroît ses valeurs propres. De plus, si B est définie positive, l'accroissement est strict et vaut au moins $\lambda_1(B)$.

Corollaire B.6 (entrelacement des valeurs propres) *Soient $A \in \mathcal{S}^n$ et $b \in \mathbb{R}^n$. Alors pour tout $i = 1, \ldots, n-1$:*

$$\lambda_i(A) \leqslant \lambda_i(A + bb^\mathsf{T}) \leqslant \lambda_{i+1}(A) \leqslant \lambda_{i+1}(A + bb^\mathsf{T}),$$

$$\lambda_i(A - bb^\mathsf{T}) \leqslant \lambda_i(A) \leqslant \lambda_{i+1}(A - bb^\mathsf{T}) \leqslant \lambda_{i+1}(A).$$

Théorème B.7 (principe variationnel de Ky Fan) *Soit $A \in \mathcal{S}^n$. Alors pour tout $p = 1, \ldots, n$, on a*

$$\lambda_{n-p+1} + \cdots + \lambda_n = \max_{\substack{X \in \mathbb{R}^{n \times p} \\ X^\mathsf{T} X = I_p}} \langle AX, X \rangle.$$

Théorème B.8 (inégalité de trace de Ky Fan) *Pour tout A et $B \in \mathcal{S}^n$, on a*

$$\langle A, B \rangle \leqslant \lambda(A)^\mathsf{T} \lambda(B), \tag{B.14}$$

où $\langle \cdot, \cdot \rangle$ désigne le produit scalaire (B.7). On a égalité ci-dessus si, et seulement si, l'on peut obtenir les factorisations spectrales « ordonnées » $\lambda(A)$ et $\lambda(B)$ de A et B par la même matrice orthogonale, c'est-à-dire si, et seulement si,

$$\exists V \text{ orthogonale} : \quad A = V \ \mathrm{Diag}(\lambda(A))\ V^\mathsf{T} \quad \text{et} \quad B = V \ \mathrm{Diag}(\lambda(B))\ V^\mathsf{T}.$$

On sait que A et $B \in \mathcal{S}^n$ sont simultanément diagonalisables si, et seulement si, elles commutent. La condition énoncée dans le théorème B.8 ci-dessus pour avoir l'égalité dans (B.14) est plus forte, car elle requiert que les matrices diagonales

obtenues soient *ordonnées*. Ainsi $A = \mathrm{Diag}(1,2)$ et $B = \mathrm{Diag}(2,1)$ commutent alors que $\langle A, B\rangle = 4$ diffère de $\lambda(A)^{\mathsf{T}}\lambda(B) = 5$.

L'inégalité de Ky Fan est un raffinement de l'inégalité de Cauchy-Schwarz sur $\mathcal{S}^n$, dans le sens où cette dernière peut se déduire de la première. En effet, si $A = V\,\mathrm{Diag}(\lambda(A))\,V^{\mathsf{T}}$ avec V orthogonale, on a

$$\|\lambda(A)\|_2 = \|\,\mathrm{Diag}(\lambda(A))\|_F = \|V\,\mathrm{Diag}(\lambda(A))\,V^{\mathsf{T}}\|_F = \|A\|_F.$$

Dès lors, l'inégalité de Ky Fan et l'inégalité de Cauchy-Schwarz sur $\mathbb{R}^n$ donnent

$$\langle A, B\rangle \leqslant \lambda(A)^{\mathsf{T}}\lambda(B) \leqslant \|\lambda(A)\|_2\,\|\lambda(B)\|_2 = \|A\|_F\,\|B\|_F.$$

On en déduit l'inégalité de Cauchy-Schwarz sur $\mathcal{S}^n$ en tenant compte également de celle obtenue en remplaçant ci-dessus B par $-B$.

En appliquant l'inégalité de Ky Fan à des matrices diagonales, on trouve une *inégalité de Hardy, Littlewood et Pólya* [285], simple à démontrer directement, selon laquelle le produit scalaire euclidien de deux vecteurs x et y est majoré par celui des vecteurs $[x]$ et $[y]$ obtenus à partir des vecteurs précédents en ordonnant leurs composantes par ordre décroissant :

$$\forall\, x, y \in \mathbb{R}^n : \qquad x^{\mathsf{T}}y \leqslant [x]^{\mathsf{T}}[y].$$

Un *mineur principal* d'une matrice carré A est le déterminant d'une sous-matrice carrée de A dont la diagonale est une partie de celle de A : si A est d'ordre n, il s'agit d'un

$$m_I := \det(A_{ij})_{i,j\in I}, \quad \text{où } I \subseteq [1\,{:}\,n].$$

Les *mineurs principaux de tête* sont les $m_{[1\,:\,j]}$ pour $j = 1, \ldots, n$.

Proposition B.9 (critères de définie positivité) *Les propriétés suivantes sont équivalentes :*

(*i*) *A est définie positive,*
(*ii*) *toutes les valeurs propres de A sont strictement positives,*
(*iii*) *tous les mineurs principaux de tête de A sont strictement positifs.*

Proposition B.10 (critères de semi-définie positivité) *Les propriétés suivantes sont équivalentes :*

(*i*) *A est semi-définie positive,*
(*ii*) *toutes les valeurs propres de A sont positives,*
(*iii*) *tous les mineurs principaux de A sont positifs.*

Démonstration. [$(i) \Leftrightarrow (ii)$] Vient du fait qu'une matrice symétrique s'écrit $A = \sum_i \lambda_i v_i v_i^{\mathsf{T}}$ où les λ_i sont ses valeurs prorpres et les v_i sont les vecteurs propres orthogonaux associés.

[$(i) \Rightarrow (iii)$] Car alors, pour tout $\varepsilon > 0$, $A + \varepsilon I \succ 0$. Tous les mineurs principaux de $A + \varepsilon I$ sont donc > 0. On passe alors à la limite lorsque $\varepsilon \downarrow 0$, en utilisant la continuité du déterminant.

$[(iii) \Rightarrow (i)]$ On observe d'abord que, dans ce cas, lorsqu'on ajoute $\varepsilon > 0$ à un élément de la diagonale de A on accroît (pas nécessairement strictement) ses mineurs principaux. Par récurrence, il en est de même si l'on ajoute $\varepsilon > 0$ à plusieurs éléments diagonaux. Montrons maintenant que si l'on ajoute $\varepsilon > 0$ à *tous* les éléments diagonaux de A, les mineurs principaux de tête augmentent strictement ; plus précisément, si on note m_I^ε les mineurs de $A + \varepsilon I$, on a $m^\varepsilon_{[1\,:\,j]} \geqslant \varepsilon^j$ pour tout j. Montrons cela par récurrence. L'inégalité est claire pour $j = 1$. Puis

$$m^\varepsilon_{[1\,:\,j]} = \underbrace{\det\left(A_{[1\,:\,j],[1\,:\,j]} + \varepsilon \sum_{i=1}^{j-1} (e^i)^{\mathsf{T}} e^i\right)}_{\geqslant 0} + \varepsilon\, m^\varepsilon_{[1\,:\,j-1]} \geqslant \varepsilon^j.$$

Par la proposition B.9, on en déduit que $A + \varepsilon I \succ 0$ et donc que $A \succcurlyeq 0$. □

Remarques B.11

1. Une matrice ne sera pas nécessairement semi-définie positive si seuls ses mineurs principaux *de tête* sont positifs ; contre-exemple : $\mathrm{Diag}(0, -1)$.
2. Le critère (iii) ne peut être inversé pour qualifier une matrice semi-définie *négative*. Ainsi
$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$
a tous ses mineurs principaux négatifs, mais n'est pas définie négative (ni définie positive d'ailleurs). La raison vient de ce que $\det(-A_{I,I}) = \det A_{I,I}$, si $|I|$ est pair.

B.4 Matrices complexes

B.4.1 Nombre, vecteur et matrice complexes

On note $\mathrm{i} \in \mathbb{C}$ le *nombre imaginaire pur*, celui qui vérifie $\mathrm{i}^2 = -1$. Si $x = a + \mathrm{i}b \in \mathbb{C}$, avec a et $b \in \mathbb{R}$, on note $|x| = (a^2 + b^2)^{1/2}$ le *module* de x et $\bar{x} = a - ib \in \mathbb{C}$ son *nombre complexe conjugué*. Pour des nombres x et $y \in \mathbb{C}$, on a

$$|x + y| \leqslant |x| + |y| \qquad \text{et} \qquad |xy| = |x|\,|y|.$$

Pour une matrice $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$, on note A^{H} sa *transposée-conjuguée*, qui est définie par

$$(A^{\mathsf{H}})_{ij} = \bar{A}_{ji}.$$

Si A et $B \in \mathbb{C}^{m\times n}$, on a

$$(AB)^{\mathsf{H}} = B^{\mathsf{H}} A^{\mathsf{H}}.$$

Une matrice carrée $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ est dite *unitaire* si $A^{\mathsf{H}} A = I$ ou, de manière équivalente, si $AA^{\mathsf{H}} = I$.

Dans sa notation matricielle, un vecteur $v \in \mathbb{C}^n$ est considéré comme une matrice $n \times 1$. On munit $\mathbb{C}^n$ de la norme

$$v \in \mathbb{C}^n \mapsto \|v\| = (v^{\mathsf{H}} v)^{1/2} = \left(\sum_{i=1}^{n} |v_i|^2 \right)^{1/2} \in \mathbb{R}.$$

On dit que $v \in \mathbb{C}^n$ est un *vecteur propre* de *valeur propre* $\lambda \in \mathbb{C}$ de $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ si

$$Av = \lambda v \qquad \text{et} \qquad v \neq 0. \tag{B.15}$$

Dans ce cas, quel que soit $\alpha \in \mathbb{C}$, non nul, αv est encore vecteur propre de valeur propre λ. On peut donc normaliser v en supposant que $\|v\| = 1$ (il suffit de multiplier v par $1/\|v\|$) ; on dit alors que le vecteur propre est *unitaire*. L'ensemble des valeurs propres de A est appelé le *spectre* de A et est noté $\lambda(A)$; c'est donc une partie de $\mathbb{C}$. Le *rayon spectral* est la quantité notée et définie par

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

B.4.2 Matrice hermitienne

On dit qu'une matrice $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ est *hermitienne* si $A^{\mathsf{H}} = A$. On note

$$\mathcal{H}^n$$

l'espace vectoriel sur $\mathbb{R}$ formé des matrices complexes hermitiennes d'ordre n (ce n'est pas un espace vectoriel sur $\mathbb{C}$ car iA n'est pas hermitienne si A est hermitienne non nulle).

Si A, $B \in \mathcal{H}^n$ et $v \in \mathbb{C}^n$, on montre facilement que $v^{\mathsf{H}} A v \in \mathbb{R}$, que $\operatorname{Diag} A \in \mathbb{R}^n$, que $\operatorname{tr} A \in \mathbb{R}$ et que $\operatorname{tr} AB \in \mathbb{R}$. On peut donc munir $\mathcal{H}^n$ du produit scalaire

$$\langle \cdot, \cdot \rangle : (A, B) \in \mathcal{H}^n \times \mathcal{H}^n \mapsto \langle A, B \rangle = \operatorname{tr} AB \in \mathbb{R},$$

qui fait de $\mathcal{H}^n$ un espace vectoriel euclidien.

Une matrice hermitienne a des valeurs propres réelles : $\lambda(A) \subseteq \mathbb{R}$. Elle admet la décomposition spectrale

$$A = V \Lambda V^{\mathsf{H}} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i v_i v_i^{\mathsf{H}}, \tag{B.16}$$

où $V := (v_1 \ \cdots \ v_n) \in \mathbb{C}^{n \times n}$ est une matrice unitaire et Λ est la matrice diagonale réelle $\operatorname{Diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n) \in \mathbb{R}^{n \times n}$, formée des valeurs propres de A. On peut donc définir la *semi-définie positivité* d'une matrice hermitienne A par l'une des propriétés équivalentes suivantes :

$$\forall\, x \in \mathbb{C}^n : \quad x^{\mathsf{H}} A x \geqslant 0,$$

toutes les valeurs propres de A sont positives.

Cette propriété est notée $A \succcurlyeq 0$.

La valeur propre maximale $\lambda_{\max}(A)$ d'une matrice hermitienne $A \in \mathcal{H}^n$ vérifie la propriété

$$\lambda_{\max}(A) = \max_{\substack{x \in \mathbb{C}^n \\ \|x\| = 1}} x^{\mathsf{H}} A x, \tag{B.17}$$

le maximum étant atteint si, et seulement si, x est dans l'espace propre associé à la valeur propre maximale.

B.5 Factorisations

Une matrice A est dite *triangulaire inférieure* si $A_{ij} = 0$ lorsque $i < j$. Elle est dite *triangulaire supérieure* si A^T est triangulaire inférieure. Une matrice triangulaire (inférieure ou supérieure) A est dite *unitaire* si $A_{ii} = 1$ pour tout i. La résolution du système linéaire $Ax = b$, où A est une matrice carrée triangulaire inférieure inversible se fait sans difficulté en commençant par la détermination de x_1 (par le première équation), puis de x_2 par la seconde (car on connaît maintenant x_1) et ainsi de suite. Si A est triangulaire supérieure, on déterminera successivement x_n, x_{n-1}, *etc.*

Une matrice carrée Q est dit *orthogonale* si $QQ^\mathsf{T} = I$, c'est-à-dire si Q^T est l'inverse de Q. Il est donc aussi aisé de résoudre un système linéaire $Qx = b$ lorsque Q est orthogonale.

Les factorisations matricielles rappelées ci-dessous permettent d'écrire une matrice donnée sous la forme d'un produit de matrices triangulaire ou orthogonale.

B.5.1 Factorisation QR

La *factorisation* QR d'une patrice A de type $m \times n$ est la factorisation suivante

$$A = QR,$$

où Q est orthogonale d'ordre m et R est triangulaire supérieure de type $m \times n$. Elle est le plus souvent obtenue par des réflexions de Houselholder ou des rotations de Givens.

Réflexions de Householder

Rotations de Givens

Un peu plus coûteuses que les réflexions de Householder pour une matrice pleine, les rotations de Givens sont en général utilisées lorsque la matrice a une structure creuse, en particulier pour des matrices bandes ou des matrices de Hessenberg. L'approche a alors un coût proportionnel au nombre d'éléments non nuls à gauche de la diagonale dans le *profil ligne* de la matrice (tout élément ayant sur la même ligne et à sa gauche un élément non nul est pris dans le profil).

La *rotation de Givens* G^{kl}, $k < l$, est une matrice qui ne diffère de la matrice identité que par ses lignes et colonnes k et l et de manière plus précise, par la sous-matrice d'ordre 2 :

$$G^{kl}_{\{k,l\},\{k,l\}} = \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix},$$

où $c := \cos\theta$ et $s := \sin\theta$. C'est une matrice antisymétrique et orthogonale. On se sert de G^{kl} pour annuler la composante k ou l de $G^{kl}v$. Par exemple, pour annuler la composante l, il faut que $sv_k = cv_l$ ou $\operatorname{tg}\theta = v_l/v_k$. Comme $\cos\theta = (1 + \operatorname{tg}^2\theta)^{-1/2}$ et $\sin\theta = (1 - \cos^2\theta)^{1/2}$, il suffit donc de prendre

$$c = \frac{v_k}{(v_k^2 + v_l^2)^{1/2}} \qquad \text{et} \qquad s = \frac{v_l}{(v_k^2 + v_l^2)^{1/2}}.$$

Il n'est donc pas nécessaire de calculer θ.

Si A est une matrice, il est clair que $G^{kl}A$ ne modifie que les lignes k et l de A et si ces lignes ont des éléments nuls sur la même colonne, ces éléments restent nuls après multiplication à gauche par la matrice de Givens. Pour obtenir la factorisation QR d'une matrice pleine A, on procède en général comme suit. On annule successivement les éléments sous la diagonale, colonne par colonne et de bas en haut, comme l'illustre l'exemple 4×3 ci-dessous, dans lequel les éléments modifiés par les opérateurs G^{kl} sont soulignés :

$$A = \begin{pmatrix} \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \end{pmatrix} \xrightarrow{G^{34}} \begin{pmatrix} \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \\ \underline{\times} & \underline{\times} & \underline{\times} \\ \underline{0} & \underline{\times} & \underline{\times} \end{pmatrix} \xrightarrow{G^{23}} \begin{pmatrix} \times & \times & \times \\ \underline{\times} & \underline{\times} & \underline{\times} \\ \underline{0} & \underline{\times} & \underline{\times} \\ 0 & \times & \times \end{pmatrix} \xrightarrow{G^{12}} \begin{pmatrix} \underline{\times} & \underline{\times} & \underline{\times} \\ \underline{0} & \underline{\times} & \underline{\times} \\ 0 & \times & \times \\ 0 & \times & \times \end{pmatrix}$$
$$\xrightarrow{G^{34}} \begin{pmatrix} \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & \underline{\times} & \underline{\times} \\ 0 & \underline{0} & \underline{\times} \end{pmatrix} \xrightarrow{G^{23}} \begin{pmatrix} \times & \times & \times \\ 0 & \underline{\times} & \underline{\times} \\ 0 & \underline{0} & \underline{\times} \\ 0 & 0 & \times \end{pmatrix} \xrightarrow{G^{34}} \begin{pmatrix} \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & \underline{\times} \\ 0 & 0 & \underline{0} \end{pmatrix} = R.$$

Quant à la matrice orthogonale Q^{T}, elle est le produit de droite à gauche des matrices de Givens successivement utilisées.

B.5.2 Factorisation gaussienne (ou LU)

> *Newton, in notes that he would rather not have seen published, described a process for solving simultaneous equations that later authors applied specifically to linear equations. This method — which Euler did not recommend, which Legendre called "ordinary," and which Gauss called "common" — is now named after Gauss: "Gaussian" elimination.*
>
> J. F. Grcar [258 ; 2011].

On dit que A admet une *factorisation gaussienne ou LU* si l'on peut écrire

$$A = LU,$$

avec L triangulaire inférieure unitaire et U triangulaire supérieure. Un intérêt de cette factorisation est que, si A est inversible (donc L et U le sont, car $0 \neq \det A = (\det L)(\det U)$), alors on peut résoudre le système linéaire $Ax = b$ en résolvant successivement les systèmes triangulaires $Ly = b$ (en y) et $Ux = y$ (en x).

Proposition B.12 (factorisation gaussienne) *Une matrice A d'ordre n a une unique factorisation gaussienne si, et seulement si,*

$$\text{pour tout } k = 1, \dots, n-1, \quad A_k := A^{(1,\dots,k)}_{(1,\dots,k)} \text{ est inversible.} \tag{B.18}$$

Si (B.18) n'a pas lieu, la factorisation gaussienne peut exister, mais elle n'est pas unique.

Démonstration. Supposons que (B.18) ait lieu. L'existence et l'unicité de la factorisation gaussienne peut se montrer en factorisant successivement les matrices principales de tête A_k, pour $k = 1, \dots, n-1$. Soit $1 \leqslant k \leqslant n-1$ et supposons que A_k ait une unique factorisation gaussienne : $A_k = L_k U_k$ (c'est clairement le cas pour $k = 1$). Alors

$$A_{k+1} = \begin{pmatrix} L_k U_k & b \\ c^{\mathsf{T}} & \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_k & 0 \\ l^{\mathsf{T}} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_k & u \\ 0 & \beta \end{pmatrix}, \tag{B.19}$$

où b, $c \in \mathbb{R}^k$ et $\alpha \in \mathbb{R}$. Par (B.18), $0 \neq \det A_k = (\det L_k)(\det U_k)$, si bien que L_k et U_k sont inversibles. Alors, l, u et β sont déterminés de manière unique par

$$U_k^{\mathsf{T}} l = c, \quad L_k u = b \quad \text{et} \quad \beta = \alpha - l^{\mathsf{T}} u.$$

Donc A_{k+1} a une unique factorisation gaussienne.

Réciproquement, supposons que $A = LU$ soit l'unique factorisation gaussienne de A. Du fait de la structure triangulaire de L et U, on a $A_k = L_k U_k$, avec

$$L_k := L^{(1,\dots,k)}_{(1,\dots,k)} \quad \text{et} \quad U_k := U^{(1,\dots,k)}_{(1,\dots,k)}, \tag{B.20}$$

et donc $\det A_k = (\det L_k)(\det U_k) = \det U_k$ (car L_k est unitaire). Dès lors, si (B.18) n'a pas lieu, $U_{kk} = 0$ pour un indice $k \in [1 : n-1]$. On a aussi

$$A = \sum_{i=1}^{n} L^i U_i = \sum_{i=1}^{k-1} L^i U_i + (L^k + L^{k+1}) U_k + L^{k+1}(U_{k+1} - U_k) + \sum_{i=k+2}^{n} L^i U_i.$$

On obtient donc une factorisation de $A = \tilde{L}\tilde{U}$, avec

$$\tilde{L}^i = \begin{cases} L^i & \text{si } i \neq k \\ L^k + L^{k+1} & \text{si } i = k \end{cases} \quad \text{et} \quad \tilde{U}_i = \begin{cases} U_i & \text{si } i \neq k+1 \\ U_{k+1} - U_k & \text{si } i = k+1. \end{cases}$$

Il s'agit bien d'une nouvelle factorisation gaussienne puisque la matrice $\tilde{L}$ est triangulaire inférieure unitaire et est différente de L (car $L_{k+1,k+1} = 1$) et la matrice $\tilde{U}$ est triangulaire supérieure ($\tilde{U}_{k+1,j} = 0$ si $j \leqslant k$ parce que $U_{kk} = 0$). Cette contradiction avec l'hypothèse de départ montre que (B.18) est impliquée par celle-ci.

Pour la dernière partie du résultat, on constate en effet que la factorisation gaussienne de la matrice nulle existe pour une matrice triangulaire unitaire L arbitraire : $0 = L0$. □

Sous les conditions (B.18), il résulte de la démonstration précédente que les éléments diagonaux de U s'écrivent $U_{11} = A_{11}$ et pour $i = 2, \dots, n$:

$$U_{kk} = \frac{\det A^{(1,\dots,k)}_{(1,\dots,k)}}{\det A^{(1,\dots,k-1)}_{(1,\dots,k-1)}}.$$

En effet, $A_k = L_k U_k$, où L_k et U_k sont données par (B.20), si bien que $\det A_k = \det U_k$ (L_k est unitaire). Alors le calcul (B.19) conduit à $\det A_{k+1} = (\det U_k) U_{kk} = (\det A_k) U_{kk}$. En fait, tous les éléments de L et U peuvent s'exprimer par des déterminants [212, 299].

La manière habituelle de construire les facteurs L et U de A est de procéder par transformations successives de $A = A^{(1)}, \ldots, A^{(n)} = U$. Les éléments des $k-1$ premières colonnes de $A^{(k)}$ situés sous la diagonale sont nuls. Pour obtenir $A^{(k+1)}$ à partir de $A^{(k)}$, on annule la partie sous la diagonale de la colonne k de $A^{(k)}$, sans toucher aux $k-1$ premières colonnes :

$$A^{(k+1)} = M_k A^{(k)}, \quad \text{avec} \quad M_k := I - v_k e_k^{\mathsf{T}}, \tag{B.21}$$

où e_k est le k-ième vecteur de base de $\mathbb{R}^n$ et le vecteur v_k a ses composantes données par : $(v_k)_i = 0$ si $i \leqslant k$ et $(v_k)_i = A_{ik}^{(k)}/A_{kk}^{(k)}$ si $i > k$. Dans cette opération, l'élément $A_{kk}^{(k)}$ est appelé le *pivot*. Après $n-1$ étapes, on obtient la matrice triangulaire supérieure

$$U = M_{n-1} M_{n-2} \cdots M_1 A \tag{B.22}$$

Le facteur

$$L = M_1^{-1} \cdots M_{n-2}^{-1} M_{n-1}^{-1} \tag{B.23}$$

s'obtient facilement car $M_k^{-1} = I + v_k e_k^{\mathsf{T}}$. Comme produit de matrices triangulaires inférieures unitaires, L a aussi cette propriété. D'ailleurs, on vérifie aisément que

$$L = I + v_1 e_1^{\mathsf{T}} + \cdots + v_{n-1} e_{n-1}^{\mathsf{T}}.$$

Ce procédé n'est autre que l'*élimination gaussienne* (voir l'épigraphe de cette section), qui consiste à résoudre le système linéaire $Ax = b$ en éliminant l'une après l'autre les variables $x_1, x_2, \ldots, x_{n-1}$, jusqu'à l'obtension d'une équation en x_n seul, que l'on résout ; on inverse ensuite l'ordre pour calculer successivement $x_{n-1}, x_{n-2}, \ldots, x_1$. Explicitons cela. La première équation permet d'exprimer x_1 comme fonction affine de $x_2, \ldots, x_n$ par

$$x_1 = \frac{1}{A_{11}} \left(b_1 - \sum_{j=2}^{n} A_{1j} x_j \right),$$

et d'éliminer x_1 des équations d'indice $i \geqslant 2$, ce qui conduit au système

$$M_1 A x = M_1 b,$$

avec M_1 définie comme en (B.21). Ensuite, on peut utiliser la seconde équation de ce dernier système pour exprimer x_2 comme fonction affine de $x_3, \ldots, x_n$ et en éliminant x_2 des équations d'indice $i \geqslant 3$ de ce dernier système, on obtient le nouveau système

$$M_2 M_1 A x = M_2 M_1 b,$$

avec M_2 définie comme en (B.21). Si l'on poursuit de la sorte, on obtient finalement l'équation

$$U x = L^{-1} b,$$

avec U et L donnés par (B.22) et (B.23). Ce système se résout en calculant d'abord x_n par la dernière équation, puis x_{n-1} par l'équation $n-1$, et ainsi de suite jusqu'à la première équation qui donne x_1.

L'*élimination gaussienne par blocs* sur la matrice carrée

$$M = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix},$$

avec A carrée inversible, conduit à la matrice

$$\begin{pmatrix} I & 0 \\ CA^{-1} & I \end{pmatrix} M = \begin{pmatrix} A & B \\ 0 & A_M^s \end{pmatrix},$$

où

$$A_M^s := D - CA^{-1}B$$

est appelé le *complément de Schur* de A dans M [126]. On obtient ainsi la factorisation par blocs de M suivante

$$M = \begin{pmatrix} I & 0 \\ CA^{-1} & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ 0 & A_M^s \end{pmatrix}.$$

B.5.3 Factorisation de Cholesky

On suppose ci-dessous que A est une matrice symétrique d'ordre n.

Le cas défini positif

Considérons d'abord le cas où $A \succ 0$. Comme tous les mineurs principaux en tête de A sont non nuls, A a une factorisation gaussienne unique (proposition B.12). L'unicité implique que la factorisation est nécessairement de la forme

$$A = R^\mathsf{T} R = LDL^\mathsf{T},$$

où L est triangulaire inférieure unitaire, $D \succ 0$ est diagonale et $R = D^{1/2}L^\mathsf{T}$ est triangulaire supérieure. Ces factorisations sont dites *de Cholesky* [110 ; 1910] et sont déterminées de façon unique. La forme LDL^T permet de ne pas devoir calculer n racines carrées. Cette factorisation permet de montrer l'équivalence suivante

$$A \succ 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \forall\, I = [1:k] : \quad \det A_{I,I} \geqslant 0. \tag{B.24}$$

Un premier algorithme calculant L et D s'obtient à partir de l'expression de l'élément (i,j) de A : pour tout $i \geqslant j$,

$$A_{ij} = \sum_{k=1}^{j} L_{ik} D_{kk} L_{jk}.$$

On peut donc calculer les éléments de L et D de proche en proche, en commençant par les petits indices :

Algorithme B.13 (Factorisation de Cholesky I)

Pour $i = 1, \ldots, n$:
  Pour $j = 1, \ldots, i-1$:
    $L_{ij} = (A_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} L_{ik} D_{kk} L_{jk})/D_{jj}$;
  $L_{ii} = 1$;
  $D_{ii} = A_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} L_{ik}^2 D_{kk}$;

On peut aussi procéder de la manière suivante. On a

$$LDL^{\mathsf{T}} = \sum_{k=1}^{n} D_{kk} L_{:k} L_{:k}^{\mathsf{T}}, \tag{B.25}$$

où $L_{:k}$ est la k-ième colonne de L. À l'étape k de l'algorithme ci-dessous, on obtient la matrice $A^{(k)}$ en retranchant de $A^{(k-1)}$ la matrice $D_{kk} L_{:k} L_{:k}^{\mathsf{T}}$, de manière à annuler ses ligne et colonne k :

$$A^{(k)} = A^{(k-1)} - D_{kk} L_{:k} L_{:k}^{\mathsf{T}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & B^{(k)} \end{pmatrix},$$

avec $L_{:k}^{\mathsf{T}} = (0, \ldots, 0, 1, L_{k+1,k}, \ldots, L_{nk})$ et $B^{(k)}$ est d'ordre $n-k$. Ceci conduit à l'algorithme suivant, dans lequel on suppose que les matrices successives $A^{(k)}$ sont récrites dans A, dont seule la partie triangulaire inférieure st utilisée.

Algorithme B.14 (Factorisation de Cholesky II)

Pour $k = 1, \ldots, n-1$:
  $D_{kk} = A_{kk}$;
  Pour $i = k+1, \ldots, n$:
    $L_{ik} = A_{ik}/D_{kk}$;
    Pour $j = k+1, \ldots, i$:
      $A_{ij} := A_{ij} - D_{kk} L_{ik} L_{jk}$;

Ce second algorithme a l'avantage de permettre le pivotage, ce qui n'est pas le cas du premier puisque l'élément diagonal D_{ii} (sur lequel porte pivotage) n'apparaît qu'après le calcul de la i-ième colonne de L. À l'étape k, on pourra choisir comme *pivot*, un élément maximal de la diagonale de $B^{(k)}$, à savoir celui dont l'indice s_k est déterminé par

$$s_k = \min\left(\arg\max\{B_{ii}^{(k)} : i \in [k:n]\}\right).$$

On permute ensuite les lignes k et s_k de $L^{(k)}$ et les lignes et colonnes d'indices k et s_k de $B^{(k)}$.

Le cas semi-défini positif

Une matrice A semi-définie positive, ce que l'on note $A \succcurlyeq 0$, admet également une factorisation de Cholesky [291 ; section 10.3]. Pour le voir, il suffit de partir de la

factorisation QR de $A^{1/2} = QR$, dans laquelle Q est orthogonale et R est triangulaire supérieure, et d'écrire

$$A = (A^{1/2})^{\mathsf{T}}(A^{1/2}) = R^{\mathsf{T}}R. \tag{B.26}$$

Cependant, le facteur R n'est pas nécessairement unique dans ce cas, comme le montre l'exemple suivant

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \cos\theta & \sin\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \cos\theta \\ 0 & \sin\theta \end{pmatrix}.$$

On peut aussi avoir la factorisation

$$A = LDL^{\mathsf{T}}, \tag{B.27}$$

avec L triangulaire inférieure unitaire et $D \succcurlyeq 0$ diagonale. Pour voir cela, on peut par exemple partir de la factorisation $A = R^{\mathsf{T}}R = \sum_k (R_k)^{\mathsf{T}}R_k$ et modifier les colonnes R_k de R de manière à avoir soit $R_{kk} \neq 0$, soit $R_k = 0$. Dans ce but, on examine successivement les colonnes d'indice $k = 1, \ldots, n-1$: si $R_{kk} \neq 0$, on garde R_k inchangé ; sinon on l'annule après l'avoir ajoutée à R_{k+1}. On garde donc la factorisation $A = R^{\mathsf{T}}R$. On obtient alors (B.27) en prenant $D_{kk} = R_{kk}^2$, tandis que la colonne k de L est le vecteur unité e_k si $R_{kk} = 0$ et $L_k = R_k/R_{kk}$ sinon.

La factorisation (B.27) peut s'obtenir par l'algorithme B.13, en annulant les éléments L_{ij} lorsque $D_{jj} = 0$, mais cet algorithme est instable lorsque A n'est pas définie positive. Mieux vaut utiliser l'algorithme B.14 avec pivotages.

La caractérisation (B.24) ne se généralise pas aux matrices semi-définies positives. Cependant, on peut montrer que A est semi-définie positive si, et seulement si, tous ses mineurs principaux sont positifs :

$$A \succcurlyeq 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \forall\, I \subseteq [1:n] : \quad \det A_{I,I} \geqslant 0. \tag{B.28}$$

Mise à jour des facteurs pour une correction de rang un

Supposons qu'une matrice $\bar{A}$ soit obtenue par une correction de rang 1 additive d'une matrice A d'ordre n symétrique définie positive :

$$\bar{A} = A + \alpha\, vv^{\mathsf{T}},$$

où $\alpha > 0$ est un réel et $v \in \mathbb{R}^n$. Bien sûr, $\bar{A}$ est encore d'ordre n symétrique définie positive. Si on connaît les facteurs de Cholesky de $A = LDL^{\mathsf{T}}$, on peut obtenir ceux de $\bar{A} = \bar{L}\bar{D}\bar{L}^{\mathsf{T}}$ en $O(n^2)$ opérations plutôt qu'avec les $O(n^3)$ opérations que requiert une factorisation directe de $\bar{A}$. On peut s'y prendre comme suit.

Avec p solution de $Lp = v$ (ceci requiert $O(n^2)$ opérations), on a

$$\bar{A} = L(D + \alpha\, pp^{\mathsf{T}})L^{\mathsf{T}}.$$

On se ramène ainsi à la factorisation de Cholesky de $D + \alpha\, pp^{\mathsf{T}} = \tilde{L}\tilde{D}\tilde{L}^{\mathsf{T}}$ et au produit $\bar{L} = L\tilde{L}$. Bien sûr, il suffit de prendre $\bar{D} = \tilde{D}$. Nous allons montrer que cela ne demande pas plus de $O(n^2)$ opérations.

Considérons d'abord la factorisation de Cholesky de $D + \alpha\, pp^{\mathsf{T}} = \tilde{L}\tilde{D}\tilde{L}^{\mathsf{T}}$. En examinant les colonnes des deux membres de cette identité, on remarque par récurrence

sur $j = 1, \ldots, n$, que la partie de la colonne j de $\tilde{L}$ sous la diagonale est parallèle à la partie correspondante de p : en notant $\tilde{L}^j$ la j-ième colonne de $\tilde{L}$ et e^k le k-ième vecteur de base de $\mathbb{R}^n$, on a

$$\tilde{L}^j = e^j + \beta_j \left(p_j e^j + \cdots + p_n e^n \right). \tag{B.29}$$

On vérifie que le coefficient de proportionnalité β_j s'écrit

$$\beta_j = \frac{p_j s_{j-1}}{\tilde{D}_j}, \qquad \text{où } s_j := \alpha - \textstyle\sum_{k=1}^{j} \beta_k^2 \tilde{D}_k \text{ et } s_0 = \alpha.$$

En prenant l'élément (j, j) de l'identité $D + \alpha\, pp^{\mathsf{T}} = \tilde{L}\tilde{D}\tilde{L}^{\mathsf{T}}$, on trouve alors

$$D_j + s_{j-1} p_j^2 = \tilde{D}_j.$$

Ces relations permettent de montrer que $s_j > 0$:

$$s_j = s_{j-1} - \beta_j^2 \tilde{D}_j = s_{j-1} - \frac{p_j^2 s_{j-1}^2}{\tilde{D}_j} = s_{j-1} \left(\frac{D_j}{D_j + s_{j-1} p_j^2} \right).$$

On en déduit en particulier que $\tilde{D}_j \geqslant D_j$ pour tout j. On peut alors introduire $t_j := 1/s_j$, qui vérifie la relation de récurrence numériquement stable :

$$t_j = t_{j-1} + \frac{p_j^2}{D_j}. \tag{B.30}$$

On a aussi $\tilde{D}_j / D_j = 1 + s_{j-1} p_j^2 / D_j = t_j / t_{j-1}$, si bien que le calcul de $\tilde{D}_j$ et β_j peut se faire par

$$\tilde{D}_j = \frac{D_j t_j}{t_{j-1}} \quad \text{et} \quad \beta_j = \frac{p_j}{D_j t_j}. \tag{B.31}$$

On peut à présent écrire l'algorithme qui calcule les facteurs de Cholesky de $D + \alpha\, pp^{\mathsf{T}} = \tilde{L}\tilde{D}\tilde{L}^{\mathsf{T}}$.

1. $t_0 = 1/\alpha$;
2. Pour $j = 1, \ldots, n$:
   2.1. Calcul de t_j, $\tilde{D}_j$ et β_j par (B.30) et (B.31) ;
   2.2. $\tilde{L}_{jj} = 1$;
   2.3. Pour $k = j+1, \ldots, n$: $\tilde{L}_{kj} = p_k \beta_j$;

Cet algorithme ne demande pas plus de $O(n^2)$ opérations élémentaires.

Intéressons nous à présent au produit $\bar{L} = L\tilde{L}$. En utilisant (B.29) et $Lp = v$:

$$\bar{L}^j = L \left(e^j + \beta_j (p - p_1 e^1 - \cdots - p_j e^j) \right) = L^j + \beta_j \left(v - p_1 L^1 - p_2 L^2 - \cdots - p_j L^j \right).$$

Dans l'algorithme suivant, on construit en même temps p et $\bar{L}$. Au début de la j-ième étape, le vecteur p a sa valeur correcte dans les j premières positions et a la valeur $v - p_1 L^1 - p_2 L^2 - \cdots - p_{j-1} L^{j-1}$ dans le $n - j$ suivantes. Comme les formules (B.30) et (B.31) n'utilisent que p_j, on obtient comme algorithme final de calcul de $\bar{L}$ et $\bar{D}$:

Algorithme B.15 (Mise à jour des facteurs de Cholesky I)

1. $t_0 = 1/\alpha$;

2. $p = v$;
3. Pour $j = 1, \ldots, n$:
   3.1. Calcul de t_j, $\bar{D}_j \equiv \tilde{D}_j$ et β_j par (B.30) et (B.31) ;
   3.2. $\bar{L}_{jj} = 1$;
   3.3. Pour $k = j+1, \ldots, n$:
      3.3.1. $p_k = p_k - p_j L_{kj}$;
      3.3.2. $\bar{L}_{kj} = L_{kj} + \beta_j p_k$;

On pourra vérifier par un raisonnement analogue que, si l'on connaît la factorisation de Cholesky $A = LL^\mathsf{T}$, les facteurs de Cholesky $\bar{L}\bar{L}^\mathsf{T}$ de $A + \alpha vv^\mathsf{T}$ sont donnés par l'algorithme suivant.

Algorithme B.16 (Mise à jour des facteurs de Cholesky II)

1. $t_0 = 1/\alpha$;
2. $p = v$;
3. Pour $j = 1, \ldots, n$:
   3.1. $p_j = p_j / L_{jj}$;
   3.2. $\delta = (1 + p_j^2 / t_{j-1})^{1/2}$;
   3.3. $\beta_j = p_j / (t_{j-1}\delta)$;
   3.4. $t_j = t_{j-1} + p_j^2$;
   3.5. Pour $k = j, \ldots, n$:
      3.5.1. $p_k = p_k - p_j L_{kj}$;
      3.5.2. $\bar{L}_{kj} = \delta L_{kj} + \beta_j p_k$;

Une réalisation informatique de l'algorithme précédent ne doit pas utiliser deux matrices L et $\bar{L}$, mais peut stocker $\bar{L}$ dans L, car lorsque $\bar{L}_{kj}$ est calculé, on n'a plus besoin de L_{kj}.

Une autre possibilité, qui fonctionne aussi si A est singulière (mais semi-définie positive), est fondée sur l'observation suivante (on a intégré le facteur $\alpha > 0$ dans le vecteur v) [292 ; 2008] :

$$\bar{A} = A + vv^\mathsf{T} = LL^\mathsf{T} + vv^\mathsf{T} = \begin{pmatrix} v & L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v & L \end{pmatrix}^\mathsf{T}.$$

La matrice $\begin{pmatrix} v & L \end{pmatrix}^\mathsf{T}$ de type $(n+1) \times n$ est de rang $\leqslant n$, si bien qu'elle peut être transformée en une matrice triangulaire supérieure de rang $\leqslant n$. Comme les éléments non nuls sous la diagonale sont placés directement sous celle-ci, n rotations de Givens suffisent à la transformer en une matrice triangulaire supérieure de la forme $\begin{pmatrix} \bar{L} & 0_{n\times 1} \end{pmatrix}^\mathsf{T}$. Si l'on note G le produit de ces rotations, qui est une matrice orthogonale, on a

$$\bar{A} = \begin{pmatrix} v & L \end{pmatrix} G^\mathsf{T} G \begin{pmatrix} v & L \end{pmatrix}^\mathsf{T} = \begin{pmatrix} \bar{L} & 0_{n\times 1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{L} & 0_{n\times 1} \end{pmatrix}^\mathsf{T} = \bar{L}\bar{L}^\mathsf{T},$$

qui est la factorisatiion de Cholesky souhaitée.

Mise à jour des facteurs pour une augmentation d'ordre

Considérons à présent le cas où une matrice $\bar{A}$ d'ordre $n+1$ symétrique définie positive est obtenue à partir de A par l'ajout d'une ligne et d'une colonne en position $n+1$:

$$\bar{A} = \begin{pmatrix} A & v \\ v^\mathsf{T} & \alpha \end{pmatrix},$$

où $v \in \mathbb{R}^n$ et $\alpha > 0$ est un nombre réel. Si les facteurs de Cholesky de $A = LDL^\mathsf{T}$ sont connus, on peut déterminer les facteurs de Cholesky de $\bar{A} = \bar{L}\bar{D}\bar{L}^\mathsf{T}$ en résolvant un seul système linéaire avec la matrice L.

Grâce à l'unicité de la factorisation de Cholesky, on vérifie en effet qu'il faut prendre

$$\bar{L} = \begin{pmatrix} L & 0 \\ l^\mathsf{T} & 1 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \bar{D} = \begin{pmatrix} D & 0 \\ 0 & \delta \end{pmatrix},$$

où $l \in \mathbb{R}^n$ et $\delta \in \mathbb{R}$ sont donnés par

$$LD\,l = v \quad \text{et} \quad \delta = \alpha - l^\mathsf{T} D\,l.$$

Pour déterminer l, on résout d'abord le système linéaire triangulaire $Lw = v$ qui donne $w \in \mathbb{R}^n$, puis $l = D^{-1}w$. Au total, cette mise à jour des facteurs de Cholesky requiert $O(n^2)$ opérations au lieu des $O((n+1)^3)$ que demanderait une factorisation directe de $\bar{A}$.

On note au passage que la matrice symétrique $\bar{A}$ est définie positive si, et seulement si, $\delta > 0$, c'est-à-dire $\alpha > v^\mathsf{T}\bar{A}^{-1}v$ (on savait déjà que cette condition était nécessaire, car avec $\overline{v} = \begin{pmatrix} v^\mathsf{T}A^{-\mathsf{T}} & -1 \end{pmatrix}^\mathsf{T}$ on doit avoir $\overline{v}^\mathsf{T}\bar{A}\overline{v} > 0$).

Mise à jour des facteurs pour une diminution d'ordre

On suppose maintenant que $\bar{A}$ est obtenue à partir de A en lui ôtant la ligne i et la colonne i. On cherche les facteurs de Cholesky de $\bar{A} = \bar{L}\bar{D}\bar{L}^\mathsf{T}$ à partir de ceux de $A = LDL^\mathsf{T}$. Ici aussi un seul système linéaire triangulaire, utilisant une sous-matrice principale de L, doit être résolu. Il ne faut donc pas plus de $O(n^2)$ opérations.

Les matrices A et $\bar{A}$ sont reliées par l'identité

$$A = \begin{pmatrix} \bar{A}_{11} & \vdots & \bar{A}_{21}^\mathsf{T} \\ \cdots & & \cdots \\ \bar{A}_{21} & \vdots & \bar{A}_{22} \end{pmatrix},$$

où les pointillés correspondent à la i-ième ligne et à la i-ième colonne. On a une partition similaire pour les facteurs L, D, $\bar{L}$ et $\bar{D}$:

$$L = \begin{pmatrix} L_{11} & 0 & 0 \\ \cdots & 1 & 0 \\ L_{21} & v & L_{22} \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} D_1 & 0 & 0 \\ 0 & \delta & 0 \\ 0 & 0 & D_2 \end{pmatrix},$$

$$\bar{L} = \begin{pmatrix} \bar{L}_{11} & 0 \\ \bar{L}_{21} & \bar{L}_{22} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \bar{D} = \begin{pmatrix} \bar{D}_1 & 0 \\ 0 & \bar{D}_2 \end{pmatrix}.$$

On trouve facilement

$$\begin{aligned}\bar{A}_{11} &= L_{11}D_1L_{11}^\mathsf{T} = \bar{L}_{11}\bar{D}_1\bar{L}_{11}^\mathsf{T},\\ \bar{A}_{21} &= L_{21}D_1L_{11}^\mathsf{T} = \bar{L}_{21}\bar{D}_1\bar{L}_{11}^\mathsf{T},\\ \bar{A}_{22} &= L_{21}D_1L_{21}^\mathsf{T} + \delta vv^\mathsf{T} + L_{22}D_2L_{22}^\mathsf{T}\\ &= \bar{L}_{21}\bar{D}_1\bar{L}_{21}^\mathsf{T} + \bar{L}_{22}\bar{D}_2\bar{L}_{22}^\mathsf{T}.\end{aligned}$$

La factorisation de Cholesky étant unique et les facteurs inversibles, on en déduit successivement que

$$\bar{L}_{11} = L_{11}, \quad \bar{D}_1 = D_1, \quad \bar{L}_{21} = L_{21}, \quad \text{et} \quad \bar{L}_{22}\bar{D}_2\bar{L}_{22}^\mathsf{T} = L_{22}D_2L_{22}^\mathsf{T} + \delta vv^\mathsf{T}.$$

Donc $\bar{L}_{22}\bar{D}_2\bar{L}_{22}^\mathsf{T}$ est la factorisation de Cholesky d'une correction de rang 1 de $L_{22}D_2L_{22}^\mathsf{T}$. Elle peut donc être obtenue en résolvant un unique système linéaire avec la matrice L_{22}.

B.5.4 Factorisation en valeurs singulières (SVD)

Soient $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ deux espaces euclidiens sur $\mathbb{R}$ (produits scalaires notés $\langle\cdot,\cdot\rangle$ et normes associées notées $\|\cdot\|$), de dimension respective

$$n := \dim\mathbb{E} \qquad \text{et} \qquad m := \dim\mathbb{F}.$$

On considère une application linéaire $A : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ de rang $r \geqslant 1$ (le cas où A est nulle n'est guère intéressant). On note $A^* : \mathbb{F} \to \mathbb{E}$ son adjointe. On sera aussi utile d'introduire l'opérateur $\hat{A} : (x, y) \in \mathbb{E}\times\mathbb{F} \mapsto (A^*y, Ax)$, qui est noté matriciellement par

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

Si $\mathbb{E}_0$ est un sous-espace vectoriel d'un certain espace euclidien $\mathbb{V}$, on note $\mathrm{P}_{\mathbb{E}_0} : \mathbb{V} \to \mathbb{E}_0$ le projecteur orthogonal sur $\mathbb{E}_0$. Enfin, on munit $\mathbb{R}^r$ du produit scalaire euclidien canonique.

Proposition B.17 (factorisation en valeurs singulières) *Dans le cadre défini ci-dessus, il existe des applications* injectives $U : \mathbb{R}^r \to \mathbb{E}$ *et* $V : \mathbb{R}^r \to \mathbb{F}$ *et un opérateur diagonal* $\Sigma = \mathrm{Diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_r) : \mathbb{R}^r \to \mathbb{R}^r : (z_1, \ldots, z_r) \mapsto (\sigma_1 z_1, \ldots, \sigma_r z_r)$ *avec des* $\sigma_i > 0$, *tels que*

$$U^*U = I_{\mathbb{R}^r}, \quad UU^* = \mathrm{P}_{\mathcal{R}(A^*)}, \quad V^*V = I_{\mathbb{R}^r}, \quad VV^* = \mathrm{P}_{\mathcal{R}(A)} \quad \textit{et} \quad A = V\Sigma U^*. \tag{B.32}$$

On a aussi

$$AA^*V = V\Sigma^2 \qquad \textit{et} \qquad A^*AU = U\Sigma^2, \tag{B.33}$$

qui montrent que les σ_i^2, $i \in [1\,{:}\,r]$, *sont aussi les valeurs propres non nulles de* AA^* *et de* A^*A.

Démonstration. L'opérateur $\hat{A}$ est autoadjoint. Il a donc un système de $n + m = \dim\mathbb{E} + \dim\mathbb{F}$ vecteurs propres orthogonaux. Si $r = \mathrm{rg}(A)$ est le rang de A, alors

$\mathrm{rg}(\hat{A}) = 2r$ car $\mathrm{rg}(A^*) = \mathrm{rg}(A)$ et donc $\hat{A}$ a $2r$ valeurs propres non nulles. Celles-ci sont opposées deux à deux, car si

$$\begin{pmatrix} 0 & A^* \\ A & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_i \\ v_i \end{pmatrix} = \sigma_i \begin{pmatrix} u_i \\ v_i \end{pmatrix}$$

alors

$$\begin{pmatrix} 0 & A^* \\ A & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -u_i \\ v_i \end{pmatrix} = -\sigma_i \begin{pmatrix} -u_i \\ v_i \end{pmatrix}.$$

Soient $\{(u_i, v_i)\}_{i\in[1\,:\,r]}$ les vecteurs propres correspondant aux valeurs propres $\sigma_i > 0$. On introduit les opérateurs linéaires $U : \mathbb{R}^r \to \mathbb{E} : \alpha \mapsto \sum_{i=1}^r \alpha u_i$ et $V : \mathbb{R}^r \to \mathbb{E} : \alpha \mapsto \sum_{i=1}^r \alpha v_i$ qui sous forme matricielle s'écrivent

$$U = \begin{pmatrix} u_1 & \cdots & u_r \end{pmatrix} \qquad \text{et} \qquad V = \begin{pmatrix} v_1 & \cdots & v_r \end{pmatrix}.$$

On notant $\Sigma = \mathrm{Diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_r)$, on a alors

$$AU = V\Sigma \qquad \text{et} \qquad A^*V = U\Sigma. \tag{B.34}$$

Montrons que l'on peut supposer que les colonnes de U et de V sont orthonormales :

$$U^*U = I_{\mathbb{R}^r} \qquad \text{et} \qquad V^*V = I_{\mathbb{R}^r}. \tag{B.35}$$

En effet, d'une part, on peut normaliser la matrice des vecteurs propres orthogonaux $\begin{pmatrix} U^* & V^* \end{pmatrix}^*$ de $\hat{A}$ par

$$U^*U + V^*V = \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix} = 2I_{\mathbb{R}^r}. \tag{B.36}$$

Par ailleurs, (B.34) montre que $V^*V\Sigma = \Sigma U^*U$. En utilisant l'identité (B.36), on trouve que $U^*U\Sigma + \Sigma U^*U = 2I_{\mathbb{R}^r}$. En regardant l'élément (i, j) des deux membres, on voit que $\langle u_i, u_j\rangle = 0$ si $i \neq j$ et que $2\sigma_i\langle u_i, u_i\rangle = 2\sigma_i$. Ceci montre que $U^*U = I_{\mathbb{R}^r}$. Alors $V^*V = I_{\mathbb{R}^r}$ se déduit de (B.36).

On peut compléter les matrices $U \in \mathbb{R}^{n\times r}$ et $V \in \mathbb{R}^{m\times r}$, dont les colonnes sont orthogonales par (B.35), par des matrices $\tilde{U} \in \mathbb{R}^{n\times(n-r)}$ et $\tilde{V} \in \mathbb{R}^{m\times(m-r)}$, respectivement, de manière à ce que $\begin{pmatrix} U & \tilde{U} \end{pmatrix}$ soit orthogonale. Mais alors

$$\begin{pmatrix} \pm U \\ V \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} \tilde{U} \\ 0 \end{pmatrix} = \pm U^*\tilde{U} = 0,$$

si bien que les colonnes de $\begin{pmatrix} \tilde{U}^* & 0 \end{pmatrix}^*$ sont des vecteurs propres de $\hat{A}$ associé à la vecteur propre nulle, ce qui montre que

$$A \begin{pmatrix} U & \tilde{U} \end{pmatrix} = V \begin{pmatrix} \Sigma & 0 \end{pmatrix}.$$

Comme $\begin{pmatrix} U & \tilde{U} \end{pmatrix}$ est orthogonale, on trouve finalement

$$A = V \begin{pmatrix} \Sigma & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U^* \\ \tilde{U}^* \end{pmatrix} = V\Sigma U^*.$$

Il reste à montrer dans (B.32) que $UU^* = \mathrm{P}_{\mathcal{R}(A^*)}$ et $VV^* = \mathrm{P}_{\mathcal{R}(A)}$. On sait que l'opérateur idempotent et auto-adjoint UU^* est le projecteur orthogonal sur $\mathcal{R}(U)$. On obtient alors la première affirmation en observant que $A^* = U\Sigma V^*$ et que l'inversibilité de Σ et la surjectivité de V^* impliquent que $\mathcal{R}(U) = \mathcal{R}(A^*)$. On s'y prend de la même manière pour montrer la seconde affirmation.

La première identité de (B.33) s'obtient en multipliant à droite les deux membres de $AA^* = (V\Sigma U^*)(U\Sigma V^*) = V\Sigma^2 V^*$ par V et en utilisant (B.35). La seconde identité de (B.33) se montre de la même manière, en utilisant $A^*A = U\Sigma^2 U^*$. □

Les $\sigma_i \equiv \sigma_i(A)$ sont appelés les *valeurs singulières* de A et la factorisation $A = V\Sigma U^*$ est appelée la *factorisation en valeurs singulières* de A. On note $\sigma(A)$ le vecteur des valeurs singulières non nulles de A, rangées en ordre décroissant :

$$\sigma_1(A) \geqslant \cdots \geqslant \sigma_r(A).$$

Si $\{e^i\}_{i=1}^r$ est la base orthonormale canonique de $\mathbb{R}^r$, les vecteurs $u_i = Ue^i$, $i = 1, \ldots, r$, sont orthonormaux dans $\mathbb{E}$, les vecteurs $v_i = Ve^i$, $i = 1, \ldots, r$, sont orthonormaux dans $\mathbb{F}$ et

$$A = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i \, (v_i \otimes u_i),$$

où $v \otimes u$ est le produit tensoriel de $v \in \mathbb{F}$ et $u \in \mathbb{E}$, qui est l'opérateur linéaire $x \in \mathbb{E} \mapsto v\langle u, x\rangle \in \mathbb{F}$.

Les valeurs singulières sont aussi les r valeurs propres strictement positives de l'application auto-adjointe $\hat{A} : \mathbb{E} \times \mathbb{F} \to \mathbb{E} \times \mathbb{F} : (x, y) \mapsto (A^*y, Ax)$, qui sous forme matricelle s'écrit

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

Cette opérateur a aussi r valeurs propres strictement négatives, les $-\sigma_i$, et $n + m - 2r$ valeurs propres nulles. Le vecteur propre correspondant à σ_i est (u_i, v_i), celui correspondant à $-\sigma_i$ est $(-u_i, v_i)$.

Les valeurs singulières sont aussi les racines carrées des r valeurs propres strictement positives des applications auto-adjointes semi-définies positives

$$A^*A \quad \text{et} \quad AA^*,$$

qui ont aussi respectivement $n - r$ et $m - r$ valeurs propres nulles.

On peut aussi obtenir la valeur singulière maximale en résolvant un problème d'optimisation (exercice 4.13).

Théorème B.18 (inégalité de trace de von Neumann) *Si A et $B \in \mathbb{R}^{m\times n}$, on a*

$$\langle A, B\rangle \leqslant \sigma(A)^{\mathsf{T}} \sigma(B). \tag{B.37}$$

où $\langle \cdot, \cdot \rangle$ désigne le produit scalaire (B.7).

Notes

Pour l'étude de la résolution des systèmes linéaires, on pourra consulter [298, 346, 248, 150, 521]. On trouvera des inégalités matricielles intéressantes dans le livre de Zhan [561]. L'imposant ouvrage de Higham [291] est consacré à la précision et à la stabilité des schémas numériques de l'algèbre linéaire.

L'inégalité de trace de Ky Fan (théorème B.8), publiée en 1949 [186], est étroitement reliée à un travail antérieur de von Neumann [538 ; 1937] (l'inégalité de trace du théorème B.18). La condition pour avoir l'égalité est due à Teobald [512 ; 1975]. L'inégalité de trace de von Neumann [538 ; 1937] est plus générale que dans le théorème B.18 puisqu'elle permet aux matrices d'être complexes et qu'elle prend en compte des transformations unitaires supplémentaires.

L'équivalence $(i) \Leftrightarrow (iii)$ de la proposition B.10 est reprise de [37 ; exercice 4.1].

André-Louis Cholesky (1875-1918) était un officier français, originaire de la région Poitou-Charentes, affecté à des opérations de géodésie, d'abord en France, puis en Crète (1907-08) et enfin en Algérie et Tunisie (1910-14). Il est décédé au combat, durant la première guerre mondiale. La factorisation $R^{\mathsf{T}}R$ qui porte son nom a été publiée à titre posthume en 1924 par Benoit [40], puis retrouvée par C. Brezinski [77 ; 2006] dans les archives que sa famille a déposées à l'École Polytechnique ; le manuscrit date du 2 décembre 1910 [110]. La description de la mise à jour des facteurs de Cholesky de la section B.5.3 est reprise de [233 ; page 42-43]. On pourra aussi consulter [39, 229, 200, 231, 248].

Exercices

B.1. *Dimension de sous-espaces vectoriels.* Soient $\mathbb{E}$ un espace vectoriel de dimension finie, $\mathbb{E}_0$ et $\mathbb{E}_1$ deux sous-espaces vectoriels de $\mathbb{E}$. Démontrez les affirmations suivantes :

1) $\dim(\mathbb{E}_0 + \mathbb{E}_1) + \dim(\mathbb{E}_0 \cap \mathbb{E}_1) = \dim \mathbb{E}_0 + \dim \mathbb{E}_1$ (*formule de Grassmann*),
2) $\mathbb{E}_0 \cap \mathbb{E}_1 \neq \varnothing$ si $\dim \mathbb{E}_0 + \dim \mathbb{E}_1 > \dim \mathbb{E}$.

B.2. *Dimensions d'images et de noyaux.* Soient $\mathbb{E}$, $\mathbb{F}$ et $\mathbb{G}$ trois espaces vectoriels de dimension finie et $A : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ et $B : \mathbb{E} \to \mathbb{G}$ deux applications linéaires. Montrez que

1) $\dim \mathcal{R}\binom{A}{B} \leqslant \dim \mathcal{R}(A) + \dim \mathcal{R}(B)$,
2) $\dim \mathcal{N}(A) \leqslant \dim \mathcal{N}\binom{A}{B} + \dim \mathcal{R}(B)$.

B.3. *Théorème de l'application ouverte.* Soit $A : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ une application linéaire continue entre deux espaces normés, avec $\mathbb{F}$ de dimension finie (le résultat reste vrai sans cette hypothèse mais est plus difficile à démontrer [79]). On note $\bar{B}_{\mathbb{E}}$ et $\bar{B}_{\mathbb{F}}$ les boules unités fermées de $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ respectivement. Alors A est surjective si, et seulement si, il existe $r > 0$ tel que $r\bar{B}_{\mathbb{F}} \subseteq A(\bar{B}_{\mathbb{E}})$.

B.4. *Semi-continuité inférieure du rang.* L'application rang : $\mathbb{R}^{m\times n} \to \mathbb{N}$ est s.c.i..

B.5. *Orthogonalité.* Soient $\mathbb{E}$ un espace euclidien de dimension finie, muni d'un produit scalaire, $\mathbb{E}_0$ et $\mathbb{E}_1$ des sous-espaces vectoriels. Montrez les relations suivantes.

1) $\mathbb{E} = \mathbb{E}_0 \oplus \mathbb{E}_0^{\perp}$ (somme directe).
2) $(\mathbb{E}_0^{\perp})^{\perp} = \mathbb{E}_0$.
3) $\mathbb{E}_0 \subseteq \mathbb{E}_1 \Longrightarrow \mathbb{E}_1^{\perp} \subseteq \mathbb{E}_0^{\perp}$.
4) $(\mathbb{E}_0 \cap \mathbb{E}_1)^{\perp} = \mathbb{E}_0^{\perp} + \mathbb{E}_1^{\perp}$.

B.6. *Rang-ligne et rang-colonne.* Soit A une matrice $m \times n$. Montrez que le nombre de lignes linéairement indépendantes de A (son *rang-ligne*) est égal à son nombre de colonnes linéairement indépendantes (son *rang-colonne*).

B.7. *Dérivée du déterminant.* On considère l'application déterminant $\det : \mathbb{R}^{n\times n} \to \mathbb{R} : A \mapsto \det A$, avec $\mathbb{R}^{n\times n}$ muni du produit scalaire $\langle A, B\rangle = \operatorname{tr} AB$. Montrez que son gradient s'écrit

$$\nabla \det(A) = \operatorname{cof}(A),$$

où $\operatorname{cof}(A)$ est la *matrice des cofacteurs* ou *comatrice* de $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$.

B.8. *Théorème d'entrelacement de Cauchy.* Soient $A \in \mathcal{S}^n$ et U une matrice orthogonale de type $n \times r$, avec $1 \leqslant r \leqslant n$ (c.-à-d., $U^\mathsf{T}U = I_r$). On note $\lambda_i(M)$ les valeurs propres d'une matrice symétrique M, rangées par ordre croissant. Alors pour $1 \leqslant i \leqslant r$, on a

$$\lambda_i(A) \leqslant \lambda_i(U^\mathsf{T}AU) \leqslant \lambda_{n-r+i}(A).$$

B.9. Trouvez une matrice M d'ordre n symétrique *non* définie positive telle que sur deux sous-espaces vectoriels supplémentaires $\mathbb{E}_1$ et $\mathbb{E}_2$ de $\mathbb{R}^n$, on ait $x^\mathsf{T}Mx > 0$, pour tout $x \in \mathbb{E}_1$ et pour tout $x \in \mathbb{E}_2$.

Remarque. Une matrice peut donc être définie positive dans deux sous-espaces supplémentaires sans être définie positive.

B.10. 1) Si A est matrice symétrique définie positive, il existe $\alpha > 0$ tel que $x^\mathsf{T}Ax \geqslant \alpha\|x\|_2^2$, pour tout x. Donnez la meilleure constante α.

2) Si A est matrice quelconque, il existe $\alpha > 0$ tel que $\|A^\mathsf{T}Ax\|_2 \geqslant \alpha\|Ax\|_2$, pour tout x. Donnez la meilleure constante α. En déduire que $x \mapsto \|A^\mathsf{T}x\|_2$ est une *norme* sur $\mathcal{R}(A)$.

B.11. *Produit de matrices définies positives.* Si A et $B \in \mathcal{S}_{++}^n$, alors la matrice non nécessairement symétrique AB a n valeurs propres qui sont toutes réelles et strictement positives.

B.12. *Représentation $\mathcal{S}_{++}^n$ d'un produit scalaire.* Soit $\langle\cdot,\cdot\rangle$ un produit scalaire sur $\mathbb{R}^n$. Montrez qu'il existe une unique matrice Q d'ordre n telle que $\langle x, y\rangle = x^\mathsf{T}Qy$, pour tout $x, y \in \mathbb{R}^n$. De plus, Q est symétrique définie positive. [Indication : procédez comme à la section C.2.2.]

B.13. *Deux propriétés des matrices semi-définies positives.* Soient A et $B \in \mathcal{S}_+^n$. Alors

1) $\mathcal{R}(A + B) = \mathcal{R}(A) + \mathcal{R}(B)$ et $\mathcal{N}(A + B) = \mathcal{N}(A) \cap \mathcal{N}(B)$,
2) si $\mathcal{R}(A) \subseteq \mathcal{R}(B)$, alors $(1 - t)A + tB \in \mathcal{S}_+^n$ pour $t > 1$ suffisamment proche de 1.

B.14. *Conséquences des factorisations.*

1) Soient A et $B \in \mathcal{S}^n$ avec $A \succ 0$. Montrez qu'il existe une matrice inversible R et une matrice diagonale Λ telles que $A = RR^\mathsf{T}$ et $B = R\Lambda R^\mathsf{T}$.
2) Montrez que $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ et $B \in \mathbb{R}^{n\times n}$ commutent (c.-à-d., $AB = BA$) si, et seulement si, il existe $V \in \mathbb{R}^{n\times n}$ orthogonale telle que $V^\mathsf{T}AV$ et $V^\mathsf{T}BV$ soient diagonales.

B.15. *Propriété d'augmentabilité* [14]. Soit M une matrice symétrique d'ordre n, semi-définie positive dans le noyau d'une autre matrice A de type $m \times n$ (c.-à-d., $u^\mathsf{T}Mu \geqslant 0$ pour tout $u \in \mathcal{N}(A)$). Montrez que les propriétés suivantes sont équivalentes :

(*i*) $v \in \mathcal{N}(A)$ et $v^\mathsf{T}Mv = 0$ impliquent que $Mv = 0$,
(*ii*) il existe $r \in \mathbb{R}$ tel que $M + rA^\mathsf{T}A \succcurlyeq 0$ (*propriété d'augmentabilité*),
(*iii*) $\inf\{(v^\mathsf{T}Mv)/\|Av\|_2^2 : Av \neq 0\} = \inf\{v^\mathsf{T}Mv : \|Av\|_2 = 1\} < +\infty$.

Trouvez une matrice M, semi-définie positive dans le noyau d'une autre matrice A, pour laquelle les propriétés ci-dessus ne sont pas vérifiées.

B.16. *Formules de SMW (Sherman-Morrison-Woodbury).*

(*i*) Soient I_n la matrice identité d'ordre n et u et $v \in \mathbb{R}^n$. Alors

$$\det(I_n + uv^\mathsf{T}) = 1 + v^\mathsf{T}u,$$

si bien que $I_n + uv^\mathsf{T}$ est inversible si, et seulement si, $1 + v^\mathsf{T}u \neq 0$. Dans ce cas,

$$\left(I_n + uv^\mathsf{T}\right)^{-1} = I_n - \frac{uv^\mathsf{T}}{1+v^\mathsf{T}u}.$$

[Indication : Montrez que les seules valeurs propres de $I_n + uv^\mathsf{T}$ sont 1 et $1+v^\mathsf{T}u$, et que cette dernière est simple.]

(*ii*) Soient A un matrice d'ordre n inversible et u et $v \in \mathbb{R}^n$. Alors

$$\det(A + uv^\mathsf{T}) = (\det A)(1 + v^\mathsf{T}A^{-1}u),$$

si bien que $A + uv^\mathsf{T}$ est inversible si, et seulement si, $1 + v^\mathsf{T}A^{-1}u \neq 0$. Dans ce cas, on a la formule de Sherman et Morrison (1949):

$$\left(A + uv^\mathsf{T}\right)^{-1} = A^{-1} - \frac{A^{-1}uv^\mathsf{T}A^{-1}}{1+v^\mathsf{T}A^{-1}u}.$$

Remarque. En pratique, on peut donc résoudre $(A+uv^\mathsf{T})x = b$ en x en résolvant deux systèmes linéaires avec la matrice A: $Ay = b$ en y et $Az = u$ en z. Alors $x = y - (v^\mathsf{T}y)/(1+v^\mathsf{T}z)z$. Cette approche est très utile lorsqu'il est aisé de résoudre un système linéaire avec la matrice A.

(*iii*) Soient u_1, v_1, u_2 et v_2 des vecteurs de $\mathbb{R}^n$. Alors

$$\det(I_n + u_1v_1^\mathsf{T} + u_2v_2^\mathsf{T}) = (1 + v_1^\mathsf{T}u_1)(1 + v_2^\mathsf{T}u_2) - (v_1^\mathsf{T}u_2)(v_2^\mathsf{T}u_1).$$

(*iv*) Soient A un matrice d'ordre n inversible, U une matrice $n \times m$, V une matrice $m \times n$ et R une matrice d'ordre m inversible (n et m peuvent être des entiers non nuls quelconques). Alors

$$\det(I_n + UV^\mathsf{T}) = \det(I_m + V^\mathsf{T}U)$$

et plus généralement

$$\det(A + URV^\mathsf{T}) = \det(A)\det(R^{-1} + V^\mathsf{T}A^{-1}U)\det(R).$$

Dès lors, $A + URV^\mathsf{T}$ est inversible si, et seulement si, $X := R^{-1} + V^\mathsf{T}A^{-1}U$ est inversible et, dans ce cas, on a la *formule de Woodbury*:

$$\boxed{\left(A + URV^\mathsf{T}\right)^{-1} = A^{-1} - A^{-1}UX^{-1}V^\mathsf{T}A^{-1}.}$$

B.17. *Inverse de matrices triangulaires.* Soit T une matrice inversible triangulaire supérieure (resp. inférieure). Montrez que T^{-1} est triangulaire supérieure (resp. inférieure).

C Calcul différentiel ▲

First the derivative was used, then discovered, explored and developed, and only then, defined.

J.V. Grabiner [253 ; 1983].

Dans cette annexe, nous rappelons les notions essentielles du calcul différentiel. Celles-ci sont présentées dans le cadre des espaces normés de dimension infinie. Tous les résultats énoncés sont démontrés. Nous pensons en effet qu'une bonne connaissance du calcul différentiel est nécessaire pour se sentir à l'aise en optimisation. Le cadre de la dimension infinie a été choisi car il est utile dans bien des domaines des mathématiques appliquées et ne présente pas de difficultés supplémentaires par rapport à la dimension finie. Nous supposons connues les notions de différentiabilité des fonctions réelles d'une variable réelle (voir par exemple [486 ; 1992]).

Sont également présentées deux notions essentielles pour la conception des algorithmes d'optimisation : celles de gradient (section C.1) et de hessienne (section C.2.2).

Soient $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ deux espaces normés (pouvant être de dimension infinie), munis des normes $\|\cdot\|_{\mathbb{E}}$ et $\|\cdot\|_{\mathbb{F}}$ respectivement. Dans cette section, nous étudions la différentiabilité d'une application f définie sur une partie Ω de $\mathbb{E}$ à valeurs dans $\mathbb{F}$:

$$f : \Omega \subseteq \mathbb{E} \to \mathbb{F}.$$

En dehors de l'étude de la dérivabilité directionnelle, nous supposerons que Ω est ouvert.

C.1 Dérivées directionnelle et au sens de Gâteaux

Dérivée directionnelle

En optimisation, beaucoup de fonctions ne sont pas différentiables dans le sens classique de Fréchet (section C.2), mais sont toutefois directionnellement différentiables, une notion que nous présentons dans cette section.

On dit que f a une *dérivée directionnelle* en $x \in \Omega$ (Ω ne doit pas nécessairement être ouvert ici) dans la direction $h \in \mathbb{E}$ si $x + th \in \Omega$ pour $t > 0$ suffisamment petit (ce sera le cas si Ω est ouvert) et si la limite

$$f'(x;h) := \lim_{t \downarrow 0} \frac{f(x+th) - f(x)}{t} \tag{C.1}$$

existe. La notation « $t \downarrow 0$ » signifie « $t \to 0$ avec $t > 0$ ». On dit que f a *des dérivées directionnelles* en x (sans spécifier les directions) si elle a des dérivées directionnelles en x suivant toutes les directions de $\mathbb{E}$. On notera que la dérivée directionnelle $f'(x;h)$ est un élément de $\mathbb{F}$.

On n'a pas besoin de mettre une topologie sur $\mathbb{E}$ pour que cette définition ait un sens. En regardant le comportement de f le long de la direction h, on se ramène à l'étude d'une fonction définie dans un voisinage de 0 de $\mathbb{R}_+$, muni de sa topologie canonique. Par contre, on a besoin d'une topologie sur $\mathbb{F}$ pour donner un sens à la limite dans (C.1).

Pour les fonctions d'une variable réelle, la dérivée directionnelle $f'_+(\cdot) := f'(\cdot;1)$ est appelée *dérivée à droite* et la dérivée directionnelle $f'_-(\cdot) := f'(\cdot;-1)$ est appelée *dérivée à gauche*.

Pour les fonctions à valeurs dans $\mathbb{R}$, il arrivera que l'on admette des dérivées directionnelles valant $-\infty$ ou $+\infty$, c'est-à-dire que l'on admettra parfois de prendre la limite de (C.1) dans $\overline{\mathbb{R}}$ plutôt que dans $\mathbb{R}$. Ainsi, on pourra parler de la dérivée à droite de $f(x) = \sqrt{x}$ en 0, celle-ci valant $+\infty$.

Exemple C.1 (dérivabilité directionnelle de la fonction max) La *fonction max* est définie par

$$\mu : x \in \mathbb{R}^n \mapsto \mu(x) := \max_{i \in [1:n]} x_i. \tag{C.2}$$

On note

$$I(x) := \{i \in [1:n] : \mu(x) = x_i\}. \tag{C.3}$$

La fonction max est convexe et lipschitzienne. Elle est différentiable dans le sens classique de Fréchet en x si, et seulement si, $I(x)$ est un singleton. Mais, μ est directionnellement différentiable en tout point et l'on a pour x et $h \in \mathbb{R}^n$:

$$\mu'(x;h) = \max_{i \in I(x)} h_i. \tag{C.4}$$

L'exercice C.2 propose de démontrer ces affirmations. □

En général, la composition de deux fonctions ayant des dérivées directionnelles n'a pas nécessairement de dérivées directionnelles. Voici un contre-exemple [488 ; p. 484].

Contre-exemple C.2 (composition non directionnellement différentiable) Soient $\varphi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^2$ et $\psi : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ définies par

$$\varphi(x) = \begin{cases} (x, x^2 \sin(1/x)) & \text{si } x \neq 0 \\ 0 & \text{si } x = 0 \end{cases} \qquad \text{et} \qquad \psi(y_1, y_2) = \begin{cases} y_1 & \text{si } y_2 = 0 \\ 0 & \text{si } y_2 \neq 0. \end{cases}$$

Il est simple de voir que φ est différentiable en zéro (voir la section C.2.1 au besoin), que ψ est positivement homogène de degré un (c'est-à-dire $\psi(ty) = t\psi(y)$, pour tout $y \in \mathbb{R}^2$ et tout $t > 0$) et donc directionnellement différentiable en zéro, mais que $\psi \circ \varphi$ n'est pas directionnellement différentiable en zéro. □

Cependant, en exigeant un peu plus de régularité pour la fonction ψ, on peut obtenir la dérivabilité directionnelle de la composition $\psi \circ \varphi$. Ci-dessous, on demande une

propriété un peu forte, la lipschitzianité de ψ, mais celle-ci est facilement vérifiable et a souvent lieu.

Proposition C.3 (dérivabilité directionnelle d'une composition) *Soient $\mathbb{E}$, $\mathbb{F}$ et $\mathbb{G}$ trois espaces vectoriels normés. On suppose que $\varphi : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ a une dérivée directionnelle en $x \in \mathbb{E}$ dans la direction $h \in \mathbb{E}$ et que $\psi : \mathbb{F} \to \mathbb{G}$ est lipschitzienne dans un voisinage de $\varphi(x)$ et a une dérivée directionnelle en $\varphi(x)$ dans la direction $\varphi'(x;h)$. Alors $(\psi \circ \varphi)$ a une dérivée directionnelle en x dans la direction h et l'on a*

$$(\psi \circ \varphi)'(x;h) = \psi'(\varphi(x);\varphi'(x;h)). \tag{C.5}$$

Démonstration. Pour $t \downarrow 0$, on a

$$\begin{aligned}(\psi \circ \varphi)(x+th) &= \psi(\varphi(x) + t\varphi'(x;h) + o(t)) && [\varphi \text{ est DD}]\\ &= \psi(\varphi(x) + t\varphi'(x;h)) + o(t) && [\psi \text{ est lipschitzienne}]\\ &= (\psi \circ \varphi)(x) + t\psi'(\varphi(x);\varphi'(x;h)) + o(t) && [\psi \text{ est DD}],\end{aligned}$$

où DD abrège « directionnellement différentiable ». C'est le résultat recherché. □

Cette proposition et l'exemple C.1 permettent d'obtenir des conditions de dérivabilité directionnelle d'un maximum de fonctions directionnellement différentiables. Soient $f_i : \mathbb{E} \to \mathbb{R}$, $i \in [1:m]$, des fonctions, *en nombre fini*, ayant une dérivée directionnelle en $x \in \mathbb{E}$ dans la direction $h \in \mathbb{E}$. Alors leur maximum $f : \mathbb{E} \to \mathbb{R}$, définie en $x \in \mathbb{E}$ par

$$f(x) := \max_{i \in [1:m]} f_i(x),$$

a une dérivée directionnelle en x dans la direction h, qui est donnée par

$$f'(x;h) = \max_{i \in I(x)} f_i'(x;h), \tag{C.6}$$

où $I(x) := \{i \in [1:m] : f(x) = f_i(x)\}$. Le cas du supremum d'un *nombre infini* de fonctions est beaucoup plus complexe à analyser et joue un rôle dans l'étude de la perturbation de problèmes d'optimisation [67]. Le théorème de Danskin [138] [67 ; théorème 4.13] est alors souvent utilisé.

Dérivée au sens de Gâteaux

Dans cette notion de différentiabilité directionnelle, on regarde le comportement de f suivant les demi-droites $\{x + th : t > 0\}$ et on ne demande pas qu'il y ait un lien entre les dérivées directionnelles suivant différentes directions. En demandant un tel lien, on obtient une notion de différentiabilité un peu plus forte. On dit que f est *Gâteaux-différentiable* (on dit aussi *Gâteaux-dérivable* ou *G-différentiable* ou encore *G-dérivable*) en $x \in \Omega$ si elle admet une dérivée directionnelle en x suivant toutes les directions $h \in \mathbb{E}$ et si l'application

$$h \in \mathbb{E} \mapsto f'(x;h) \in \mathbb{F}$$

est linéaire continue. On note $f'(x) \in \mathcal{L}(\mathbb{E},\mathbb{F})$ cet opérateur. Donc

$$f'(x) \cdot h = f'(x;h), \quad \forall h \in \mathbb{E}.$$

Gradient d'une fonction réelle

Supposons que $\mathbb{E}$ soit un espace de Hilbert, muni du produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle$. Si la fonction $f : \Omega \subseteq \mathbb{E} \to \mathbb{R}$ *à valeurs scalaires* est G-différentiable en $x \in \Omega$, $f'(x)$ est une forme linéaire continue sur $\mathbb{E}$. Par le théorème de représentation de Riesz-Fréchet (théorème A.3), il existe un unique vecteur de $\mathbb{E}$, noté $\nabla f(x)$ et appelé *gradient* de f en x, tel que

$$\langle \nabla f(x), h \rangle = f'(x) \cdot h, \quad \forall h \in \mathbb{E}.$$

Cette relation définit $\nabla f(x) \in \mathbb{E}$. Elle relie la notion de dérivée, apparaissant à droite dans la relation, qui est de nature topologique (elle n'utilise que la notion de limite), à la notion de gradient, apparaissant à gauche dans la relation. Cette dernière est de nature géométrique, puisqu'elle fait intervenir un produit scalaire. Par conséquent, en changeant de produit scalaire, on ne modifie pas $f'(x)$ qui n'en dépend pas, tandis que le gradient $\nabla f(x)$ sera généralement modifié.

Le gradient va jouer un rôle essentiel dans les algorithmes de minimisation. En effet, la direction $-\nabla f(x)$ est une direction suivant laquelle la fonction f décroît localement en x. En effet, si $\nabla f(x) \neq 0$ et si α est suffisamment petit, par définition de la dérivée au sens de Gâteaux, $f(x - \alpha \nabla f(x)) - f(x)$ est proche de

$$\alpha f'(x) \cdot (-\nabla f(x)) = -\alpha \|\nabla f(x)\|^2 < 0.$$

Donc

$$f(x - \alpha \nabla f(x)) < f(x), \quad \text{pour } \alpha > 0 \text{ petit.}$$

Le gradient est modifié par un changement de produit scalaire. Si l'on prend sur $\mathbb{E}$ un autre produit scalaire :

$$(x,y) \in \mathbb{E} \times \mathbb{E} \mapsto \langle x, y \rangle_{\mathbb{E}} = \langle Sx, y \rangle,$$

où $S : \mathbb{E} \to \mathbb{E}$ est un opérateur auto-adjoint et défini positif pour le produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle$ et si l'on note $\nabla_{\mathbb{E}} f(x)$ le gradient de f en x pour ce nouveau produit scalaire, on a

$$\nabla_{\mathbb{E}} f(x) = S^{-1} \nabla f(x). \tag{C.7}$$

En effet, pour h arbitraire dans $\mathbb{E}$, on a

$$\langle \nabla f(x), h \rangle = f'(x) \cdot h = \langle \nabla_{\mathbb{E}} f(x), h \rangle_{\mathbb{E}} = \langle S \nabla_{\mathbb{E}} f(x), h \rangle.$$

On en déduit (C.7).

C.2 Dérivée au sens de Fréchet

C.2.1 Dérivée première

Définition

On dit que f est *Fréchet-différentiable* [207 ; 1911] (on dit aussi *Fréchet-dérivable* ou *F-différentiable* ou *F-dérivable* ou simplement *différentiable* ou *dérivable*) en $x \in \Omega$ s'il existe un opérateur linéaire continu L de $\mathbb{E}$ dans $\mathbb{F}$ tel que

$$\lim_{\|h\|_{\mathbb{E}} \downarrow 0} \frac{1}{\|h\|_{\mathbb{E}}} \Big(f(x+h) - f(x) - Lh \Big) = 0. \tag{C.8}$$

On dit que $f : \Omega \to \mathbb{F}$ est *F-différentiable sur* Ω si f est F-différentiable en tout point de Ω.

La limite dans (C.8) est prise dans $\mathbb{F}$. On a pris soin de prendre la limite pour des $h \neq 0$ afin que le quotient dans (C.8) ait un sens. L'opérateur L est appelé *dérivée* de f en x. On peut aussi récrire la condition (C.8) comme suit

$$f(x+h) = f(x) + Lh + o(h), \tag{C.9}$$

si le *petit o* de h, $o(h)$, désigne une fonction nulle en $h = 0$ et vérifiant la propriété

$$\lim_{\|h\|_{\mathbb{E}} \downarrow 0} \frac{1}{\|h\|_{\mathbb{E}}} o(h) = 0,$$

où la limite est prise dans un espace normé approprié (ici $\mathbb{F}$).

Lien avec la Gâteaux-différentiabilité

On voit clairement par (C.9) que si f est F-différentiable est $x \in \Omega$, alors f est continue en x. Ceci n'est pas vrai si f est seulement G-différentiable en x (exercice C.3). En fait, la F-différentiabilité est une notion plus forte que la G-différentiabilité, comme le montre la proposition suivante.

Proposition C.4 *Si $f : \Omega \subseteq \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ est F-différentiable en $x \in \Omega$ avec une dérivée L, alors f est G-différentiable en x et $L = f'(x)$.*

Démonstration. Soit $h_0 \in \mathbb{E}$. En prenant $h = th_0$ dans (C.8) avec $t \downarrow 0$, on obtient

$$\frac{1}{t} \Big(f(x + th_0) - f(x) - tLh_0 \Big) \to 0.$$

On en déduit que pour $t \downarrow 0$

$$\frac{1}{t} \Big(f(x + th_0) - f(x) \Big) \to Lh_0.$$

Ceci montre que f admet une dérivée directionnelle en x suivant h_0. Comme h_0 est arbitraire dans $\mathbb{E}$, on en déduit que f est G-différentiable et que $f'(x) = L$. □

La réciproque de ce résultat n'a pas lieu : une fonction G-différentiable peut ne pas être F-différentiable, puisqu'une fonction G-différentiable en un point peut ne pas être continue en ce point (exercice C.3), ce qui n'est pas le cas d'une fonciton F-différentiable.

Dérivée partielle

Supposons que l'espace vectoriel $\mathbb{E}$ soit le produit de n espaces vectoriels $\mathbb{E}_1$, …, $\mathbb{E}_n$, c'est-à-dire $\mathbb{E} := \mathbb{E}_1 \times \cdots \times \mathbb{E}_n$, et que $f : \Omega \to \mathbb{F}$ soit une application définie sur un ouvert Ω de $\mathbb{E}$ à valeurs dans un espace vectoriel $\mathbb{F}$. En un point $x := (x_1, \ldots, x_n) \in \Omega$, avec des $x_i \in \mathbb{E}_i$, on peut considérer la i-ième *application partielle*

$$f_i : \Omega_i \to \mathbb{F} : v_i \mapsto f(x_1, \ldots, x_{i-1}, v_i, x_{i+1}, \ldots, x_n),$$

où $i \in [1:n]$ et $\Omega_i := \Omega \cap (\{x_1\} \times \cdots \times \{x_{i-1}\} \times \mathbb{E}_i \times \{x_{i+1}\} \times \cdots \times \{x_n\})$. Si cette application admet une dérivée en x_i, on l'appelle la i-ième *dérivée partielle* de f en x. C'est une application linéaire continue de $\mathbb{E}_i$ dans $\mathbb{F}$, un élément de $\mathcal{L}(\mathbb{E}_i, F)$ donc. Suivant le contexte, la note

$$f_i'(x) \qquad \text{ou} \qquad f_{x_i}'(x) \qquad \text{ou} \qquad \partial_i f(x) \qquad \text{ou} \qquad \partial_{x_i} f(x) \qquad \text{ou} \qquad \frac{\partial f}{\partial x_i}(x).$$

Si f est dérivable en $x \in \Omega$, alors ses dérivées partielles existent et $f'(x)$ peut se calculer à partir des $f_i'(x)$, comme l'affirme le théorème suivant.

Théorème C.5 (dérivée partielle) *Dans le cadre défini ci-dessus, si f est dérivable en $x \in \Omega$, alors elle possède en ce point des dérivées partielles $f_i'(x)$ pour tout $i \in [1:n]$ et, pour une direction $d = (d_1, \ldots, d_n) \in \mathbb{E}$, on a*

$$f'(x) \cdot d = \sum_{i=1}^{n} f_i'(x) \cdot d_i. \tag{C.10}$$

Démonstration. Comme $f'(a)$ est une application linéaire continue de $\mathbb{E}$ dans $\mathbb{F}$ et que $d = \sum_i (0, \ldots, 0, d_i, 0, \ldots, 0)$, on a

$$f'(x) \cdot d = \sum_{i=1}^{n} L_i(d_i), \tag{C.11}$$

où L_i est l'application linéaire continue $d_i \in \mathbb{E}_i \mapsto f'(x) \cdot (0, \ldots, 0, d_i, 0, \ldots, 0)$. Par la dérivabilité de f en x, on a

$$f\Big(x + (0, \ldots, 0, d_i, 0, \ldots, 0)\Big) = f(x) + f'(x) \cdot (0, \ldots, 0, d_i, 0, \ldots, 0) + o(\|d_i\|),$$

qui se récrit $f_i(x_i + d_i) = f_i(x_i) + L_i(d_i) + o(\|d_i\|)$: c'est la définition même de la dérivabilité de f_i en x_i et du fait que $f_i'(x) = L_i$. Alors l'expression (C.11) conduit à (C.10). □

Dérivée d'une fonction composée

Théorème C.6 (dérivée d'une fonction composée) *Soient $\mathbb{E}$, $\mathbb{F}$ et $\mathbb{G}$ trois espaces normés, Ω un ouvert de $\mathbb{E}$ et $\mathcal{O}$ un ouvert de $\mathbb{F}$. Si $f : \Omega \to \mathcal{O}$ est F-différentiable en $x \in \Omega$ et $g : \mathcal{O} \to \mathbb{G}$ est F-différentiable en $f(x)$, alors $(g \circ f)$ est F-différentiable en x et on a*

$$(g \circ f)'(x) = g'(f(x)) \circ f'(x). \tag{C.12}$$

Remarquons que l'identité (C.12) a bien un sens puisqu'à gauche on trouve un opérateur de $\mathcal{L}(\mathbb{E}, \mathbb{G})$ et qu'à droite on a la composition d'un opérateur $f'(x) \in \mathcal{L}(\mathbb{E}, \mathbb{F})$ et d'un opérateur linéaire $g'(f(x)) \in \mathcal{L}(\mathbb{F}, \mathbb{G})$.

Démonstration. Comme f est F-différentiable en x, on a

$$f(x+h) = f(x) + f'(x) \cdot h + \alpha_1(h),$$

où la fonction $h \mapsto \alpha_1(h)$ est un $o(h)$. On en déduit

$$(g \circ f)(x+h) = g(f(x+h)) = g\Big(f(x) + f'(x) \cdot h + \alpha_1(h)\Big). \tag{C.13}$$

D'autre part, g est F-différentiable en $f(x)$, si bien que l'on a

$$g(f(x)+k) = g(f(x)) + g'(f(x)) \cdot k + \alpha_2(k),$$

où la fonction $k \mapsto \alpha_2(k)$ est un $o(k)$. En prenant $k = f'(x) \cdot h + \alpha_1(h)$ et en combinant avec (C.13), on obtient

$$(g \circ f)(x+h) = g(f(x)) + g'(f(x)) \cdot \Big(f'(x) \cdot h + \alpha_1(h)\Big) + \alpha_2\Big(f'(x) \cdot h + \alpha_1(h)\Big).$$

On a

$$g'(f(x)) \cdot \alpha_1(h) = o(h)$$

et comme $f'(x) \cdot h + \alpha_1(h)$ est borné par une constante fois $\|h\|_{\mathbb{E}}$, on a aussi

$$\alpha_2\Big(f'(x) \cdot h + \alpha_1(h)\Big) = o\Big(f'(x) \cdot h + \alpha_1(h)\Big) = o(h).$$

On déduit de ces estimations

$$(g \circ f)(x+h) = (g \circ f)(x) + g'(f(x)) \cdot (f'(x) \cdot h) + o(h).$$

Donc $(g \circ f)$ est F-différentiable en x et on a la formule (C.12). □

Accroissements finis

La formule (C.9) définissant la dérivée de f en x nous dit comment varie f pour une variation infiniment petite de la variable x, mais ne donne pas d'estimation sur la différence $f(x+h)-f(x)$ pour un h non nul (on dit « fini » par opposition à « infiniment petit »). C'est cette information qu'apportent les théorèmes des accroissements finis, les théorèmes C.7 et C.12.

On appelle *segment ouvert* d'un espace vectoriel, un sous-ensemble de $\mathbb{E}$ défini à partir de la donnée de deux points *distincts* x et $y \in \mathbb{E}$ par

$$]x, y[:= \{(1-t)x + ty : t \in]0, 1[\}.$$

On définit de la même manière le *segment fermé* (dans ce cas on peut avoir $x = y$) :

$$[x, y] := \{(1-t)x + ty : t \in [0, 1]\}.$$

Si f est à valeurs scalaires on obtient aisément le résultat du théorème C.7 à partir du théorème des accroissements finis pour les fonctions réelles d'une variable réelle.

Théorème C.7 (des accroissements finis pour fonctions à valeurs scalaires) *Soient Ω un ouvert de $\mathbb{E}$, $x \in \Omega$ et $h \in \mathbb{E}$ tel que le segment fermé $[x, x+h] \subseteq \Omega$. On suppose que $f : \Omega \to \mathbb{R}$ à valeurs scalaires est continue sur Ω et différentiable sur le segment ouvert $]x, x+h[$. Alors il existe $\theta \in]0, 1[$ tel que*

$$f(x+h) = f(x) + f'(x+\theta h) \cdot h.$$

Démonstration. On se ramène au cas d'une fonction $\xi : [0, 1] \to \mathbb{R}$ en définissant

$$\xi(t) = f(x+th), \quad \forall t \in [0, 1].$$

Cette fonction est continue sur $[0, 1]$, différentiable sur $]0, 1[$ et pour tout $t \in]0, 1[$ le théorème C.6 donne

$$\xi'(t) = f'(x+th) \cdot h.$$

On applique le théorème des accroissements finis à ξ : il existe $\theta \in]0, 1[$ tel que

$$\xi'(\theta) = \xi(1) - \xi(0).$$

On en déduit le résultat. □

Si f est à valeurs vectorielles, le théorème précédent n'est plus nécessairement vrai (un contre-exemple est donné dans l'exercice C.6). On a toutefois le résultat très utile du théorème C.12. La démonstration de celui-ci utilise le lemme d'intérêt général suivant.

Lemme C.8 *Soient $\xi : [0,1] \to \mathbb{F}$ et $\mu : [0,1] \to \mathbb{R}$ deux fonctions continues sur $[0,1]$ et différentiables à droite sur $]0,1[$ (μ'_+ pouvant prendre la valeur $+\infty$). On suppose que pour tout $t \in]0,1[$, on a $\|\xi'_+(t)\|_{\mathbb{F}} \leqslant \mu'_+(t)$. Alors*

$$\|\xi(1) - \xi(0)\|_{\mathbb{F}} \leqslant \mu(1) - \mu(0),$$

avec inégalité stricte s'il existe un $t_0 \in]0,1[$ tel que $\|\xi'_+(t_0)\|_{\mathbb{F}} < \mu'_+(t_0)$.

Démonstration. Supposons que μ'_+ ne prenne que des valeurs finies (on pourra aisément adapter la démonstration au cas où μ'_+ prend la valeur $+\infty$). Soit $\varepsilon > 0$. On va montrer que pour tout $t \in [0,1]$, on a

$$\|\xi(t) - \xi(0)\|_{\mathbb{F}} \leqslant \mu(t) - \mu(0) + \varepsilon t + \varepsilon. \tag{C.14}$$

On en déduit la première partie du résultat en prenant $t = 1$ et en faisant tendre $\varepsilon \to 0$.

Par continuité, l'inégalité (C.14) est vérifiée pour $t \geqslant 0$ petit. Soit alors

$$\bar{t} = \sup\{t \in [0,1] : \text{ (C.14) est vérifiée sur } [0,t[\}.$$

Par continuité, (C.14) est aussi vérifiée pour $t = \bar{t}$. Montrons que $\bar{t} = 1$, ce qui clôturera la première partie de la démonstration.

Supposons que $\bar{t} < 1$. Alors pour $\tau > 0$ tel que $\bar{t} + \tau \in [0,1]$, on a grâce à la différentiabilité à droite de ξ et μ en $\bar{t}$

$$\xi(\bar{t} + \tau) - \xi(\bar{t}) - \xi'_+(\bar{t})\tau = o(\tau),$$

$$\mu(\bar{t} + \tau) - \mu(\bar{t}) - \mu'_+(\bar{t})\tau = o(\tau).$$

Donc pour $\tau > 0$ assez petit, le fait que $\|\xi'_+(\bar{t})\|_{\mathbb{F}} \leqslant \mu'_+(\bar{t})$ implique

$$\|\xi(\bar{t} + \tau) - \xi(\bar{t})\|_{\mathbb{F}} \leqslant \|\xi'_+(\bar{t})\tau\|_{\mathbb{F}} + \frac{\varepsilon}{2}\tau \leqslant \mu'_+(\bar{t})\tau + \frac{\varepsilon}{2}\tau,$$

$$\mu'_+(\bar{t})\tau \leqslant \mu(\bar{t} + \tau) - \mu(\bar{t}) + \frac{\varepsilon}{2}\tau.$$

En sommant les deux dernières inégalités, on obtient

$$\|\xi(\bar{t} + \tau) - \xi(\bar{t})\|_{\mathbb{F}} \leqslant \mu(\bar{t} + \tau) - \mu(\bar{t}) + \varepsilon\tau.$$

Comme (C.14) est vérifiée en $t = \bar{t}$, on a en utilisant l'inégalité triangulaire

$$\|\xi(\bar{t} + \tau) - \xi(0)\|_{\mathbb{F}} \leqslant \mu(\bar{t} + \tau) - \mu(0) + \varepsilon(\bar{t} + \tau) + \varepsilon.$$

Ceci montre que (C.14) est vérifiée en $\bar{t} + \tau$, ce qui contredit la maximalité de $\bar{t}$.

Supposons à présent qu'il existe $t_0 \in]0,1[$ tel que $\delta := \mu'_+(t_0) - \|\xi'_+(t_0)\|_{\mathbb{F}} > 0$. Alors pour $\tau > 0$ suffisamment petit, on a en procédant comme ci-dessus

$$\mu'_+(t_0)\tau \leqslant \mu(t_0 + \tau) - \mu(t_0) + \frac{\delta}{3}\tau$$

et donc

$$\begin{aligned}\|\xi(t_0+\tau)-\xi(t_0)\|_{\mathbb{F}} &\leqslant \|\xi'_+(t_0)\|_{\mathbb{F}}\tau+\frac{\delta}{3}\tau\\ &= \mu'_+(t_0)\tau-\frac{2\delta}{3}\tau\\ &\leqslant \mu(t_0+\tau)-\mu(t_0)-\frac{\delta}{3}\tau\\ &< \mu(t_0+\tau)-\mu(t_0).\end{aligned}$$

D'autre part, d'après la première partie,

$$\|\xi(t_0)-\xi(0)\|_{\mathbb{F}}\leqslant\mu(t_0)-\mu(0)$$
$$\|\xi(1)-\xi(t_0+\tau)\|_{\mathbb{F}}\leqslant\mu(1)-\mu(t_0+\tau).$$

En sommant ces trois dernières inégalités, on obtient l'inégalité stricte désirée. □

Corollaire C.9 *Soient $a,b\in\mathbb{R}$, avec $a<b$, et $\varphi:[a,b]\to\mathbb{R}$ une fonction continue, dérivable à droite sur $]a,b[$, φ'_+ pouvant prendre la valeur $+\infty$. On suppose que pour tout $t\in]a,b[$, on a $\varphi'_+(t)\geqslant 0$. Alors*

$$\varphi(b)\geqslant\varphi(a),$$

avec inégalité stricte s'il existe un $t_0\in]a,b[$ tel que $\varphi'_+(t_0)>0$.

Démonstration. On applique le lemme **??** avec $\xi\equiv 0\in\mathbb{R}$ et $\mu(s)=\varphi((1-s)a+sb)$. Pour tout $s\in]0,1[$, on a bien

$$\mu'_+(s)=\varphi'_+((1-s)a+sb)(b-a)\geqslant|\xi'_+(s)|=0.$$

On en déduit que $\mu(1)\geqslant\mu(0)$. On a aussi $\mu(1)>\mu(0)$ si $\mu'_+(s_0)>0$ en un seul point $s_0\in]0,1[$. □

Le résultat précédent s'utilise le plus souvent pour comparer les valeurs de deux fonctions continues φ et ψ dont les dérivées à droite se comparent.

Corollaire C.10 *Soient $a,b\in\mathbb{R}$, avec $a<b$, et $\varphi,\psi:[a,b]\to\mathbb{R}$ deux fonctions continues, dérivables à droite sur $]a,b[$. On suppose que pour tout $t\in]a,b[$, on a $\varphi'_+(t)\leqslant\psi'_+(t)$. Alors*

$$\varphi(b)-\varphi(a)\leqslant\psi(b)-\psi(a),$$

avec inégalité stricte s'il existe un $t_0\in]a,b[$ tel que $\varphi'_+(t_0)<\psi'_+(t_0)$.

Démonstration. On applique le corollaire C.9 sur $(\psi-\varphi)$. □

Le *théorème de Rolle* affirme que si $a,b\in\mathbb{R}$, $a<b$, et $\varphi:[a,b]\to\mathbb{R}$ est une fonction continue, dérivable sur $]a,b[$, alors il existe un point $c\in]a,b[$ tel que $\varphi'(c)=\frac{\varphi(b)-\varphi(a)}{b-a}$.

Voici une variante de ce théorème qui peut être utilisée lorsque la fonction n'admet que des dérivées directionnelles à droite.

Corollaire C.11 *Soient $a, b \in \mathbb{R}$, $a < b$, et $\varphi : [a, b] \to \mathbb{R}$ une fonction continue et dérivable à droite sur $]a, b[$, φ'_+ pouvant prendre les valeurs $-\infty$ ou $+\infty$. Alors il existe $c_1, c_2 \in]a, b[$ tels que*

$$\varphi'_+(c_1) \leqslant \frac{\varphi(b) - \varphi(a)}{b - a} \leqslant \varphi'_+(c_2).$$

Démonstration. On raisonne par l'absurde. Si l'inégalité de gauche n'est jamais vérifiée sur $]a, b[$, alors pour tout $t \in]a, b[$, $\varphi'_+(t) > \psi'(t)$, où $\psi(t) := \frac{\varphi(b)-\varphi(a)}{b-a} t$. D'après le corollaire C.9, on en déduirait que $\varphi(b) - \varphi(a) > \psi(b) - \psi(a)$, ce qui est absurde. On s'y prend de la même manière pour l'inégalité de droite. □

Théorème C.12 (des accroissements finis pour fonctions à valeurs vectorielles) *Soient Ω un ouvert de $\mathbb{E}$, $x \in \Omega$ et $h \in \mathbb{E}$ tel que le segment fermé $[x, x + h] \subseteq \Omega$. On suppose que $f : \Omega \to \mathbb{F}$ est continue sur Ω et différentiable sur le segment ouvert $]x, x + h[$. Alors*

$$\|f(x + h) - f(x)\|_{\mathbb{F}} \leqslant \left(\sup_{z \in]x, x+h[} \|f'(z)\| \right) \|h\|_{\mathbb{E}}.$$

Démonstration. On prend $\xi(t) = f(x + th)$ et $\mu(t) = M\|h\|_{\mathbb{E}} t$, où

$$M = \sup_{z \in]x, x+h[} \|f'(z)\|.$$

Si $M = +\infty$, il n'y a rien à démontrer. Sinon, ces fonctions à valeurs dans $\mathbb{F}$ et $\mathbb{R}$ respectivement sont bien continues sur $[0, 1]$ et différentiables sur $]0, 1[$. On a aussi pour $t \in]0, 1[$,

$$\|\xi'(t)\| = \|f'(x + th)h\|_{\mathbb{F}} \leqslant M\|h\|_{\mathbb{E}} = \mu'(t).$$

L'application du lemme **??** donne le résultat. □

Corollaire C.13 *Sous les hypothèses du théorème C.12, si $L \in \mathcal{L}(\mathbb{E}, \mathbb{F})$, on a*

$$\|f(x + h) - f(x) - Lh\|_{\mathbb{F}} \leqslant \left(\sup_{z \in]x, x+h[} \|f'(z) - L\| \right) \|h\|_{\mathbb{E}}.$$

Démonstration. On applique le théorème à l'application $x \mapsto f(x) - Lx$. □

Lorsque f est dérivable en x, ce corollaire s'utilise souvent avec $L = f'(x)$.

Fonction implicite

Le cadre est le suivant. On suppose que $\mathbb{E}$ est un espace *topologique*, que $\mathbb{F}$ et $\mathbb{G}$ sont deux espaces vectoriels *normés*, que Ω est un ouvert de $\mathbb{E}\times\mathbb{F}$ et que F est une application de $\Omega \to \mathbb{G}$. Soit (a,b) est un point de Ω tel que

$$F(a,b)=0.$$

On cherche une fonction $x \to \eta(x)$, dite *fonction implicite*, définie dans un voisinage ouvert U de a telle que pour tout $x \in U$, on ait $(x,\eta(x)) \in \Omega$ et

$$F(x,\eta(x))=0.$$

Lorsqu'elle existe, on note F'_y la dérivée partielle de F par rapport à y.

L'existence d'une fonction implicite est assurée dans les conditions spécifiées dans le résultat suivant. La construction de $\eta(x)$ dans $\mathbb{F}$ requiert la complétude de $\mathbb{F}$.

Théorème C.14 (existence d'une fonction implicite) *Dans le cadre ci-dessus, on suppose que $\mathbb{F}$ est complet, que $F:\Omega\to\mathbb{G}$ est continue, que $F'_y(x,y)$ existe pour tout $(x,y)\in\Omega$ et $F'_y:\Omega\to\mathcal{L}(\mathbb{F},\mathbb{G})$ est continue, et que $F'_y(a,b)$ est un isomorphisme de $\mathbb{F}$ dans $\mathbb{G}$ (donc $F'_y(a,b)^{-1}\in\mathcal{L}(\mathbb{G},\mathbb{F})$), Alors, il existe un voisinage ouvert U de a dans $\mathbb{E}$, un voisinage ouvert V de b dans $\mathbb{F}$ et une fonction $\eta:U\to V$ continue tels que*

1) *pour tout $x\in U$, $F(x,\eta(x))=0$,*
2) *pour $x\in U$, le seul $y\in V$ vérifiant $F(x,y)=0$ est $\eta(x)$.*

Si $\mathbb{F}$ est complet et $F'_y(a,b)$ est un isomorphisme, alors $\mathbb{G}$ est nécessairement complet.

Intéressons nous à présent à la différentiabilité de la fonction implicite $\eta:U\to V$. Il faut alors supposer que $\mathbb{E}$ est un *espace vectoriel normé*. Par ailleurs il faut nécessairement une hypothèse de dérivabilité de F par rapport à x, car sans cela, il n'y pas de raisons pour que η soit dérivable, comme le montre le cas où $F:\mathbb{R}^2\to\mathbb{R}$ est définie par $F(x,y)=|x|-y$. La fonction implicite $\eta(x)=|x|$ n'est pas dérivable en $x=0$. Dans le résultat suivant, on suppose que la fonction implicite existe et on montre sa régularité sous des hypothèses plus faibles que celles du théorème d'existence.

Théorème C.15 (dérivabilité d'une fonction implicite) *On suppose que $\mathbb{E}$, $\mathbb{F}$ et $\mathbb{G}$ sont trois espaces normés et que Ω est un ouvert de $\mathbb{E}\times\mathbb{F}$. Si U est un voisinage ouvert de a dans $\mathbb{E}$ et V est un voisinage ouvert de b dans $\mathbb{F}$ tels que $U\times V\subseteq\Omega$, $\eta:U\to V$ est une fonction implicite de F passant par (a,b), η est* continue *en a, F est dérivable en (a,b), $F'_y(a,b)$ est un* isomorphisme *de $\mathbb{F}$ dans $\mathbb{G}$. Alors η est dérivable en a et on a la formule*

$$\eta'(a)=-\left(F'_y(a,b)\right)^{-1}\circ\left(F'_x(a,b)\right).$$

Dès lors, si l'on peut montrer l'existence et la continuité de la fonction implicite par un autre moyen que le théorème d'existence ci-dessus, sa dérivabilité ne dépendra que de la dérivabilité de F sur le graphe de η.

L'étude des fonctions implicites peut se faire dans un cadre beaucoup plus général que celui des systèmes d'équations différentiables considérés ici. Il s'agit toujours de « systèmes » dont on veut décrire l'évolution des solutions en fonction de paramètres. En ce qui concerne l'optimisation, la question est ébauchée à la section 4.6 (Analyse de sensibilité) et traitée plus systématiquement dans l'ouvrage [67]. Pour les inéquations variationnelles, on pourra consulter [159]. Dans ces deux derniers cas, le bon concept est celui de multifonction implicite.

C.2.2 Dérivée seconde

Définition

Soient $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ deux espaces normés, Ω un ouvert de $\mathbb{E}$ et

$$f : \Omega \to \mathbb{F}$$

une application F-différentiable sur Ω. Pour tout $x \in \Omega$, $f'(x)$ appartient à l'espace normé $\mathcal{L}(\mathbb{E}, \mathbb{F})$. Il y a donc un sens à s'intéresser à la différentiabilité de l'application

$$f' : \Omega \to \mathcal{L}(\mathbb{E}, \mathbb{F}) : x \mapsto f'(x).$$

On dit que f est *deux fois différentiable* en $x \in \Omega$ si f est F-différentiable dans un voisinage de x et si f' est F-différentiable en x. On note cette dérivée $f''(x)$, qui est donc un élément de $\mathcal{L}(\mathbb{E}, \mathcal{L}(\mathbb{E}, \mathbb{F}))$. Dès lors, pour tout h et $k \in \mathbb{E}$, on a

$$\begin{array}{rcl} f''(x) \cdot h & \in & \mathcal{L}(\mathbb{E}, \mathbb{F}) \\ (f''(x) \cdot h) \cdot k & \in & \mathbb{F}. \end{array}$$

On note encore

$$f''(x) \cdot (h, k) := (f''(x) \cdot h) \cdot k \qquad \text{et} \qquad f''(x) \cdot h^2 := f''(x) \cdot (h, h).$$

Cette notation est sans danger car, comme le montre la proposition suivante, l'application $(h, k) \mapsto f''(x) \cdot (h, k)$ est symétrique.

Propriétés

Proposition C.16 *Supposons que f soit deux fois différentiable en $x \in \Omega$. Alors l'application*

$$f''(x) : (h, k) \in \mathbb{E}^2 \mapsto f''(x) \cdot (h, k) \in \mathbb{F}$$

est bilinéaire symétrique.

Démonstration. La bilinéarité de $f''(x)$ vient de la linéarité de

$$h \in \mathbb{E} \mapsto f''(x) \cdot h \in \mathcal{L}(\mathbb{E}, \mathbb{F})$$

et de la linéarité de

$$k \in \mathbb{E} \mapsto (f''(x) \cdot h) \cdot k \in \mathbb{F}.$$

Montrons à présent la symétrie. Fixons h et $k \in \mathbb{E}$ et définissons pour $t > 0$ assez petit

$$S_t(h,k) = \frac{1}{t^2}(f(x+th+tk) - f(x+th) - f(x+tk) + f(x)).$$

Nous allons montrer que

$$\lim_{t \downarrow 0} S_t(h,k) = f''(x) \cdot (h,k).$$

Comme S_t est symétrique, cela démontrera le résultat.

Remarquons d'abord qu'en introduisant

$$g(k) = f(x+th+tk) - f(x+tk),$$

on a

$$S_t(h,k) - f''(x) \cdot (h,k) = \frac{1}{t^2}\Big(g(k) - g(0) - t^2 f''(x) \cdot (h,k)\Big).$$

On va majorer la norme du membre de droite en utilisant le théorème des accroissements finis. Dans ce but, on calcule

$$g'(k) = t\Big(f'(x+th+tk) - f'(x+tk)\Big),$$

qui, avec

$$\begin{aligned} f'(x+th+tk) &= f'(x) + tf''(x) \cdot (h+k) + o(t)\|h+k\|_{\mathbb{E}} \\ f'(x+tk) &= f'(x) + tf''(x) \cdot k + o(t)\|h\|_{\mathbb{E}}, \end{aligned}$$

devient

$$g'(k) = t^2 f''(x) \cdot h + to(t)(\|h+k\|_{\mathbb{E}} - \|h\|_{\mathbb{E}}).$$

Par le corollaire C.13 du théorème des accroissements finis, on obtient alors

$$\begin{aligned} \|S_t(h,k) - f''(x) \cdot (h,k)\|_{\mathbb{F}} &\leqslant \frac{1}{t^2}\left(\sup_{\xi \in]0,k[} \|g'(\xi) - t^2 f''(x) \cdot h\|\right)\|k\|_{\mathbb{E}} \\ &= \frac{o(t)}{t}\left(\sup_{\xi \in]0,k[} (\|h+\xi\|_{\mathbb{E}} - \|h\|_{\mathbb{E}})\right)\|k\|_{\mathbb{E}}, \end{aligned}$$

qui tend vers 0 lorsque $t \downarrow 0$. □

Le résultat suivant établit le lien entre $f''(x) \cdot (h,k)$ et la dérivée directionnelle de $x \mapsto f'(x) \cdot h$. Il fournit ainsi un moyen simple de calculer $f''(x) \cdot (h,k)$.

Proposition C.17 *Si f est deux fois différentiable en $x \in \Omega$ et $(h,k) \in \mathbb{E}^2$, alors l'application*

$$y \mapsto f'(y) \cdot h \in \mathbb{F},$$

définie dans un voisinage de x, est différentiable en x et sa dérivée directionnelle en x suivant $k \in \mathbb{E}$ est $f''(x) \cdot (h, k)$.

DÉMONSTRATION. L'application ξ définie dans un voisinage de $x \in \Omega$ par

$$\xi(y) = f'(y) \cdot h$$

est différentiable en x. C'est en effet la composée $e_h \circ f'$ de f' qui est différentiable en x et de

$$e_h : \mathcal{L}(\mathbb{E}, \mathbb{F}) \to \mathbb{F} : L \mapsto Lh$$

qui est linéaire continue, donc différentiable (exercice C.4). On a

$$\xi'(x) \cdot k = (e_h \circ f')'(x) \cdot k = e_h(f''(x) \cdot k) = f''(x) \cdot (k, h).$$

□

Développements au deuxième ordre

Si f est deux fois différentiable, $f(x + h)$ a un développement au deuxième ordre autour de x à un $o(\|h\|^2)$ près. Celui-ci étend en quelque sorte la condition de dérivabilité (C.8) au deuxième ordre. Réciproquement, un développement au deuxième ordre autour de x à un $o(\|h\|^2)$ près *d'une fonction deux fois différentiable* permet de déterminer les dérivées première et seconde. C'est ce que montre le théorème suivant. Pour comprendre sa démonstration, il sera utile d'avoir fait l'exercice C.4 donnant les formules de la dérivée de fonctions linéaire et bilinéaire.

Théorème C.18 *Soient Ω un ouvert de $\mathbb{E}$ et $x \in \Omega$. On suppose que $f : \Omega \to \mathbb{F}$ est différentiable sur Ω et deux fois différentiable en x. Alors*

$$f(x + h) = f(x) + f'(x) \cdot h + \frac{1}{2} f''(x) \cdot h^2 + o(\|h\|_{\mathbb{E}}^2). \tag{C.15}$$

Réciproquement, s'il existe $L_0 \in \mathbb{F}$, une application linéaire continue $L_1 \in \mathcal{L}(\mathbb{E}, \mathbb{F})$ et une application bilinéaire continue symétrique $L_2 \in \mathcal{L}_2(\mathbb{E}, \mathbb{F})$ telles que

$$f(x + h) = L_0 + L_1 \cdot h + \frac{1}{2} L_2 \cdot h^2 + o(\|h\|_{\mathbb{E}}^2), \tag{C.16}$$

alors $L_0 = f(x)$, $L_1 = f'(x)$ et $L_2 = f''(x)$.

DÉMONSTRATION. [(i)] Soit V un voisinage de $0 \in \mathbb{E}$ tel que $x + V \subseteq \Omega$. On introduit la fonction $g : V \to \mathbb{F}$ définie en $h \in V$ par

$$g(h) := f(x + h) - f(x) - f'(x) \cdot h - \frac{1}{2} f''(x) \cdot h^2.$$

Il faut montrer que $g(h) = o(\|h\|_{\mathbb{E}}^2)$. Clairement, g est dérivable sur V (théorème C.6 et exercice C.4) et

$$g'(h) = f'(x+h) - f'(x) - f''(x)\cdot h.$$

Mais f' est dérivable en x et $(f')'(x)\cdot h = f''(x)\cdot h$, si bien que cette expression de $g'(h)$ montre que

$$g'(h) = o(\|h\|_{\mathbb{E}}).$$

On utilise alors le théorème des accroissements finis (théorème C.12) à g et le fait que $g(0) = 0$:

$$\|g(h)\|_{\mathbb{F}} \leqslant \left(\sup_{k\in]0,h[} \|g'(k)\|\right) \|h\|_{\mathbb{E}} \leqslant o(\|h\|_{\mathbb{E}}^2).$$

[(ii)] Démontrons la réciproque. En prenant $h = 0$ dans (C.16), on voit que $L_0 = f(x)$. Compte tenu de cette information, en retranchant (C.15) et (C.16), en prenant $h = th'$ où h' est fixé et $t \downarrow 0$, en divisant par t et en passant à la limite, on trouve $L_1\cdot h' = f'(x)\cdot h'$. Comme h' est arbitraire, on a $L_1 = f'(x)$. On réitère le procédé en tenant compte des identités $L_0 = f(x)$ et $L_1 = f'(x)$: on retranche (C.15) et (C.16), on prend $h = th'$ où h' est fixé et $t \downarrow 0$, on divise par t^2 et on passe à la limite, pour trouver que $L_2\cdot(h')^2 = f''(x)\cdot(h')^2$. Comme h' est arbitraire, on a $L_2 = f''(x)$ parce que la valeur en (h,k) d'une fonction bilinéaire symétrique L_2 peut s'obtenir à partir de ses valeurs unidirectionnelles :

$$L_2(h,k) = \frac{1}{4}\Big(L_2(h+k,h+k) - L_2(h-k,h-k)\Big).$$

□

Aux théorèmes des accroissements finis C.7 et C.12, qui donnaient des estimations de $f(x+h) - f(x)$, correspondent les théorèmes C.19 et C.20 qui donnent des estimations de $f(x+h) - f(x) - f'(x)\cdot h$. Dans le théorème C.19 la fonction f doit être à valeurs scalaires.

Théorème C.19 *Soient Ω un ouvert de $\mathbb{E}$, $x \in \Omega$ et $h \in \mathbb{E}$ tel que le segment fermé $[x, x+h] \subseteq \Omega$. On suppose que $f : \Omega \to \mathbb{R}$ à valeurs scalaires est différentiable sur Ω et est deux fois différentiable sur le segment ouvert $]x, x+h[$. Alors il existe $\theta \in]0,1[$ tel que*

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)\cdot h + \frac{1}{2}f''(x+\theta h)\cdot h^2.$$

Démonstration. On se ramène au cas d'une fonction $\xi : [0,1] \to \mathbb{R}$ en définissant

$$\xi(t) = f(x+th), \quad \forall t \in [0,1].$$

Cette fonction est différentiable sur $[0,1]$, deux fois différentiable sur $]0,1[$ et

$$\begin{aligned} \xi'(t) &= f'(x+th)\cdot h, \quad \forall t \in [0,1], \\ \xi''(t) &= f''(x+th)\cdot h^2, \quad \forall t \in]0,1[. \end{aligned}$$

On obtient le résultat en appliquant la formule de Taylor à ξ : il existe $\theta \in]0,1[$ tel que $\xi(1) = \xi(0) + \xi'(0) + \frac{1}{2}\xi''(\theta)$. □

Théorème C.20 *Soient Ω un ouvert de $\mathbb{E}$, $x \in \Omega$ et $h \in \mathbb{E}$ tel que le segment fermé $[x, x+h] \subseteq \Omega$. On suppose que $f : \Omega \to \mathbb{R}$ est différentiable sur Ω et deux fois différentiable sur le segment ouvert $]x, x+h[$. Alors*

$$\|f(x+h) - f(x) - f'(x)\cdot h\|_{\mathbb{F}} \leqslant \frac{1}{2}\left(\sup_{z\in]x,x+h[} \|f''(z)\|\right)\|h\|_{\mathbb{E}}^2.$$

Démonstration. On se ramène au théorème des accroissements finis C.12 et à son lemme, en introduisant la fonction $\xi : [0,1] \to \mathbb{F}$ définie par

$$\xi(t) := f(x+th) - f(x) - f'(x)\cdot(th).$$

Cette fonction est bien définie sur $[0,1]$, continue sur cet intervalle et dérivable en tout point de $]0,1[$. Il s'agit de majorer $\|\xi(1) - \xi(0)\|_{\mathbb{F}}$, ce que l'on peut faire grâce au lemme **??** en majorant la dérivée de ξ, qui s'écrit pour tout $t \in]0,1[$

$$\xi'(t) = f'(x+th)\cdot h - f'(x)\cdot h.$$

D'après la proposition C.17, $z \mapsto f'(z)\cdot h$ est différentiable en tout point de $]x, x+h[$. En utilisant le théorème des accroissements finis C.12 sur cette fonction, on obtient grâce à l'identité ci-dessus

$$\begin{aligned}\|\xi'(t)\|_{\mathbb{F}} &\leqslant \left(\sup_{z\in]x,x+th[} \|f''(z)\cdot h\|\right) t\|h\|_{\mathbb{E}} \\ &\leqslant \left(\sup_{z\in]x,x+h[} \|f''(z)\|\right) t\|h\|_{\mathbb{E}}^2 \\ &=: Mt\|h\|_{\mathbb{E}}^2.\end{aligned}$$

Si on définit $\mu(t) := \frac{1}{2}Mt^2\|h\|_{\mathbb{E}}^2$, on a $\|\xi'(t)\|_{\mathbb{F}} \leqslant \mu'(t)$ pour tout $t \in]0,1[$. Grâce au lemme **??**, on en déduit que $\|\xi(1) - \xi(0)\|_{\mathbb{F}} \leqslant \mu(1) - \mu(0)$, qui est le résultat attendu. □

Hessienne d'une fonction réelle

Supposons que $\mathbb{E}$ soit un espace de Hilbert, muni du produit scalaire $\langle\cdot,\cdot\rangle$. Si la fonction $f : \Omega \subseteq \mathbb{E} \to \mathbb{R}$ *à valeurs scalaires* est deux fois différentiable en $x \in \Omega$, l'application

$$k \in \mathbb{E} \mapsto f''(x)\cdot(h,k) \in \mathbb{R}$$

est linéaire continue. D'après le théorème de représentation de Riesz-Fréchet (théorème A.3), il existe un unique vecteur $v_h(x) \in \mathbb{E}$ tel que

$$f''(x)\cdot(h,k) = \langle v_h(x), k\rangle, \quad \forall k \in \mathbb{E}.$$

De la bilinéarité et de la continuité de $f''(x)$, on déduit que $v_h(x)$ dépend linéairement et continûment de h. Il existe donc un unique opérateur linéaire continu, noté $\nabla^2 f(x) \in \mathcal{L}(\mathbb{E},\mathbb{E})$ et appelé *hessienne* de f en x, tel que

$$f''(x)\cdot(h,k) = \langle \nabla^2 f(x)h, k\rangle, \quad \forall h,k \in \mathbb{E}.$$

Par la symétrie de $f''(x)$, on voit que $\nabla^2 f(x)$ est auto-adjoint :

$$\langle \nabla^2 f(x)h, k\rangle = \langle h, \nabla^2 f(x)k\rangle, \quad \forall h,k \in \mathbb{E}.$$

Notes

Tous les sujets abordés dans ce chapitre sont largement développés dans de nombreux ouvrages. Nous nous sommes souvent inspiré de Schwartz [486 ; 1992].

Exercices

C.1. Soient $\mathbb{E}$, $\mathbb{F}$ et $\mathbb{G}$ trois espaces normés, Ω un ouvert de $\mathbb{E}$ et $\mathcal{O}$ un ouvert de $\mathbb{F}$. Montrez que si $f : \Omega \to \mathcal{O}$ a une dérivée directionnelle en $x \in \Omega$ dans la direction $h \in \mathbb{E}$ et si $g : \mathcal{O} \to \mathbb{G}$ est *lipschitzienne* et a une dérivée directionnelle en $f(x)$ dans la direction $f'(x;h) \in \mathbb{F}$, alors $(g \circ f)$ a une dérivée directionnelle en x dans la direction h et

$$(g\circ f)'(x;h) = g'\Big(f(x); f'(x;h)\Big).$$

C.2. *Fonction max.* On considère la fonction max, notée μ en (C.2), et l'ensemble d'indices $I(x)$ défini en (C.3).

1) Montrez que μ est convexe et lipschitzienne.
2) Donnez la dérivée de μ lorsque $I(x)$ est un singleton.
3) Montrez que μ n'est pas Fréchet différentiable en x si $I(x)$ contient au moins deux indices.
4) Démontrez la formule (C.4).

C.3. Montrez que la fonction $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ définie par

$$f(x) = \begin{cases} \frac{x_1^4 + x_2^6}{(x_1 - x_2^2)^2 + x_1^5} & \text{si } x \neq 0 \\ 0 & \text{si } x = 0 \end{cases}$$

est G-différentiable en 0 avec $f'(0) = 0$ mais n'est pas continue en 0.

Par conséquent, *une fonction G-différentiable n'est pas nécessairement continue, donc pas nécessairement F-différentiable.* On verra (exercice **??**) qu'*une fonction convexe G-différentiable est F-différentiable.*

C.4. *Dérivées des fonctions linéaire et bilinéaire.*

1) Soient $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ deux espaces normés. Si $l : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ est linéaire continue alors l est différentiable en tout point x de $\mathbb{E}$ et on a

$$l'(x) = l \qquad \text{et} \qquad l''(x) = 0.$$

2) Soient $\mathbb{E}_1$, $\mathbb{E}_2$ et $\mathbb{F}$ des espaces normés. Si $b : \mathbb{E}_1 \times \mathbb{E}_2 \to \mathbb{F}$ est bilinéaire continue alors b est différentiable en tout point (x_1, x_2) de $\mathbb{E}_1 \times \mathbb{E}_2$ et pour tout (h_1, h_2) et $(k_1, k_2) \in \mathbb{E}_1 \times \mathbb{E}_2$, on a

$$b'(x_1, x_2) \cdot (h_1, h_2) = b(h_1, x_2) + b(x_1, h_2),$$
$$b''(x_1, x_2) \cdot ((h_1, h_2), (k_1, k_2)) = b(h_1, k_2) + b(k_1, h_2).$$

C.5. On considère la fonction définie sur $\mathbb{R}^n$ par $f(x) = \frac{1}{2}x^\mathsf{T}Ax + b^\mathsf{T}x$, où A est une matrice d'ordre n et $b \in \mathbb{R}^n$. Montrez que pour le produit scalaire euclidien

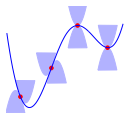
$$\nabla f(x) = \frac{1}{2}(A + A^\mathsf{T})x + b \quad \text{et} \quad \nabla^2 f(x) = \frac{1}{2}(A + A^\mathsf{T}).$$

Remarque. On notera que $f(x)$ ne dépend que de la partie symétrique $\frac{1}{2}(A + A^\mathsf{T})$ de A. Il est donc normal que $\nabla f(x)$ et $\nabla^2 f(x)$, qui ne dépendent que des valeurs $f(x)$ et non pas de la manière avec laquelle ces valeurs sont calculées, ne fasse intervenir A que par sa partie symétrique.

C.6. *Contre-exemple de l'hélice.* On considère l'application $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^2$ définie par $f(x) = (\cos 2\pi x, \sin 2\pi x)$. Montrez que le résultat du théorème C.7 n'est pas vérifié pour cette fonction à valeurs vectorielles.

C.7. *Encadrement quadratique d'une fonction $\mathcal{C}^{1,1}_L$.* On dit que $f : \Omega \to \mathbb{R}$ est de classe $\mathcal{C}^{1,1}_L(\Omega)$, pour un ouvert Ω d'un espace euclidien $\mathbb{E}$, si elle est dérivable sur Ω et si sa dérivée y est L-lipschitzienne. Montrez que si Ω est convexe, une telle fonction vérifie pour tout x et $y \in \Omega$:

$$\left|f(y) - f(x) - \langle \nabla f(x), y - x\rangle\right| \leqslant \frac{L}{2}\|y - x\|^2.$$



C.8. *Gradient et hessien pour le produit scalaire euclidien.* Soient $f : \Omega \to \mathbb{R}$ une fonction deux fois dérivable définie sur un ouvert Ω de $\mathbb{R}^n$ et $x \in \Omega$. Montrez que si le gradient $\nabla f(x)$ et la hessienne $\nabla^2 f(x)$ sont calculés en utilisant le produit scalaire euclidien, on a

$$(\nabla f(x))_i = \frac{\partial f}{\partial x_i}(x) \quad \text{et} \quad (\nabla^2 f(x))_{ij} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x).$$

C.9. *Distance à un ensemble* [115]. Soient $\mathbb{E}$ un espace euclidien (produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle$ et norme associée $\|\cdot\|$) et P une partie non vide et fermée de $\mathbb{E}$. On considère la fonction $d_P : \mathbb{E} \to \mathbb{R}$, la *distance à* P, définie par $d_P(x) = \inf_{y \in P} \|x - y\|$. On appelle *projection* de x aur P, toute solution de $\inf_{y \in P} \|x - y\|$ (une telle projection existe car $\mathbb{E}$ est de dimension finie). Soit $x \in \mathbb{E}$ tel que d_P est différentiable en x et $d'_P(x) \neq 0$. Montrez que

1) $x \notin P$;
2) $\nabla d_P(x) = (x - \bar{x})/\|x - \bar{x}\|$, où $\bar{x}$ est une projection de x sur P;
3) x a une unique projection sur P.

Lexiques

Cette annexe est un petit dictionnaire français-anglais et anglais-français donnant la traduction de quelques mots courants de l'optimisation. Nous avons étiqueté certains mots anglais par (US) lorsque l'orthographe américaine différait de l'anglaise. Comme de coutume, les commentaires (entre parenthèses et en italique) du lexique A-B s'adressent au lecteur de langue A.

Lexique français-anglais

Signification des indicateurs utilisés.

- *adj* : adjectif,
- *nf* : nom féminin,
- *nm* : nom masculin,
- *prép* : préposition,
- *vt* : catégorie transitive d'un verbe.

actif *adj* active ♦ **contrainte active** active constraint ♦ **ensemble ~** (*ensemble d'indices*) active set.

activation *nf* → *méthode*.

admissible *adj* feasible ♦ → *ensemble, point*.

algorithme *nm* algorithm ♦ **~ de BFGS** BFGS algorithm ♦ **~ de la sécante** secant algorithm ♦ **~ de points intérieurs** interior point algorithm ♦ **~ de quasi-Newton** quasi-Newton algorithm ♦ **~ de suivi de chemin** path-following algorithm ♦ **~ de Newton** Newton algorithm ♦ **~ de Newton inexact** inexact Newton algorithm ♦ **~ de Newton semi-lisse** semi-smooth Newton algorithm ♦ **~ de Newton tronqué** truncated Newton algorithm ♦ **~ du gradient**, **de la plus profonde descente** gradient, steepest descent algorithm ♦ **~ du gradient projeté** gradient projection algorithm ♦ **~ du gradient conjugué** conjugate gradient algorithm ♦ **~ du simplexe** simplex algorithm ♦ **~ du simplexe révisé** revised simplex algorithm ♦ **~ OQS (optimisation quadratique successive)** SQP (sequential quadratic programming) algorithm ♦ → *méthode*.

arête *nf* (*d'un polyèdre convexe*) edge.

autoconcordance *nf* self-concordancy, → *fonction*.

base *nf* basis ♦ **~ d'indices** (*en optimisation linéaire*) basis.

calcul différentiel *nm adj* calculus.

cas difficile *nm adj* (*dans les méthodes à régions de confiance*) hard case.

centre *nm* center ♦ **~ analytique** analytic center.

combinaison *nf* combination ♦ **~ affine** affine combination ♦ **~ conique** conical combination ♦ **~ convexe** convex combination.

commande optimale *nf adj* optimal control.

commander *vt* (*un système*) to control.

communication *nf* communication ♦ **~ directe** direct communication ♦ **~ inverse** reverse communication.

compact → *ensemble*.

compatible *adj* → *contrainte*.

complémentarité *nf* complementarity ♦ **~ stricte** strict complementarity ♦ **conditions de ~** complementarity conditions/slackness.
complexité *nf* complexity ♦ **classe de ~** complexity class.
cône *nm* cone ♦ **~ asymptotique** asymptotic cone ♦ **~ critique** critical cone ♦ **~ de récession** recession cone ♦ **~ dual** dual cone ♦ **~ épointé** blunt cone ♦ **~ normal** normal cone ♦ **~ pointé** pointed cone ♦ **~ saillant** salient cone ♦ **~ tangent** tangent cone.
conditionnement *nm* (*le phénomène*) conditioning ♦ (*la valeur qui estime le phénomène*) condition number ♦ **mauvais ~** ill-conditioning.
conjugué *adj* conjugate ♦ → *algorithme*.
contraction *nm* → *fonction contractante*.
contrainte *nf* constraint ♦ **~ active** active constraint ♦ **~ compatible** feasible constraint ♦ **~ d'égalité** equality constraint ♦ **~ de borne** bound constraint ♦ **~ d'inégalité** inequality constraint ♦ **~ inactive** inactive constraint ♦ **~ non réalisable/compatible** infeasible constraint ♦ **~ quasi-réalisable** weakly infeasible constraint ♦ **~ réalisable** feasible constraint.
convexe *nm*, *adj* convex ♦ → *combinaison*, *enveloppe*.
déplacement *nm* step, displacement.
direction *nf* direction ♦ **~ à courbure négative** negative curvature direction ♦ **~ conjuguée** conjugate direction ♦ **~ de descente** descent direction ♦ **~ de montée** ascent direction.
domaine *nm* (*d'une fonction*) domain.
dualité *nf* duality ♦ **saut de ~** duality gap.
égalité *nf* equality.
ensemble *nm* set ♦ **~ actif** (*ensemble d'indices*) active set ♦ **~ admissible** feasible set ♦ **~ compact** compact set ♦ **~ fermé** closed set ♦ **~ de sous-niveau** sublevel set.
enveloppe *nf* hull ♦ **~ affine** (*d'un ensemble*) affine hull ♦ **~ convexe** (*d'un ensemble*) convex hull ♦ **~ supérieure** (*de fonctions*) pointwise supremum, max-function.
erreur *nf* error ♦ **~ amont** backward error ♦ **~ aval** forward error.
face *nf* (*d'un ensemble convexe*) face.
facteur *nm* (*d'un produit*) factor ♦ **~ d'inexactitude** (*dans les algorithmes de Newton inexacts*) forcing term.
famille de problèmes *nf nm* (*en théorie de la complexité*) problem ♦ **~ NP-complets** NP-complete problem ♦ **~ NP-ardus** NP-hard problem.
fermé → *ensemble*.
fonction *nf* function ♦ **~ auto-concordante** self-concordant function ♦ **~ contractante** nonexpansive function ♦ **~ indicatrice** indicator function ♦ **~ marginale** marginal function ♦ **~ strictement contractante** contraction mapping.
gradient *nm* gradient.
hessienne *nf* Hessian (*avec majuscule*).
inégalité *nf* inequality ♦ **~ matricielle linéaire (IML)** linear matrix inequality (LMI).
IML → inégalité matricielle linéaire.
inf-convolution *nf* infimal convolution.
intérieur *nm* (*d'un ensemble*) interior ♦ **~ relatif** relative interior.
lagrangien *nm* Lagrangian (*avec majuscule*) ♦ **~ augmenté** augmented Lagrangian.
matrice *nf* matrix ♦ **~ antisymétrique** skew symmetric matrix ♦ **~ creuse** sparse matrix ♦ **~ symétrique** symmetric matrix.
méthode *nf* method ♦ **~ d'activation (de contraintes)** active set method ♦ **~ de BFGS** BFGS method ♦ **~ de pivotage** pivoting method ♦ **~ de faisceaux** bundle method ♦ → *algorithme*.
minimum *nm* (*un point*) minimum ♦ **~ saillant** sharp minimum.
multiplicateur *nm* multiplier.
négatif *adj* (*pour un nombre réel*) nonpositive ♦ **strictement ~** negative.
optimalité *nf* optimality ♦ **condition d'~** optimality condition.
optimisation *nf* optimisation, (*US*) optimization, programming (*devient obsolète*) ♦ **~ convexe** convex programming ♦ **~ linéaire** linear programming ♦ **~ multicritère** multicriteria optimization ♦ **~ non linéaire** nonlinear programming ♦ **~ quadratique** quadratic programming ♦ **~ semi-définie positive** semi-definite programming.

pas *nm* (*de recherche linéaire*) step-size, stepsize, step-length, steplength.
pénalisation *nf* penalisation, (*US*) penalization.
pivotage *nm* → *méthode*.
pli *nm* (*d'une fonction convexe*) kink.
point *nm* point, (*en optimisation linéaire*) solution ♦ **~ admissible** feasible point, (*en optimisation linéaire*) feasible solution.
point-selle *nm* saddle-point.
polyèdre *nm* polyhedron.
polyédrique *adj* polyhedral.
positif *adj* (*pour un nombre réel*) nonnegative ♦ **strictement ~** positive.
produit *nm* (*dans un réseau*) commodity, (*opération mathématique*) product ♦ **~ cartésien** Cartesian (*avec majuscule*) product ♦ **~ scalaire** inner product ♦ **~ scalaire euclidien** Euclidean (*avec majuscule*) inner product.
proximalité *nf* proximation.
quasi-réalisable *adj* → *contrainte*.
racine *nf* (*d'un polynôme*) root ♦ **~ carrée** (*d'un nombre*) square root.
réalisable *adj* → *contrainte*.
rebroussement *nm* (*en recherche linéaire*) backtracking.
recherche linéaire *nf adj* line-search, linesearch ♦ → *pas*, *rebroussement*.
région de confiance *nf nf* trust region.
saillant *adj* → *minimum*.
semi-continue *adj* (*fonction*) semi-continuous ♦ **~ inférieurement** lower semi-continuous ♦ **~ supérieurement** upper semi-continuous.
semi-continuité *nf* (*d'une fonction*) semi-continuity.
semi-lisse *adj* (*fonction*) semi-smooth.
sommet *nm* (*d'un polyèdre convexe*) vertex ♦ (*en optimisation linéaire*) vertex, basic feasible solution.
sous-différentiel *nm* subdifferential.
sous-niveau → *ensemble*.
suite *nf* sequence.
terme *nm* (*d'une somme*) term.
variable *nf* variable ♦ **~ basique** (*en optimisation linéaire*) basic variable ♦ **~ d'écart** slack variable ♦ **~ non basique** (*en optimisation linéaire*) nonbasic variable.

Lexique anglais-français

active → *constraint*, *method*, *set*.
affine affine, → *combination*, *hull*.
algorithm algorithme ♦ **BFGS ~** algorithme de BFGS ♦ **conjugate gradient ~** algorithme du gradient conjugué ♦ **gradient**, **steepest descent ~** algorithme du gradient, de la plus profonde descente ♦ **gradient projection ~** algorithme du gradient projeté ♦ **inexact Newton ~** algorithme de Newton inexact ♦ **interior point ~** algorithme de points intérieurs ♦ **Newton ~** algorithme de Newton ♦ **path-following ~** algorithme de suivi de chemin ♦ **quasi-Newton ~** algorithme de quasi-Newton ♦ **secant ~** algorithme de la sécante ♦ **semi-smooth Newton ~** algorithme de Newton semi-lisse ♦ **simplex ~** algorithme du simplexe ♦ **SQP (sequential quadratic programming) ~** algorithme OQS (optimisation quadratique successive) ♦ **truncated Newton ~** algorithme de Newton tronqué ♦ → *method*.
backtracking (*in line-search*) rebroussement.
basis base, (*in linear optimization*) base d'indices.
calculus calcul différentiel.
center centre ♦ **analytic ~** centre analytique.
closed → *set*.
combination combinaison ♦ **affine ~** combinaison affine ♦ **conical ~** combinaison conique ♦ **convex ~** combinaison convexe.
commodity (*in a network*) produit.
communication communication ♦ **direct ~** communication directe ♦ **reverse ~** communication inverse.
compact → *set*.
complementarity complémentarité ♦ **~ conditions, slackness** conditions de complémentarité ♦ **strict ~** complémentarité stricte.
complexity complexité ♦ **~ class** classe de complexité.

condition number conditionnement.
conditioning conditionnement ♦ **ill-~** mauvais conditionnement.
conjugate conjugué ♦ → *algorithm.*
cone cône ♦ **asymptotic ~** cône asymptotique ♦ **blunt ~** cône épointé ♦ **critical ~** cône critique ♦ **dual ~** cône dual ♦ **normal ~** cône normal ♦ **pointed ~** cône pointé ♦ **recession ~** cône de récession ♦ **salient ~** cône saillant ♦ **tangent ~** cône tangent.
constraint contrainte ♦ **active ~** contrainte active ♦ **bound ~** contrainte de borne ♦ **equality ~** contrainte d'égalité ♦ **feasible ~** contrainte réalisable *ou* compatible ♦ **inactive ~** contrainte inactive ♦ **inequality ~** contrainte d'inégalité ♦ **infeasible ~** contrainte non réalisable ♦ **weakly infeasible ~** contrainte quasi-réalisable.
contraction (mapping) fonction strictement contractante.
control *vt* (*a system*) commander.
convex convexe ♦ → *combination, hull.*
convolution convolution ♦ **infimal ~** inf-convolution.
direction direction ♦ **ascent ~** direction de montée ♦ **conjugate ~** direction conjuguée ♦ **descent ~** direction de descente ♦ **negative curvature ~** direction à courbure négative.
domain (*of a function*) domaine.
duality dualité ♦ **~ gap** saut de dualité.
edge (*of a convex polyhedron*) arête.
equality égalité.
error erreur ♦ **backward ~** erreur amont ♦ **forward ~** erreur aval.
face (*of a convex set*) face.
factor (*of a product*) facteur.
feasible → *constraint, point, set.*
function fonction ♦ **indicator ~** fonction indicatrice ♦ **marginal ~** fonction marginale ♦ **nonexpansive ~** fonction contractante ♦ **self-concordant ~** fonction autoconcordante.
gradient gradient.
hard case (*in trust region methods*) cas difficile.
Hessian hessienne (*no capital letter*).
hull enveloppe (*literally* coque) ♦ **convex ~** (*of a set*) enveloppe convexe ♦ **affine ~** (*of a set*) enveloppe affine.
inequality inégalité ♦ **linear matrix ~ (LMI)** inégalité matricielle linéaire (IML).
infeasible → *constraint, point.*
interior (*of a set*) intérieur ♦ **relative ~** intérieur relatif.
kink (*of a convex function*) pli.
Lagrangian lagrangien (*no capital letter*) ♦ **augmented ~** lagrangien augmenté.
LMI → inequality > linear matrix.
line-search, **linesearch** recherche linéaire ♦ → *backtracking, step-size.*
matrix matrice ♦ **skew symmetric ~** matrice antisymétrique ♦ **sparse ~** matrice creuse ♦ **symmetric ~** matrice symétrique.
method méthode ♦ **active set ~** méthode d'activation (de contraintes) ♦ **BFGS ~** méthode de BFGS ♦ **bundle ~** méthode de faisceaux ♦ **pivoting ~** méthode de pivotage ♦ → *algorithm.*
minimum *nm* (*a point*) minimum ♦ **sharp ~** minimum saillant.
multiplier multiplicateur.
negative (*for a real number*) strictement négatif ♦ **non~** positif.
nonexpansive → *function.*
optimal control commande optimale.
optimality optimalité ♦ **~ condition** condition d'optimalité.
optimisation, (*US*) **optimization** optimisation ♦ **multicriteria ~** optimisation multicritère.
penalisation, (*US*) **penalization** pénalisation.
pivoting → *method.*
point point ♦ **feasible ~** point admissible ♦ **infeasible ~** point non admissible.
pointwise supremum (*of functions*) enveloppe supérieure.
polyhedral polyédrique.
polyhedron polyèdre.
positive (*for a real number*) strictement positif ♦ **non~** négatif.
problem (*in complexity theory*) (famille de) problème(s) ♦ **NP-complete ~** (famille de) problème(s) NP-complet(s) ♦ **NP-hard ~** (famille de) problème(s) NP-ardu(s).
product (*mathematical operation*) produit ♦ **Cartesian ~** produit cartésien (*no capital letter*) ♦ **inner ~** produit scalaire ♦ **Euclidean inner ~** produit scalaire euclidien (*no capital letter*).

program (*in optimisation*) problème d'optimisation.
programming (*in optimisation*) optimisation ♦ **convex ~** optimisation convexe ♦ **linear ~** optimisation linéaire ♦ **nonlinear ~** optimisation non linéaire ♦ **quadratic ~** optimisation quadratique ♦ **semi-definite ~** optimisation semi-définie positive.
proximation proximalité.
root (*of a polynomial*) racine ♦ **square ~** (*of a number*) racine carrée.
saddle-point point-selle.
self-concordancy autoconcordance, → *function*.
semi-continuity (*of a function*) semi-continuité.
semi-continuous (*function*) semi-continue ♦ **lower ~** semi-continue inférieurement ♦ **upper ~** semi-continue supérieurement.
semi-smooth semi-lisse.
set ensemble ♦ **active ~** (*an index set*) ensemble actif ♦ **closed ~** ensemble fermé ♦ **compact ~** ensemble compact ♦ **feasible ~** ensemble admissible ♦ **sublevel ~** ensemble de sous-niveau.
sequence suite.
sharp → *minimum*.
solution solution, (*in linear optimization*) point admissible ♦ **basic feasible ~** (*in linear optimization*) sommet.
step déplacement ♦ **step-size**, **stepsize**, **step-length**, **steplength** (*in linesearch*) pas.
subdifferential sous-différentiel.
sublevel → *set*.
term (*of a sum*) terme ♦ **forcing ~** (*in inexact Newton algorithms*) facteur d'inexactitude.
trust region région de confiance.
variable variable ♦ **basic ~** (*in linear optimization*) variable basique ♦ **nonbasic ~** (*in linear optimization*) variable non basique ♦ **slack ~** variable d'écart.
vertex (*of a convex polyhedron*) sommet.
weakly infeasible → *constraint*.

Notations

Notations générales

$\forall$, $\exists$, $\exists!$	quantificateurs signifiant respectivement « pour tout », « il existe », « il existe un(e) unique »
α^+, α^-	(avec $\alpha \in \mathbb{R}$) $\alpha^+ = \max(\alpha, 0)$, $\alpha^- = \max(-\alpha, 0)$; donc $\alpha = \alpha^+ - \alpha^-$
$x \geqslant 0$	pour un vecteur $x \in \mathbb{R}^n$, signifie que *toutes* les composantes de x sont positives ($x_1 \geqslant 0, \ldots, x_n \geqslant 0$); de même, $x \leqslant 0$ signifie que $(-x) \geqslant 0$
$x > 0$	pour un vecteur $x \in \mathbb{R}^n$, signifie que *toutes* les composantes de x sont strictement positives ($x_1 > 0, \ldots, x_n > 0$); de même, $x < 0$ signifie que $(-x) > 0$
$\{x_k\}$	(avec x_k dans un ensemble $\mathbb{E}$) suite de $\mathbb{E}$, c'est-à-dire application de $\mathbb{N}$ dans $\mathbb{E}$ (ou son image)
$x_k \to x$	la suite $\{x_k\}$ converge vers x
$\alpha_k \downarrow \alpha$	la suite de réels $\{\alpha_k\}$ converge vers α, par des valeurs strictement supérieures (pour tout k : $\alpha_k > \alpha$)
$\alpha_k \uparrow \alpha$	la suite de réels $\{\alpha_k\}$ converge vers α, par des valeurs strictement inférieures (pour tout k : $\alpha_k < \alpha$)
$n!$	factorielle de l'entier n, $n! = n(n-1)(n-2)\cdots 2$
$\binom{n}{k}$	combinaison sans répétition de n éléments pris k par k (n et k sont entiers et $k \leqslant n$), $\binom{n}{k} = n!/(k!\,(n-k)!)$

Ensembles particuliers

$\mathrm{AC}(\mathbb{E})$	ensemble des fonctions autoconcordantes sur un espace vectoriel $\mathbb{E}$
B_r	boule ouverte de centre 0 et de rayon r
$\bar{B}_r$	boule fermée de centre 0 et de rayon r
$B(x, r)$	$= x + B_r$ boule ouverte de centre x et de rayon r
$\bar{B}(x, r)$	$= x + \bar{B}_r$ boule fermée de centre x et de rayon r
$\mathrm{BAC}(\mathbb{E})$	ensemble des (fonctions) barrières autoconcordantes sur un espace vectoriel $\mathbb{E}$
$\mathrm{Conv}(\mathbb{E})$	ensemble des fonctions d'un espace vectoriel $\mathbb{E}$ dans $\mathbb{R} \cup \{+\infty\}$, convexes, non identiquement égales à $+\infty$
$\mathrm{C}\overline{\mathrm{onv}}(\mathbb{E})$	ensemble des fonctions d'un espace vectoriel $\mathbb{E}$ dans $\mathbb{R} \cup \{+\infty\}$, convexes, fermées, non identiquement égales à $+\infty$
Δ_n	simplexe unité de $\mathbb{R}^n$
$[\alpha, \beta]$, $[\alpha, \beta[$, $]\alpha, \beta]$, $]\alpha, \beta[$, avec $\alpha \leqslant \beta$ dans $\mathbb{R}$	intervalles de $\mathbb{R}$ (fermé, semi-ouvert à droite, semi-ouvert à gauche, ouvert)

$[n_1 : n_2]$, avec $n_1 \leqslant n_2$ dans $\mathbb{N}$	$= [n_1, n_2] \cap \mathbb{N}$, intervalle de $\mathbb{N}$ formé des entiers n_1, $\ldots$, n_2
$\mathcal{L}(\mathbb{E}, \mathbb{F})$	ensemble des applications linéaires continues d'un espace vectoriel topologique $\mathbb{E}$ dans un autre espace vectoriel topologique $\mathbb{F}$
$\mathbb{N}$	ensemble des nombres entiers (naturels), $\mathbb{N} := \{0, 1, 2, \ldots\}$
$\mathbb{N}^*$	ensemble des nombres entiers non nuls, $\mathbb{N}^* := \mathbb{N} \setminus \{0\} = \{1, 2, 3, \ldots\}$
$\mathcal{P}(\mathbb{E})$	ensemble des parties d'un ensemble $\mathbb{E}$
$\mathbb{R}$	ensemble des nombres réels
$\mathbb{R}_+$	ensemble des nombres réels positifs $\{t \in \mathbb{R} : t \geqslant 0\}$
$\mathbb{R}_-$	ensemble des nombres réels négatifs $\{t \in \mathbb{R} : t \leqslant 0\} = -\mathbb{R}_+$
$\mathbb{R}_+^*$, $\mathbb{R}_{++}$	ensemble des nombres réels strictement positifs $\{t \in \mathbb{R} : t > 0\}$
$\mathbb{R}_-^*$, $\mathbb{R}_{--}$	ensemble des nombres réels strictement négatifs $\{t \in \mathbb{R} : t < 0\} = -\mathbb{R}_+^*$
$\overline{\mathbb{R}}$	la « droite achevée », $\mathbb{R} \cup \{-\infty, +\infty\}$
$\mathbb{R}^n$	ensemble des n-uplets $(x_1, \ldots, x_n)$ formés des nombres réels x_1, $\ldots$, x_n
$\mathbb{R}_+^n$	orthant positif de $\mathbb{R}^n$, $\{x \in \mathbb{R}^n : x \geqslant 0\}$
$\mathbb{R}_{++}^n$	intérieur de l'orthant positif de $\mathbb{R}^n$, $\{x \in \mathbb{R}^n : x > 0\}$
$\mathbb{R}_{\leqslant}^n$	simplexe ordonné de $\mathbb{R}^n$, $\{x \in \mathbb{R}^n : x_1 \leqslant \cdots \leqslant x_n\}$
$\mathbb{R}_{\triangledown}^n$	cône du second ordre de $\mathbb{R}^n$, $\{x \in \mathbb{R}^n : x_1^2 + \cdots + x_{n-1}^2 \leqslant x_n^2,\ x_n \geqslant 0\}$
$\mathcal{S}^n$	ensemble des matrices d'ordre n symétriques
$\mathcal{S}_+^n$	cône de $\mathcal{S}^n$ formé des matrices d'ordre n symétriques semi-définies positives
$\mathcal{S}_{++}^n$	cône de $\mathcal{S}^n$ formé des matrices d'ordre n symétriques définies positives
$\mathcal{S}_-^n$	cône de $\mathcal{S}^n$ formé des matrices d'ordre n symétriques semi-définies négatives, $-\mathcal{S}_+^n$

Opérations sur les ensembles

Ci-dessous, P, P_1, P_2 désignent des ensembles quelconques et C désigne une partie convexe d'un espace vectoriel $\mathbb{E}$.

∂P	frontière d'un ensemble P
P°, $\operatorname{int} P$	intérieur d'un ensemble P
P°_r}, $\operatorname{intr} P$	intérieur relatif d'un ensemble P
$\overline{P}$, $\operatorname{adh} P$	adhérence d'un ensemble P
P^+	cône dual d'un ensemble P
P^-	cône dual négatif, $P^- := -P^+$
C^∞	cône asymptotique d'un ensemble convexe fermé C
$C^\infty(x)$	cône asymptotique d'un ensemble convexe C en $x \in C$
$\mathrm{N}_x P$, $\mathrm{N}_P(x)$	cône normal à l'ensemble P en x
$\mathrm{T}_x P$, $\mathrm{T}_P(x)$	cône tangent à l'ensemble P en x
$\mathrm{T}_x^a P$, $\mathrm{T}_P^a(x)$	cône des directions admissibles à l'ensemble P en x
$\operatorname{aff} P$	enveloppe affine d'un ensemble P
$\operatorname{cone} P$	enveloppe conique d'un ensemble P
$\operatorname{co} P$	enveloppe convexe d'un ensemble P
$\overline{\operatorname{co}} P$	enveloppe convexe fermée d'un ensemble P
$\operatorname{ext}(C)$	ensemble des points extrêmes d'un ensemble convexe C
$P_1 + P_2$	somme (de Minkowski) des ensembles P_1 et P_2 d'un espace vectoriel, c'est l'ensemble $\{x + y : x \in P_1,\ y \in P_2\}$

$P_1 - P_2$	somme (de Minkowski) des ensembles P_1 et $-P_2$ d'un espace vectoriel, c'est l'ensemble $\{x - y : x \in P_1,\ y \in P_2\}$
αP	produit du scalaire $\alpha \in \mathbb{R}$ et de l'ensemble P d'un espace vectoriel, c'est l'ensemble $\{\alpha x : x \in P\}$

Espaces vectoriels et calcul matriciel

Ci-dessous, A désigne une matrice.

$\|\cdot\|$	norme
$\|\cdot\|_{\mathrm{D}}$	norme duale de la norme $\|\cdot\|$ pour un produit scalaire donné
$\|\cdot\|_0$	compteur de composante non nulle d'un vecteur
$\|\cdot\|_p$	norme ℓ_p, pour $p \in [1, \infty]$; voir (A.5a)-(A.5b)
$\langle \cdot, \cdot \rangle$	produit scalaire
A^*	adjointe de A, définie par la relation $\langle Au, v\rangle = \langle u, A^* v\rangle$ pour tout u, v
A^{-*}	adjointe de l'opérateur A^{-1} (supposé exister) ou inverse de A^* (ce sont les mêmes opérateurs)
A^{T}	transposée de A, qui est l'adjointe pour le produit scalaire euclidien : $(A^{\mathsf{T}})_{ij} = A_{ji}$
$A^{-\mathsf{T}}$	transposée de la matrice A^{-1} (supposée exister) ou inverse de A^{T} (ce sont les mêmes matrices)
$A \succcurlyeq 0$	la matrice A est symétrique semi-définie positive, c.-à-d., $A \in \mathcal{S}^n_+$
$A \succ 0$	la matrice A est symétrique définie positive, c.-à-d., $A \in \mathcal{S}^n_{++}$
E^{ij}	matrice de base de l'espace vectoriel des matrices d'un type donné : son élément (i, j) vaut 1 et les autres valent zéro
$\mathcal{N}(A)$	noyau de A (ensemble des vecteurs x tels que $Ax = 0$)
$\mathcal{R}(A)$	image de A (ensemble des vecteurs de la forme Ax)
$\lambda(A)$	ensemble ouvecteur (suivant le contexte) des *valeurs propres* de A
$\mathcal{S}^n$	ensemble des matrices d'ordre n symétriques
$\mathcal{S}^n_+$	cône de $\mathcal{S}^n$ formé des matrices d'ordre n symétriques semi-définies positives
$\mathcal{S}^n_{++}$	cône de $\mathcal{S}^n$ formé des matrices d'ordre n symétriques définies positives
$\sigma(A)$	vecteurs des valeurs singulières non nulles de A
$\det A$	déterminant d'une matrice carrée A
$\dim \mathbb{E}$	dimension d'un espace vectoriel $\mathbb{E}$ (nombre maximal de vecteurs linéairement indépendants dans $\mathbb{E}$)
e^i	vecteur de base de $\mathbb{R}^n$: sa composante i vaut 1 et les autres valent zéro
$\operatorname{tr} A$	trace d'une matrice carrée A, $\operatorname{tr} A = \sum_i A_{ii}$
$\operatorname{vect}\{x_1, \ldots, x_p\}$	sous-espace vectoriel engendré par les vecteurs $x_1, \ldots, x_p$

Fonctions particulières et opérations sur les fonctions

$f : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$	fonction entre deux ensembles $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$
$f : \mathbb{E} \multimap \mathbb{F}$	multifonction entre deux ensembles $\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ (si $x \in \mathbb{E}$, $f(x)$ est un sous-ensemble de $\mathbb{F}$)
$\mathcal{I}_P$	indicatrice d'un ensemble P
$f'(x; d)$	dérivée directionnelle d'une fonction f en x dans la direction d

$f'_+(x)$	dérivée à droite en $x \in \mathbb{R}$ d'une fonction f d'une variable réelle, $f'(x;1)$
$f'_-(x)$	dérivée à gauche en $x \in \mathbb{R}$ d'une fonction f d'une variable réelle, $f'(x;-1)$
$\partial f(x)$	sous-différentiel en x d'une fonction $f \in \mathrm{Conv}(\mathbb{E})$
$f'(x)$	dérivée (de Fréchet ou de Gâteaux) d'une fonction f en x
$f'(x) \cdot d$	valeur dans la direction d de la dérivée (de Fréchet ou de Gâteaux) d'une fonction f en x
$\nabla f(x)$	gradient en x d'une fonction f
$\nabla^2 f(x)$	hessienne en x d'une fonction f
f^∞	fonction asymptotique d'une fonction $f \in \mathrm{C}\overline{\mathrm{onv}}(\mathbb{E})$
$\mathrm{d}(x,y)$	distance entre les points x et y dans un espace métrique
d_P, $\mathrm{dist}(\cdot,P)$	distance à l'ensemble P, $\mathrm{d}_P(x) := \inf\{\mathrm{d}(x,y) : y \in P\}$
$\mathrm{dom}\, f$	domaine d'une fonction $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$
$\mathrm{dom}\, T$	domaine d'une multifonction $T : \mathbb{E} \multimap \mathbb{F}$
$\mathrm{epi}\, f$	épigraphe d'une fonction $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$
$\mathrm{epi}_s\, f$	épigraphe stricte d'une fonction $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$
$\mathcal{G}(T)$	graphe d'une multifonction $T : \mathbb{E} \multimap \mathbb{F}$
P_f	opérateur proximal associé à une fonction $f \in \mathrm{C}\overline{\mathrm{onv}}(\mathbb{E})$
$g \circ f$	fonction de $\mathbb{E}$ dans $\mathbb{G}$, obtenue par composition de la fonction $f : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ et de la fonction $g : \mathbb{F} \to \mathbb{G}$ ($\mathbb{E}$, $\mathbb{F}$ et $\mathbb{G}$ sont des ensembles quelconques); $(g \circ f)(x) := g(f(x))$
$f \uplus g$	inf-convolution de deux fonctions f et $g : \mathbb{E} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ définies sur le même espace vectoriel $\mathbb{E}$
$f \veebar A$	inf-image de $f : \mathbb{E} \to \overline{\mathbb{R}}$ sous l'application linéaire $A : \mathbb{E} \to \mathbb{F}$ ($\mathbb{E}$ et $\mathbb{F}$ sont des espaces vectoriels)

Problèmes d'optimisation

$I^0(x)$, I^0_*	ensemble des indices des contraintes d'inégalité actives en x et en x_*
I^{00}_*	ensemble des indices des contraintes d'inégalité faiblement actives en x_*
I^{0+}_*	ensemble des indices des contraintes d'inégalité fortement actives en x_*
$I^+(x)$	ensemble des indices des contraintes d'inégalité strictement positives en x
$\Lambda(x_*) = \Lambda_*$	ensemble des multiplicateurs optimaux associés à un point stationnaire x_*
$S(P)$	ensemble des solutions du problème (P)
$\mathrm{val}(P)$	valeur optimale du problème (P)

Bibliographie

[1] J. Abadie (1967). On the Kuhn-Tucker theorem. In J. Abadie, éditeur, *Nonlinear Programming*, pages 19–36. North-Holland Publishing Company, Amsterdam. 206

[2] C.M. Ablow, G. Brigham (1955). An analog solution of programming problems. *Journal of the Operations Research Society of America*, 3, 388–394. 405, 427

[3] H. Akaike (1959). On a successive transformation of probability distribution and its application to the analysis of the optimum gradient method. *Ann. Inst. Statist. Math. Tokyo*, 11, 1–16. 286

[4] F. Al-Kkayyal, J. Kyparisis (1990). Finite convergence of algorithms for nonlinear programs and variational inequalities. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 70, 319–332. 391

[5] G.E. Alefeld, A. Frommer, G. Heindl, J. Mayer (2004). On the existence theorems of Kantorovich, Miranda and Borsuk. *Electronic Transactions on Numerical Analysis*, 17, 102–111. 356

[6] G.E. Alefeld, F.A. Potra, Z. Shen (2001). On the existence theorems of Kantorovich, Moore and Miranda. *Computing*, 15, 21–28. 356

[7] V. Alexeev, V. Tikhomirov, S. Fomine (1982). *Commande Optimale*. Mir, Moscou. 206

[8] E.L. Allgower, K. Georg (1990). *Numerical Continuation Methods – An Introduction*. Springer Series in Computational Mathematics 13. Springer-Verlag. 355

[9] E.L. Allgower, K. Georg (1993). Continuation and path following. In *Acta Numerica 1993*, Tome 2, pages 1–64. Cambridge University Press. 355

[10] E.D. Andersen, K.D. Andersen (1999). The MOSEK interior-point optimizer for linear programming: an implementation of the homogeneous algorithm. In S. Zhang, H. Frenk, C. Roos, T. Terlaky, éditeurs, *High Performance Optimization Techniques*, pages 197–232. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands. 562

[11] R. Andreani, E.G. Birgin, J.M. Martínez, M.L. Schuverdt (2007). On augmented Lagrangian methods with general lower-level constraints. *SIAM Journal on Optimization*, 18, 1286–1302. [doi]. 424

[12] N. Andrei (2020). *Nonlinear Conjugate Gradient Methods for Unconstrained Optimization*, Springer Optimization and Its Applications, Tome 158. Springer. 330

[13] P.L. De Angelis, G. Toraldo (1993). On the identification property of a projected gradient method. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 30, 1483–1497. 391

[14] K.M. Anstreicher, M.H. Wright (2000). A note on the augmented Hessian when the reduced Hessian is semidefinite. *SIAM Journal on Optimization*, 11, 243–253. 628

[15] A.S. Antipin (1992). Controlled proximal differential systems for solving saddle problems. *Differential Equations*, 28, 1498–1510. 471

[16] I.K. Argyros (2008). *Convergence and Applications of Newton-type Iterations*. Springer. 357

[17] I.K. Argyros, S. Hilout (2010). A Kantorovich-type convergence analysis of the Newton-Josephy method for solving variational inequalities. *Numerical Algorithms*, 55, 447–466. 499

[18] L. Armijo (1966). Minimization of functions having Lipschitz continuous first partial derivatives. *Pacific Journal of Mathematics*, 16, 1–3. [journal]. 271, 286
[19] K.J. Arnold, J.V. Beck (1977). *Parameter Estimation in Engineering and Science*. John Wiley & Sons, New York. 583
[20] K.J. Arrow, F.J. Gould, S.M. Howe (1973). A general saddle point result for constrained optimization. *Mathematical Programming*, 5, 225–234. [doi]. 430, 471
[21] K.J. Arrow, R.M. Solow (1958). Gradient methods for constrained maxima with weakened assumptions. In K.J. Arrow, L. Hurwicz, H. Uzawa, éditeurs, *Studies in Linear and Nonlinear Programming*, pages 166–176. Stanford University Press, Standford, Calif. 430
[22] J.-P. Aubin, I. Ekeland (1984). *Applied Nonlinear Analysis*. John Wiley & Sons, New York. 138, 207
[23] A. Auger, O. Teytaud (2007). Continuous lunches are free plus the design of optimal optimization algorithms. *Algorithmica*. 6
[24] A. Auslender, R. Cominetti, M. Haddou (1997). Asymptotic analysis for penalty and barrier methods in convex and linear programming. *Mathematics of Operations Research*, 22, 43–62. 100
[25] A. Auslender, M. Teboulle (2000). Lagrangian duality and related multiplier methods for variational inequality problems. *SIAM Journal on Optimization*, 10, 1097–1115. 472
[26] A. Auslender, M. Teboulle (2003). *Asymptotic Cones and Functions in Optimization and Variational Inequalitites*. Springer Monographs in Mathematics. Springer, New York. 9, 18, 31, 48, 67, 138
[27] A. Auslender, M. Teboulle, S. Ben-Tiba (1999). A logarithmic-quadratic proximal method for variational inequalitites. *Computational Optimization and Applications*, 12, 31–40. 430, 472
[28] A. Auslender, M. Teboulle, S. Ben-Tiba (1999). Interior proximal and multiplier methods based on second order homogeneous functionals. *Mathematics of Operations Research*, 24, 645–668. 430
[29] M.L. Balinski, A. Russakoff (1972). Some properties of the assignment polytope. *Mathematical Programming*, 3, 257–258. 508
[30] R.G. Baraniuk (2007). Compressive sensing [lecture notes]. *IEEE Signal Processing Magazine*, 24(4), 118–121. 425
[31] V. Barbu, T. Precupanu (1975). *Convexity and Optimization in Banach Spaces*. Editura Academiei, Bucarest. 138, 207
[32] Y. Bard (1974). *Nonlinear Parameter Estimation*. Academic. 583
[33] J. Barzilai, J.M. Borwein (1988). Two-point step size gradient methods. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 8, 141–148. [doi]. 286
[34] J.-L. Beauvois, R.-V. Joule (1987). *Petit traité de manipulation à l'usage des honnêtes gens*. Presses Universitaires de Grenoble. 399
[35] R.E. Bellman, R.R. Kalaba, J. Lockett (1966). *Numerical Inversion of the Laplace Transform*. Elsevier. 287
[36] I. Ben Gharbia, J.Ch. Gilbert (2012). Nonconvergence of the plain Newton-min algorithm for linear complementarity problems with a P-matrix. *Mathematical Programming*, 134, 349–364. [doi]. 342
[37] A. Ben-Tal, A. Nemirovski (2001). *Lectures on Modern Convex Optimization – Analysis, Algorithms, and Engineering Applications*. MPS-SIAM Series on Optimization 2. SIAM. 563, 627
[38] J.F. Benders (1962). Partitioning procedures for solving mixed-variables programming problems. *Numerische Mathematik*, 4, 238–252. [doi]. 472
[39] J.M. Bennet (1965). Triangular factors of modified matrices. *Numerische Mathematik*, 7, 217–221. 627

[40] Commandant Benoît (1924). Note sur une méthode de résolution des équations normales provenant de l'application de la méthode des moindres carrés à un système d'équations linéaires en nombre inférieur à celui des inconnues. Aplication de la méthode à la résolution d'un système défini d'équations linéaires (Procédé du Commandant Cholesky). *Bulletin Géodésique* (Toulouse), 2, 67–77. 627

[41] A. Berman, N. Shaked-Monderer (2003). *Completely Positive Matrices*. World Scientific, River Edge, NJ, USA. 195

[42] D.P. Bertsekas (1976). On the Goldstein-Levitin-Polyak gradient projection method. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 21, 174–184. 390, 391, 396

[43] D.P. Bertsekas (1976). Multiplier methods: a survey. *Automatica*, 12, 133–145. 430

[44] D.P. Bertsekas (1982). Projected Newton methods for optimization problems with simple constraints. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 20, 221–246. [doi]. 391

[45] D.P. Bertsekas (1982). *Constrained Optimization and Lagrange Multiplier Methods*. Academic Press. 424

[46] D.P. Bertsekas (1995). *Nonlinear Programming*. Athena Scientific. 19, 472

[47] D.P. Bertsekas (1999). *Nonlinear Programming* (seconde édition). Athena Scientific. 424

[48] D.P. Bertsekas (2015). *Convex optimization algorithms*. Athena Scientific. 19

[49] D. Bertsimas, J.N. Tsitsiklis (1997). *Introduction to linear optimization*. Athena Scientific, Belmont, Massachusetts. 506, 526

[50] L.T. Biegler, O. Ghattas, M. Heinkenschloss, B. van Bloemen Waanders, éditeurs (2003). *Large-Scale PDE-Constrained Optimization*. Springer, Berlin. 19

[51] E.G. Birgin, R.A. Castillo, J.M. Martínez (2005). Numerical comparison of augmented Lagrangian algorithms for nonconvex problems. *Computational Optimization and Applications*, 31, 31–55. 430

[52] G. Birkhoff (1946). Tres observaciones sobre el algebra lineal. *Universidad Nacionale Tucamán Revista*, 5, 147–151. 68

[53] Å. Björck (1996). *Numerical Methods for Least Squares Problems*. SIAM Publication, Philadelphia. 583

[54] Å. Björck (2004). The calculation of linear least squares problems. In *Acta Numerica 2004*, Tome 13, pages 1–53. Cambridge University Press. 583

[55] Å. Björck, T. Elfving, Z. Strakos (1998). Stability of conjugate gradient and Lanczos methods for linear least squares problems. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 19, 720–736. 569

[56] R.G. Bland (1977). New finite pivoting rules for the simplex method. *Mathematics of Operations Research*, 2, 103–107. [doi]. 523

[57] G. Blekherman, P.A. Parrilo, R.R. Thomas (2013). *Semidefinite Optimization and Convex Algebraic Geometry*. MOS-SIAM Series on Optimization. SIAM and MPS, Philadelphia. [doi]. 24

[58] L. Blum, F. Cucker, M. Shub, S. Smale (1988). *Complexity and Real Computation*. Springer Verlag. 255

[59] L. Blum, M. Shub, S. Smale (1988). On a theory of computations over the real numbers: NP-completeness, recursive functions and universal machines. In *Proceedings of the 29th Symp. Foundations of Computer Science*, pages 387–397. 224

[60] P.T. Boggs, R.H. Byrd (2019). Adaptive, limited-memory BFGS algorithms for unconstrained optimization. *SIAM Journal on Optimization*, 29(2), 1282–1299. [doi]. 380

[61] I.M. Bomze (2012). Copositive optimization – Recent developments and applications. *European Journal of Operations Research*, 216, 509–520. [doi]. 24

[62] J.F. Bonnans (1989). Asymptotic admissibility of the unit stepsize in exact penalty methods. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 27, 631–641. 432

[63] J.F. Bonnans (1989). Local study of Newton type algorithms for constrained problems. In S. Dolecki, éditeur, *Optimization*, Lecture Notes in Mathematics 1405, pages 13–24. Springer. 489

[64] J.F. Bonnans (1989). A variant of a projected variable metric method for bound constrained optimization problems. Rapport de recherche, INRIA, BP 105, 78153 Le Chesnay, France. 391

[65] J.F. Bonnans (1994). Local analysis of Newton-type methods for variational inequalities and nonlinear programming. *Applied Mathematics and Optimization*, 29, 161–186. [doi]. 489, 499

[66] J.F. Bonnans, J.Ch. Gilbert, C. Lemaréchal, C. Sagastizábal (2006). *Numerical Optimization – Theoretical and Practical Aspects* (seconde édition). Universitext. Springer Verlag, Berlin. [authors] [editor] [doi]. 19, 286, 489, 499, 562

[67] J.F. Bonnans, A. Shapiro (2000). *Perturbation Analysis of Optimization Problems*. Springer Verlag, New York. 138, 151, 206, 207, 633, 643

[68] J.M. Borwein, A.S. Lewis (2000). *Convex Analysis and Nonlinear Optimization – Theory and Examples*. CMS Books in Mathematics 3. Springer, New York. 104, 137, 138

[69] J.M. Borwein, J.D. Vanderwerff (2010). *Convex Functions – Constructions, Characterizations and Counterexamples*. Encyclopedia of Mathematics and Its Applications 109. Cambridge University Press. 138

[70] J.M. Borwein, Q.J. Zhu (2010). *Techniques of Variational Analysis*. Computational Management Science. Springer Science+Business Media, Inc., Berlin. 286

[71] A. Bouaricha, R.B. Schnabel (1998). Tensor methods for large sparse systems of nonlinear equations. *Mathematical Programming*, 83, 377–400. 356

[72] S. Boulmier (2019). *Optimisation globale avec LocalSolver*. Thèse de doctorat, Laboratoire Jean Kuntzmann, Université de Grenoble, Grenoble, France. 475

[73] N. Bourbaki (1971). *Éléments de Mathématiques – Topologie Générale*. Hermann, Paris. Réédité par Springer-Verlag en 2007. 103

[74] S. Boyd, N. Parikh, E. Chu, B. Peleato, J. Eckstein (2010). Distributed optimization and statistical learning via the alternating direction method of multipliers. *Foundations and Trends in Machine Learning*, 3, 1–122. [doi]. 425

[75] S. Boyd, L. Vandenberghe (2004). *Convex Optimization*. Cambridge University Press. 19, 584

[76] C.B. Boyer (1968). *A History of Mathematics*. Princeton University Press, Princeton, New Jersey. 206

[77] C. Brezinski (2006). The life and work of André Cholesky. *Numerical Algorithms*, 43, 279–288. 627

[78] H. Brézis (1973). *Opérateurs Maximaux Monotones et semi-groupes de contractions dans les espaces de Hilbert*. Mathematical Studies 5. North-Holland, Amsterdam. 138, 471

[79] H. Brézis (1983). *Analyse Fonctionnelle Appliquée*. Masson, Paris. 8, 18, 54, 138, 598, 627

[80] K.W. Brodlie, A.R. Gourlay, J. Greenstadt (1973). Rank-one and rank-two corrections to positive definite matrices expressed in product form. *Journal of the Institute of Mathematics and its Applications*, 11, 73–82. 366

[81] A. Brondsted (1964). Conjugate convex functions in topological vector spaces. *Matematiskfysiske Meddelelser udgivet af det Kongelige Danske Videnskabernes Selskab*, 34, 1–26. 138

[82] P.N. Brown (1991). A theoretical comparison of the Arnoldi and GMRES algorithms. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 12, 58–78. 325

[83] P.N. Brown, Y. Saad (1990). Hybrid Krylov methods for nonlinear systems of equations. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 11, 450–481. 352

[84] C.G. Broyden (1970). The convergence of a class of double rank minimization algorithms, part I. *Journal of the Institute of Mathematics and its Applications*, 6, 76–90. 366

[85] R.E. Bruck, S. Reich (1977). Nonexpansive projections and resolvents of accretive operators in Banach spaces. *Houston Journal of Mathematics*, 3, 459–470. 425

[86] J.V. Burke (1991). An exact penalization viewpoint of constrained optimization. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 29, 968–998. 399, 431

[87] J.V. Burke, J.J. Moré (1988). On the identification of active constraints. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 25, 1197–1211. [doi]. 391

[88] J.V. Burke, J.J. Moré (1994). Exposing constraints. *SIAM Journal on Optimization*, 4, 573–595. 391

[89] J.D. Buys (1972). *Dual Algorithms for Constrained Optimization*. Thèse de doctorat, Rijksuniversiteit te Leiden, Leiden, The Netherlands. 430

[90] R.H. Byrd, J.Ch. Gilbert, J. Nocedal (2000). A trust region method based on interior point techniques for nonlinear programming. *Mathematical Programming*, 89, 149–185. [doi]. 563

[91] R.H. Byrd, P. Lu, J. Nocedal, C.Y. Zhu (1995). A limited memory algorithm for bound constrained optimization. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 16(6), 1190–1208. 380

[92] R.H. Byrd, J. Nocedal, R.B. Schnabel (1994). Representations of quasi-Newton matrices and their use in limited memory methods. *Mathematical Programming*, 63, 129–156. 380

[93] P.H. Calamai, J.J. Moré (1987). Projected gradient methods for linearly constrained problems. *Mathematical Programming*, 39, 93–116. [doi]. 391, 396

[94] C. Carathéodory (1907). Über den Variabilitätsbereich der Koeffizienten von Potenzreihen, die gegebene Werte nicht annehmen. *Mathematische Annalen*, 64, 95–115. 29

[95] C.W. Carroll (1961). The created response surface technique for optimizing nonlinear restrained systems. *Operations Research*, 9, 169–184. 413, 414

[96] J.L. Casti (1996). *Great Theories of 20th-Century Mathematics–and Why They Matter*. John Wiley & Sons, New York. 436

[97] A.L. Cauchy (1847). Méthode générale pour la résolution des systèmes d'équations simultanées. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences de Paris*, t25, 536–538. 261

[98] Y. Censor, S. Zenios (1992). Proximal minimization algorithm with D-functions. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 73, 451–464. 430

[99] J.-L. Chabert, Évelyne Barbin, Michel Guillemot, Anne Michel-Pajus, Jacques Borowczyk, Ahmed Djebbar, J.-C. Martzloff (1994). *Histoire d'Algorithmes – Du Caillou à la Puce*. Regards sur la Science. Belin, Paris. 355, 565

[100] F.S. Chaharsooghi, M.J. Emadi, M. Zamanighomi, M.R. Aref (2011). A new method for variable elimination in systems of inequations. In *Proceedings IEEE International Symposium on Information Theory*, pages 1215–1219. 66

[101] V. Chandrasekaran, B. Recht, P.A. Parrilo, A.S. Willsky (2012). The convex geometry of linear inverse problems. *Foundations of Computational Mathematics*, 12(6), 805–849. [doi]. 477

[102] Y.-Y. Chang (1979). Least index resolution of degeneracy in linear complementarity problems. Technical Report 79-14, Department of Operations Research, Stanford University, Stanford, CA, USA. 525

[103] B.W. Char, K.O. Geddes, G.H. Gonnet, M.B. Monagan, S.M. Watt (1988). Maple reference manuel. Symbolic Computation Group, Department of Computer Science, University of Waterloo, Ontario, Canada. 241

[104] S.S. Chen, D.L. Donoho, M.A. Saunders (1998). Atomic decomposition by basis pursuit. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 20, 33–61. [doi]. 477

[105] X. Chen, M. Fukushima (1999). Proximal quasi-Newton methods for nondifferentiable convex optimization. *Mathematical Programming*, 85, 313–334. 287

[106] N.V. Chernikova (1964). Algorithm for finding a general formula for the non-negative solutions of system of linear equations. *U.S.S.R. Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 4(4), 151–158. 47

[107] N.V. Chernikova (1965). Algorithm for finding a general formula for the non-negative solutions of system of linear inequalities. *U.S.S.R. Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 5(2), 228–233. 47

[108] N.V. Chernikova (1968). Algorithm for discovering the set of all solutions of a linear programming problem. *U.S.S.R. Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 8(6), 282–293. 47

[109] A. Chiche, J.Ch. Gilbert (2016). How the augmented Lagrangian algorithm can deal with an infeasible convex quadratic optimization problem. *Journal of Convex Analysis*, 23(2), 425–459. [pdf] [editor]. 422, 423, 424, 425, 431, 497

[110] A.L. Cholesky (1910). Sur la résolution numérique des systèmes d'équations linéaires. Manuscrit retrouvé par C. Brezinski dans les archives d'André Louis Cholesky qu'une personne de sa famille, M. Gross-Cholesky, a léguées à l'École Polytechnique. [bibnum]. 618, 627

[111] G. Choquet (1969). *Cours d'Analyse – Tome II : Topologie*. Masson, Paris. 600

[112] V. Chvátal (1983). *Linear Programming*. W.H. Freeman, New York. 526

[113] P.G. Ciarlet (1982). *Introduction à l'Analyse Numérique Matricielle et à l'Optimisation*. Masson, Paris. 18, 306

[114] P.G. Ciarlet (1988). *Introduction à l'Analyse Numérique Matricielle et à l'Optimisation* (seconde édition). Masson, Paris. 526

[115] F.H. Clarke (1983). *Optimization and Nonsmooth Analysis*. John Wiley & Sons, New York. Reprinted in 1990 by SIAM, Classics in Applied Mathematics 5 [doi]. 649

[116] K.A. Cliffe, A. Spence, S.J. Tavener (2000). The numerical analysis of bifurcation problems with application to fluid mechanics. In *Acta Numerica 2000*, pages 39–131. Cambridge University Press. 355

[117] A. Cobham (1965). The intrinsic computational difficulty of functions. In Y. Bar-Hillel, éditeur, *Proc. 1964 International Congress for Lagic, Methodology and Philosophy of Science*, pages 20–30. North-Holland, Amsterdam. 255

[118] G. Cohen (2000). *Convexité et Optimisation*. École Nationale Supérieure des Ponts et Chaussées et INRIA. 287

[119] P.L. Combettes, J.-B. Hiriat-Urruty, M. Thera (2014). Preface. *Mathematical Programming*, 148, 1–4. 23

[120] R. Cominetti (1990). Metric regularity, tangent sets, and second-order optimality conditions. *Applied Mathematics and Optimization*, 21(1), 265–287. [doi]. 206

[121] A.R. Conn, N.I.M. Gould, A. Sartenaer, Ph.L. Toint (1996). Convergence properties of an augmented Lagrangian algorithm for optimization with a combination of general equality and linear constraints. *SIAM Journal on Optimization*, 6, 674–703. 424

[122] A.R. Conn, N.I.M. Gould, Ph.L. Toint (1991). A globally convergent augmented Lagrangian algorithm for optimization with general constraints and simple bounds. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 28, 545–572. 424

[123] A.R. Conn, N.I.M. Gould, Ph.L. Toint (1992). *LANCELOT: A Fortran Package for Large-Scale Nonlinear Optimization (Release A)*. Computational Mathematics 17. Springer Verlag, Berlin. [doi]. 423

[124] A.R. Conn, N.I.M. Gould, Ph.L. Toint (2000). *Trust-Region Methods*. MPS-SIAM Series on Optimization 1. SIAM and MPS, Philadelphia. [doi]. 19

[125] D. Coppersmith, S. Winograd (1982). On the asymptotic complexity of matrix multiplications. *SIAM Journal on Computing*, 11, 472–492. 329

[126] R.W. Cottle (1974). Manifestations of the Schur complement. *Linear Algebra and its Applications*, 8, 189–211. 618
[127] R.W. Cottle, J.-S. Pang, R.E. Stone (1992). *The Linear Complementarity Problem*. Academic Press, Boston. 173, 386
[128] R.W. Cottle, J.-S. Pang, R.E. Stone (2009). *The Linear Complementarity Problem*. Classics in Applied Mathematics 60. SIAM, Philadelphia, PA, USA. [doi]. 173
[129] R. Courant (1943). Variational methods for the solution of problems of equilibrium and vibrations. *Bulletin of the American Mathematical Society*, 49, 1–23. 405
[130] R. Courant (1956-1957). Calculus of Variational and Supplementary Notes and Exercises (Mimeographed Notes), Supplementary Notes by M. Kruskal and H. Rubin, revised and augmented by J. Moser. New York University. 405
[131] P. Courtier, O. Talagrand (1987). Variational assimilation of meteorological observations with the adjoint vorticity equation. I: Theory. *Quaterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 113, 1311–1328. 379
[132] P. Courtier, O. Talagrand (1987). Variational assimilation of meteorological observations with the adjoint vorticity equation. II: Numerical results. *Quaterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 113, 1329–1347. 379
[133] D.A. Cox, J.B. Little, D. O'Shea (2007). *Ideals, Varieties, and Algorithms: An Introduction to Computational Algebraic Geometry and Commutative Algebra* (troisième édition). Undergraduate Texts in Mathematics. Springer, New York. 341
[134] J.Ch. Culioli (1994). *Introduction à l'Optimisation*. Ellipses, Paris. 18
[135] H.B. Curry (1944). The method of steepest descent for non-linear minimization problems. *Quaterly of Applied Mathematics*, 2, 258–261. 286
[136] J. Czyzyk, S. Mehrotra, M. Wagner, S.J. Wright (1999). PCx: an interior-point code for linear programming. *Optimization Methods and Software*, 11-12, 397–430. 562
[137] Y.H. Dai (2002). Convergence properties of the BFGS algorithm. *SIAM Journal on Optimization*, 13, 693–701. 380
[138] J.M. Danskin (1967). *The Theory of Max-Min and Its Applications to Weapons Allocation Problems*. Springer-Verlag, New York. 633
[139] G.B. Dantzig (1951). Maximization of a linear function of variables subject to linear inequalities. In Tj.C. Koopmans, éditeur, *Activity Analysis of Production and Allocation*, pages 339–347. Wiley, New York. 504, 518
[140] G.B. Dantzig (1990). Origins of the simplex method. In G. Nash, éditeur, *A History of Scientific Computing*, ACM Press Hist. Ser., pages 141–151. ACM Press, Reading, MA, USA. 503, 517
[141] W.C. Davidon (1959). Variable metric methods for minimization. AEC Research and Development Report ANL-5990, Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois. 214, 359
[142] W.C. Davidon (1991). Variable metric methods for minimization. *SIAM Journal on Optimization*, 1(1), 1–17. [doi]. 214, 359
[143] R. Dawkins (1996). *Le Gène Égoïste*. Odile Jacob, Paris. Traduction de *The Selfish Gene*, Oxford University Press, 1976. 213
[144] E.J. Dean, R. Glowinski (2006). An augmented Lagrangian approach to the numerical solution of the Dirichlet problem for the elliptic Monge-Ampère equation in two dimensions. *Electronic Transactions on Numerical Analysis*, 22, 71–96. [pdf]. 425
[145] J.-P. Dedieu (2006). *Points Fixes, Zéros et la Méthodes de Newton*. Mathématiques et Applications 54. Springer Verlag, Berlin. 357
[146] F. Delbos, J.Ch. Gilbert (2005). Global linear convergence of an augmented Lagrangian algorithm for solving convex quadratic optimization problems. *Journal of Convex Analysis*, 12(1), 45–69. [preprint] [editor]. 422, 423, 424, 431, 472
[147] F. Delbos, J.Ch. Gilbert, R. Glowinski, D. Sinoquet (2006). Constrained optimization in seismic reflection tomography: a Gauss-Newton augmented Lagrangian approach. *Geophysical Journal International*, 164, 670–684. [doi]. 16

[148] R.S. Dembo, S.C. Eisenstat, T. Steihaug (1982). Inexact Newton methods. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 19, 400–408. [doi]. 356

[149] R.S. Dembo, T. Steihaug (1983). Truncated-Newton algorithms for large-scale unconstrained optimization. *Mathematical Programming*, 26, 190–212. 357

[150] J.W. Demmel (1997). *Applied Numerical Linear Algebra*. SIAM. 627

[151] D. den Hertog (1992). *Interior Point Approach to Linear, Quadratic and Convex Programming*. Mathematics and its Applications 277. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht. 562

[152] J.E. Dennis, J.J. Moré (1974). A characterization of superlinear convergence and its application to quasi-Newton methods. *Mathematics of Computation*, 28, 549–560. [doi]. 285

[153] J.E. Dennis, H.F. Walker (1984). Inaccuracy in quasi-Newton methods: local improvement theorems. *Mathematical Programming Study*, 22, 70–85. 357

[154] P. Deuflhard (2004). *Newton Methods for Nonlinear Problems – Affine Invariance and Adaptative Algorithms*. Computational Mathematics 35. Springer, Berlin. 357

[155] P. Deuflhard, G. Heindl (1980). Affine invariant convergence theorems for Newton's method and extensions to related methods. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 16, 1–10. 356

[156] P.J.C. Dickinson, L. Gijben (2011). On the computational complexity of membership problems for the completely positive cone and its dual. Rapport de recherche. [Optimization Online]. 195

[157] E.D. Dolan, J.J. Moré (2002). Benchmarking optimization software with performance profiles. *Mathematical Programming*, 91, 201–213. [doi]. 255

[158] S. Dolecki, G.H. Greco (2007). Towards historical roots of necessary conditions of optimality – Regula of Peano. *Control and Cybernetics*, 36, 491–518. 206

[159] A.L. Dontchev, R.T. Rockafellar (2009). *Implicit Functions and Solution Mappings – A View from Variational Analysis*. Springer Monographs in Mathematics. Springer. 499, 643

[160] W.S. Dorn (1961). Duality in quadratic programming. *Quaterly of Applied Mathematics*, 18, 155–162. 435

[161] Z. Dostál (2005). Inexact semimonotonic augmented Lagrangians with optimal feasibility convergence for convex bound and equality constrained quadratic programming. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 43, 96–115. [doi]. 424

[162] Z. Dostál, A. Friedlander, S.A. Santos (1999). Augmented Lagrangians with adaptive precision control for quadratic programming with equality constraints. *Computational Optimization and Applications*, 14, 37–53. [doi]. 424

[163] Z. Dostál, A. Friedlander, S.A. Santos (2003). Augmented Lagrangians with adaptive precision control for quadratic programming with simple bounds and equality constraints. *SIAM Journal on Optimization*, 13, 1120–1140. [doi]. 424

[164] Z. Dostál, A. Friedlander, S.A. Santos, K. Alesawi (2000). Augmented Lagrangians with adaptive precision control for quadratic programming with equality constraints: corrigendum and addendum. *Computational Optimization and Applications*, 23, 127–133. [doi]. 424

[165] Z. Dostál, F.A.M. Gomes, S.A. Santos (2000). Duality based domain decomposition with natural coarse space for variational inequalities. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 126, 397–415. 424

[166] J. Drkošová, A. Greenbaum, M. Rozložník, Z. Strakoš (1995). Numerical stability of GMRES. *BIT*, 35, 309–330. 330

[167] I.S. Duff, J.K. Reid (1982). MA27 – A set of Fortran subroutines for solving sparse symmetric sets of linear equations. Rapport de Recherche AERE R10533, HMSO, London. 568

[168] I.S. Duff, J.K. Reid (1983). The multifrontal solution of indefinite sparse symmetric linear equations. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 9, 302–325. 568
[169] I.S. Duff, J.K. Reid (1996). Exploiting zeros on the diagonal in the direct solution of indefinite sparse symmetric linear systems. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 22, 227–257. 568
[170] J.C. Dunn (1987). On the convergence of projected gradient processes to singular critical points. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 55, 203–216. 391
[171] J.P. Dussault, M. Frappier, J.Ch. Gilbert (2019). Polyhedral Newton-min algorithms for complementarity problems. Rapport de recherche. [hal-02306526]. 357
[172] J. Eckstein (1993). Nonlinear proximal point algorithms using Bregman functions, with applications to convex programming. *Mathematics of Operations Research*, 18, 202–226. 138, 430
[173] J. Eckstein, P.J.S. Silva (2010). Proximal methods for nonlinear programming: double regularization and inexact subproblems. *Computational Optimization and Applications*, 46, 279–304. [doi]. 424, 430
[174] J. Eckstein, P.J.S. Silva (2013). A practical relative error criterion for augmented Lagrangians. *Mathematical Programming*, 141, 319–348. [doi]. 424
[175] J. Edmonds (1965). Paths, trees, and flowers. *Canad. J. Math.*, 17, 449–467. 255
[176] I. Ekeland (1974). On the variational principle. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 47(2), 324–353. [doi]. 286
[177] I. Ekeland, R. Temam (1974). *Analyse Convexe et Problèmes Variationnels*. Dunod, Paris. 138, 207, 471
[178] I.I. Eremin (1965). The relaxation method of solving systems of inequalities with convex functions on the left-hand sides. *Doklady Akad. Nauk SSSR*, 160, 994–996. 256
[179] I.I. Eremin (1969). Fejer mappings and problems of convex optimization. *Sibirsk. Mat. Zh.*, 10, 1034–1047. 256
[180] I.I. Eremin, V.D. Mazurov (1979). *Nestacionarnye Processy Programmirovanija*. Moskva. En russe. 256
[181] A. Ern, V. Giovangigli, D.E. Keyes, M.D. Smooke (1994). Towards polyalgorithmic linear system solvers for nonlinear elliptic systems. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 15, 681–703. 354
[182] V. Faber, T. Manteuffel (1984). Necessary and sufficient conditions for the existence of a conjugate gradient method. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 21, 352–361. 324
[183] F. Facchinei, A. Fischer, M. Herrich (2014). An LP-Newton method: nonsmooth equations, KKT systems, and nonidolated solutions. *Mathematical Programming*, 146, 1–36. 357
[184] F. Facchinei, J.-S. Pang (2003). *Finite-Dimensional Variational Inequalities and Complementarity Problems* (deux volumes). Springer Series in Operations Research. Springer. 357
[185] L. Fahrmeir, T. Kneib, S. Lang, B. Marx (2013). *Regression – Models, Methods and Applications*. Springer. [doi]. 565
[186] K. Fan (1949). On a theorem of Weyl concerning the eigenvalues of linear transformations. *Proceedings of the National Academy of the Sciences of U.S.A.*, 35, 652–655. 627
[187] J. Farkas (1902). Theorie der einfachen ungleichungen. Journal für die reine und angewandte Mathematik, 124, 1–27. 67, 71
[188] W. Fenchel (1949). On conjugate functions. *Canadian Journal of Mathematics*, 1, 73–77. 138, 471
[189] W. Fenchel (1951). *Convex Cones, Sets, and Functions*. Mimeographed Notes. Princeton University. 471

[190] D. Fernández, M.V. Solodov (2012). Local convergence of exact and inexact augmented Lagrangian methods under the second-order sufficient optimality condition. *SIAM Journal on Optimization*, 22(2), 384–407. 424, 431

[191] A.V. Fiacco, G.P. McCormick (1964). The sequential unconstrained minimization technique for nonlinear programing, a primal-dual method. *Management Science*, 10(2). [doi]. 414

[192] A.V. Fiacco, G.P. McCormick (1968). *Nonlinear Programming: Sequential Unconstrained Minimization Techniques*. John Wiley, New York. Reprinted in 1990 by SIAM in the collection "Classics in Applied Mathematics", number 4, [doi]. 18, 206, 399, 563

[193] M.L. Flegel, C. Kanzow (2005). Abadie-type constraint qualification for mathematical programs with equilibrium constraints. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 124(3), 595–614. [doi]. 206

[194] R. Fletcher (1970). A new approach to variable metric algorithms. *The Computer Journal*, 13, 317–322. 366

[195] R. Fletcher (1980). *Practical Methods of Optimization. Volume 1: Unconstrained Optimization*. John Wiley & Sons, Chichester. 286

[196] R. Fletcher (1982). A model algorithm for composite nondifferentiable optimization problems. *Mathematical Programming Study*, 17, 67–76. 496

[197] R. Fletcher (1987). *Practical Methods of Optimization* (seconde édition). John Wiley & Sons, Chichester. 18, 423, 526

[198] R. Fletcher (1995). An optimal positive definite update for sparse Hessian matrices. *SIAM Journal on Optimization*, 5, 192–218. 380

[199] R. Fletcher (2010). The sequential quadratic programming method. In G. Di Pillo, F. Schoen, éditeurs, *Numerical Optimization*, Lecture Notes in Mathematics 1989, pages 165–214. Springer. 499

[200] R. Fletcher, M.J.D. Powell (1974). On the modification of LDL^T factorizations. *Mathematics of Computation*, 28, 1067–1087. 627

[201] R. Fletcher, C.M. Reeves (1964). Function minimization by conjugate gradients. *The Computer Journal*, 7, 149–154. 329

[202] A. Forsgren, P.E. Gill, M.H. Wright (2002). Interior methods for nonlinear optimization. *SIAM Review*, 44, 525–597. 563

[203] M. Fortin, R. Glowinski (1982). *Méthodes de Lagrangien Augmenté – Applications à la Résolution Numérique de Problèmes aux Limites*. Méthodes Mathématiques de l'Informatique 9. Dunod, Paris. 425, 430

[204] J.B.J. Fourier (1827). Analyse des Travaux de l'Académie Royale des Sciences pendant l'année 1824, Partie Mathématique. In *Histoire de l'Académie Royale des Sciences de l'Institut de France*, Tome 7, pages xlvii–lv. 41, 66

[205] J.B.J. Fourier (1831). *Analyse des Équations Déterminées*. 356

[206] M. Frank, P. Wolfe (1956). An algorithm for quadratic programming. *Naval Research Logistics Quarterly*, 3, 95–110. [doi]. 208

[207] M. Fréchet (1911). Sur la notion de différentielle. *C. R. Acad. Sci. Paris*, 152, 845–847. [Gallica]. 635

[208] R. Frisch (1955, mai). The logarithmic potential method for convex programming with particular application to the dynamics of planning for national development. Memorandum, Institut d'Économie, Université d'Oslo, Oslo, Norvège. 413, 414

[209] A. Fuduli, J.Ch. Gilbert (2003). OPINL: a truncated Newton interior-point algorithm for nonlinear optimization. Note de travail. 563

[210] D. Gabay, B. Mercier (1976). A dual algorithm for the solution of nonlinear variational problems via finite-element approximations. *Computers and Mathematics with Applications*, 2, 17–40. 425

[211] E.M. Gafni, D.P. Bertsekas (1984). Two-metric projection methods for constrained optimization. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 22, 936–964. [doi]. 391
[212] F.R. Gantmacher (1959). *The Theory of Matrices*, Tome 1. Chelsea, New York. 616
[213] M.R. Garey, D.S. Johnson (1979). *Computers and Intractability: a Guide to the Theory of NP-Completeness*. W.H. Freeman, San Francisco. 223
[214] W. Gautschi (1997). *Numerical Analysis – An Introduction*. Birkhäuser, Boston. 238
[215] J. Gauvin (1977). A necessary and sufficient regularity condition to have bounded multipliers in nonconvex programming. *Mathematical Programming*, 12, 136–138. 187
[216] J. Gauvin (1992). *Théorie de la programmation mathématique non convexe*. Les Publications CRM, Montréal. 206
[217] J. Gauvin (1995). *Leçons de Programmation Mathématique*. Éditions de l'École Polytechnique de Montréal, Montréal. 19
[218] A.M. Geoffrion (1971). Duality in nonlinear programming: a simplified applications-oriented development. *SIAM Review*, 13(1), 1–37. [doi]. 435
[219] A.M. Geoffrion (1972). Generalized Benders decomposition. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 10(4), 237–260. [doi]. 472
[220] J.Ch. Gilbert (1992). Automatic differentiation and iterative processes. *Optimization Methods and Software*, 1, 13–21. [doi]. 255
[221] J.Ch. Gilbert (2008). Optimisation différentiable. In Editions T.I., éditeur, *Techniques de l'Ingénieur*. Document AF-1-252. 18
[222] J.Ch. Gilbert (2020). *Fragments d'Optimisation Différentiable – Théorie et Algorithmes*. Syllabus de cours à l'ENSTA, Paris. [internet]. 1
[223] J.Ch. Gilbert, C. Gonzaga, E. Karas (2005). Examples of ill-behaved central paths in convex optimization. *Mathematical Programming*, 103, 63–94. [doi]. 563
[224] J.Ch. Gilbert, X. Jonsson (2008). LIBOPT – An environment for testing solvers on heterogeneous collections of problems. Soumis à *ACM Transactions on Mathematical Software*. 255
[225] J.Ch. Gilbert, G. Le Vey, J. Masse (1991). La différentiation automatique de fonctions représentées par des programmes. Rapport de Recherche 1557, INRIA, BP 105, F-78153 Le Chesnay, France. [internet]. 244, 245, 249, 255
[226] J.Ch. Gilbert, C. Lemaréchal (1989). Some numerical experiments with variable-storage quasi-Newton algorithms. *Mathematical Programming*, 45, 407–435. [doi]. 361, 377
[227] J.Ch. Gilbert, J. Nocedal (1992). Global convergence properties of conjugate gradient methods for optimization. *SIAM Journal on Optimization*, 2, 21–42. [doi]. 321, 323
[228] J.Ch. Gilbert, J. Nocedal (1993). Automatic differentiation and the step computation in the limited memory BFGS method. *Applied Mathematics Letters*, 6(3), 47–50. [doi]. 380
[229] P.E. Gill, G.H. Golub, W. Murray, M.A. Saunders (1974). Methods for modifying matrix factorizations. *Mathematics of Computation*, 28, 505–535. 627
[230] P.E. Gill, W. Murray (1972). Quasi-Newton methods for unconstrained optimization. *Journal of the Institute of Mathematics and its Applications*, 9, 91–108. 375
[231] P.E. Gill, W. Murray (1977). Modification of matrix factorizations after a rank-one change. In D.A.H. Jacobs, éditeur, *The State of the Art in Numerical Analysis*. Academic Press, London. 627
[232] P.E. Gill, W. Murray, M.A. Saunders (2002). SNOPT: an SQP algorithm for large-scale constrained optimization. *SIAM Journal on Optimization*, 12, 979–1006. [doi]. 497, 499
[233] P.E. Gill, W. Murray, M.H. Wright (1981). *Practical Optimization*. Academic Press, New York. 18, 254, 627
[234] R. Glowinski, J.L. Lions, R. Tremolières (1976). *Analyse Numérique des Inéquations Variationnelles - Tome 1 : Théorie Générale, Premières Applications*. Dunod-Bordas, Paris. 93, 300, 301, 303, 430

[235] R. Glowinski, J.L. Lions, R. Tremolières (1981). *Numerical Analysis of Variational Inequalities*. North-Holland, Amsterdam, New York. 430

[236] R. Glowinski, A. Marocco (1975). Sur l'approximation, par éléments finis d'ordre un, et la résolution, par pénalisation dualité, d'une classe de problèmes de Dirichlet non linéaires. *Revue Française d'Automatique, Informatique et Recherche Opérationnelle*, R-9, 41–76. 425

[237] C.J. Goh, X.Q. Yang (2002). *Duality in Optimization and Variational Inequality*. Optimization Theory and Applications 2. Taylor and Francis. 471

[238] D. Goldfarb (1970). A family of variable-metric method derived by variational means. *Mathematics of Computation*, 24, 23–26. 366

[239] D. Goldfarb (1976). Factorized variable metric methods for unconstrained optimization. *Mathematics of Computation*, 30, 796–811. 366, 375

[240] D. Goldfarb, A. Idnani (1983). A numerically stable dual method for solving strictly convex quadratic programs. *Mathematical Programming*, 27, 1–33. 375

[241] D. Goldfarb, M.J. Todd (1989). Linear programming. In G.L. Nemhauser, A.H.G. Rinnooy Kan, M.J. Todd, éditeurs, *Handbooks in Operations Research and Management Science*, Tome 1: Optimization, chapitre 2, pages 73–170. Elsevier Science Publishers B.V., North-Holland. 526, 528

[242] A.J. Goldman, A.W. Tucker (1956). Polyhedral convex cones. In H.W. Kuhn, A.W. Tucker, éditeurs, *Linear Inequalities and Related Systems*, Annals of Mathematics Studies 38, pages 19–40. Princeton University Press, Princeton, NJ.

[243] A.A. Goldstein (1964). Convex programming in Hilbert space. *Bulletin of the American Mathematical Society*, 70, 709–710. 388, 396

[244] A.A. Goldstein (1965). On steepest descent. *SIAM Journal on Control*, 3, 147–151. 271

[245] T. Goldstein, B. O'Donoghue, S. Setzer, R. Baraniuk (2014). Fast alternating direction optimization methods. *SIAM Journal on Imaging Sciences*, 7(3), 1588–1623. [doi]. 426

[246] H.H. Goldstine (1977). *A History of Numerical Analysis From the 16th Through the 19th Century*. Studies in the History of Mathematics and Physical Sciences 2. Springer-Verlag, New York. 583

[247] E.G. Gol'shteĭn, N.V. Tret'jakov (1996). *Modified Lagrangians and Monotone Maps in Optimization*. Discrete Mathematics and Optimization. John Wiley & Sons, New York. 443, 472

[248] G.H. Golub, C.F. Van Loan (1996). *Matrix Computations* (troisième édition). The Johns Hopkins University Press, Baltimore, Maryland. 627

[249] J. Gondzio (1995). HOPDM (version 2.12) – a fast LP solver based on a primal-dual interior point method. *European Journal of Operations Research*, 85, 221–225. [doi]. 562

[250] C. Gonzaga (2000). Two facts on the convergence of the Cauchy algorithm. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 107, 591–600. [doi]. 286

[251] P. Gordan (1873). Über die Auflösung linearer Gleichungen mit reelen Coefficienten. Mathematische Annalen, 6, 23–28. 71

[252] N.I.M. Gould, D. Orban, Ph.L. Toint (2005). Numerical methods for large-scale nonlinear optimization. In *Acta Numerica 2005*, pages 299–361. Cambridge University Press. 18, 499

[253] J.V. Grabiner (1983). The changing concept of change: the derivative from Fermat to Weierstrass. *Mathematics Magazine*, 56, 195–206. 631

[254] B. Gracián (1647). *Oracle manuel et art de prudence*. Seuil. Recueil d'écrits de Baltasar Gracián y Morales (1601-1658), traduits de l'espagnol, introduits et annotés par Benito Pelegrín. 433

[255] H.G. Grassmann (1847). *Geometrische Analyse*. Leipzig. 596

[256] S. Gratton, D. Titley-Peloquin, Ph.L. Toint, J. Tshimanga Ilunga (2014). Differentiating the method of conjugate gradients. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 35(1), 110–126. [doi]. 329

[257] J. Gray (2002). Adrien-Marie Legendre (1752-1833). *European Mathematical Society Newsletter*, 45, 13. 583

[258] J.F. Grcar (2011). How ordinary elimination became Gaussian elimination. *Historia Mathematica*, 38, 163–218. 615

[259] A. Greenbaum (1989). Behavior of slightly perturbed Lanczos and conjugate-gradient recurrences. *Linear Algebra and its Applications*, 113, 7–63. 329

[260] A. Greenbaum (1994). The Lanczos and conjugate gradient algorithms in finite precision arithmetic. In J.D. Brown, M.T. Chu, D.C. Ellison, R.J. Plemmons, éditeurs, *Proceedings of the Cornelius Lanczos International Centenary Conference*, pages 49–60. SIAM, Philadelphia, PA, USA. 329

[261] A. Greenbaum (1997). *Iterative Methods for Solving Linear Systems*. SIAM, Philadelphia. 330

[262] A. Greenbaum (1997). Estimating the attainable accuracy of recursively computed residual methods. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 18, 535–551. 329

[263] A. Greenbaum, Z. Strakoš (1992). Predicting the behavior of finite precision Lanczos and conjugate gradient computations. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 13, 121–137. 329

[264] M. Grevisse (1986). *Le Bon Usage – Grammaire Française*. Duculot, Paris, Louvain-la-Neuve. Douzième édition refondue par A. Goosse. 9

[265] A. Griewank (1985). On solving nonlinear equations with simple singularities or nearly singular solutions. *SIAM Review*, 27, 537–563. 356

[266] A. Griewank (1989). On automatic differentiation. In M. Iri, K. Tanabe, éditeurs, *Mathematical Programming: Recent Developments and Applications*, pages 83–108. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht. 249

[267] A. Griewank (1992). Achieving logarithmic growth of temporal and spatial complexity in reverse automatic differentiation. *Optimization Methods and Software*, 1, 35–54. 249

[268] A. Griewank (2000). *Evaluating Derivatives – Principles and Techniques of Algorithmic Differentiation*. SIAM Publication. 240, 255

[269] A. Griewank (2003). A mathematical view of automatic differentiation. In *Acta Numerica 2003*, pages 321–398. Cambridge University Press. 255

[270] A. Griewank, G. Corliss, éditeurs (1991). *Automatic Differentiation of Algorithms: Theory, Implementation, and Application*, number 53 in Proceedings in Applied Mathematics. SIAM, Philadelphia. 255

[271] A. Griewank, A. Walther (2008). *Evaluating Derivatives – Principles and Techniques of Algorithmic Differentiation* (seconde édition). SIAM Publication. 240, 255

[272] L. Grippo, F. Lampariello, S. Lucidi (1986). A nonmonotone line search technique for Newton's method. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 23, 707–716. 286

[273] M. Guignard (1969). Generalized Kuhn-Tucker conditions for mathematical programming problems in a Banach space. *SIAM Journal on Control*, 7(2), 232–241. 206

[274] O. Güler (2010). *Foundations of Optimization*. Graduate Texts in Mathematics 258. Springer. [doi]. 71, 528, 529

[275] J. Guo, A.S. Lewis (2018). Nonsmooth variants of Powell's BFGS convergence theorem. Rapport de Recherche 2. 380

[276] M.H. Gutknecht (1997). Lanczos-type solvers for nonsymmetric linear systems of equations. In *Acta Numerica 1997*, pages 271–397. Cambridge University Press. 330

[277] W. Hackbusch (1994). *Iterative Solution of Large Sparse Systems of Equations*. Applied Mathematical Sciences 95. Springer-Verlag, New York. 306

[278] W.W. Hager (1993). Analysis and implementation of a dual algorithm for constrained optimization. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 79, 427–462. 424
[279] A. Halevy, P. Norvig, F. Pereira (2009). The unreasonable effectiveness of data. *IEEE Intelligent Systems*, 24(2), 8–12. [doi]. 425
[280] R. W. Hamming (1986). *Numerical Methods for Scientists and Engineers* (seconde édition). Dover Publications, Inc., New York, NY, USA. 254
[281] S.-H. Han, J.-S. Pang, N. Rangaraj (1992). Globally convergent Newton methods for nonsmooth equations. *Mathematics of Operations Research*, 17, 586–607. [doi]. 357
[282] S.-P. Han (1976). Superlinearly convergent variable metric algorithms for general nonlinear programming problems. *Mathematical Programming*, 11, 263–282. 499
[283] S.-P. Han (1977). A globally convergent method for nonlinear programming. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 22, 297–309. 499
[284] R.J. Hanson, C.L. Lawson (1969). Extensions and applications of the Householder algorithm for solving linear least squares problems. *Mathematics of Computation*, 23, 787–812. 583
[285] G.H. Hardy, J.E. Littlewood, G. Pólya (1952). *Inequalities*. Cambridge University Press, Cambridge, U.K. 611
[286] B. He, X. Yuan (2012). On the $O(1/n)$ convergence rate of the Douglas-Rachford alternating direction method. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 50(2), 700–709. [doi]. 426
[287] R. Helgason, J. Kennington (1995). Handbooks in Operations Research and Management Science 7: Netwok Models. North-Holland. 526
[288] J.M. Hendrickx, A. Olshevsky (2010). Matrix p-norms are NP-hard to approximate if $p \neq 1, 2, \infty$. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 31(5), 2802–2812. [doi]. 606
[289] M.R. Hestenes (1969). Multiplier and gradient methods. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 4, 303–320. 430
[290] M.R. Hestenes, E. Stiefel (1952). Methods of conjugate gradients for solving linear systems. *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, 49, 409–436. 329, 569
[291] N.J. Higham (2002). *Accuracy and Stability of Numerical Algorithms* (seconde édition). SIAM Publication, Philadelphia. 264, 305, 329, 357, 619, 627
[292] N.J. Higham (2008). Cholesky factorization. MIMS EPrint 2008.116, University of Manchester. 622
[293] J.-B. Hiriart-Urruty (1996). *L'Optimisation*. Que sais-je 3184. Presses Universitaires de France. 19, 186, 206
[294] J.-B. Hiriart-Urruty (2013). *Bases, outils et principes pour l'analyse variationnelle*. Mathématiques et Applications 70. Springer Verlag. 122, 138
[295] J.-B. Hiriart-Urruty, C. Lemaréchal (1993). *Convex Analysis and Minimization Algorithms*. Grundlehren der mathematischen Wissenschaften 305-306. Springer. 64, 100, 104, 129, 130, 136, 137, 287, 465, 471, 472
[296] J.-B. Hiriart-Urruty, A. Seeger (2010). A variational approach to copositive matrices. *SIAM Review*, 52, 593–629. 195
[297] A.J. Hoffman (1952). On approximate solutions of systems of linear inequalities. *Journal of Research of the National Bureau of Standard*, 49, 263–265. 528
[298] R.A. Horn, C. Jonhson (1985). *Matrix Analysis*. Cambridge University Press, Cambridge, U.K. 627
[299] A.S. Houselholder (1964). *The Theory of Matrices in Numerical Analysis*. Blaisdell, New York. 616
[300] S. Van Huffel, J. Vandewalle (1991). *The Total Least Squares Problem: Computational Aspects and Analysis*. Frontiers in Applied Mathematics 9. SIAM, Philadelphia, PA, USA. 583

[301] C. Humes, P.J.S. Silva, B.F. Svaiter (2004). Some inexact hybrid proximal augmented Lagrangian algorithms. *Numerical Algorithms*, 35, 175–184. [doi]. 424

[302] T. Huynh, C. Lassez, J.-L. Lassez (1992). Practical issues on the projection of polyhedral sets. *Annals of Mathematics and Artificial Intelligence*, 6, 295–316. 66

[303] Kh.D. Ikramov, N.V. Savel'eva (2000). Conditionally definite matrices. *Journal of Mathematical Sciences*, 98, 1–50. 195

[304] M. Iri (1984). Simultaneous computation of functions, partial derivatives and estimates of rounding errors, complexity and practicality. *Japan Journal of Applied Mathematics*, 1, 223–252. 245

[305] M. Iri, K. Kubota (1987). Methods of fast automatic differentiation and applications. Research Memorandum RMI 87-02, Department of Mathematical Engineering and Instrumentation Physics, Faculty of Engineering, University of Tokyo, Hongo 7-3-1, Bunkyo-ku, Tokyo, Japan. 245

[306] K. Ito, K. Kunisch (2008). *Lagrange Multiplier Approach to Variational Problems and Applications*. Advances in Design and Control. SIAM Publication, Philadelphia. [doi]. 19, 207

[307] A.F. Izmailov, A.S. Kurennoy, M.V. Solodov (2013). The Josephy-Newton method for semismooth generalized equations and semismooth SQP for optimization. *Set-Valued and Variational Analysis*, 21(1), 17–45. [doi]. 499

[308] A.F. Izmailov, M.V. Solodov (2014). *Newton-Type Methods for Optimization and Variational Problems*. Springer Series in Operations Research and Financial Engineering. Springer. [doi]. 357, 499

[309] J. Jahn (1985). *Scalarization in multi objective optimization*. Springer, Vienna. 140

[310] G. James, D. Witten, T. Hastie, R. Tibshirani (2013). *An Introduction to Statistical Learning*. Springer Texts in Statistics 103. Springer. [doi]. 565

[311] B. Jansen (1997). *Interior Point Techniques in Optimization – Complementarity, Sensitivity and Algorithms*. Applied Optimization 6. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht. 562

[312] J.L.W.V. Jensen (1905). Om Konvekse Funktioner og Uligheder mellem Middelværdier. *Nyt Tidsskr. Math.*, B 16, 49–68. 139

[313] J.L.W.V. Jensen (1906). Sur les fonctions convexes et les inégalités entre les valeurs moyennes. *Acta Mathematica*, 30, 175–193. 139

[314] H. Jiang, P.A. Forsyth (1995). Robust linear and nonlinear strategies for solution of the transonic Euler equations. *Comput. Fluids*, 24, 753–770. 354

[315] F. John (1948). Extremum problems with inequalities as subsidiary conditions. In K.O. Friedrichs, O.E. Neugebauer, J.J. Stokes, éditeurs, *Studies and Essays, Courant Anniversary Volume*, pages 186–204. Wiley Interscience, New York. 206

[316] C.N. Jones, E.C. Kerrigan, J.M. Maciejowski (2004). Equality set projection: A new algorithm for the projection of polytopes in halfspace representation. CUED Technical Report CUED/FINFENG/TR.463. 66

[317] W. Kahan (1966). Numerical linear algebra. *Canadian Mathematical Bulletin*, 9, 757–801. [doi]. 229

[318] L. Kantorovich (1939). The method of successive approximations for functional equations. *Acta Math.*, 71, 63–97. 356

[319] L. Kantorovich (1948). On Newton's method for functional equations. *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 59, 1237–1240. En russe. 356

[320] L. Kantorovich (1949). On Newton's method. *Trudy Mat. Inst. Steklov*, 28, 104–144. En russe. 356

[321] L.V. Kantorovich (1940). On an efficient method for solving some classes of extremum problems. *Doklady Akad. Nauk SSSR*, 28, 212–215. 206

[322] L.V. Kantorovich, G.P. Akilov (1982). *Functional Analysis* (seconde édition). Pergamon Press, London. 290, 356

[323] N. Karmarkar (1984). A new polynomial-time algorithm for linear programming. *Combinatorica*, 4, 373–395. 504
[324] W.E. Karush (1939). *Minima of Functions of Several Variables with Inequalities as Side Conditions*. Master's thesis, Department of Mathematics, University of Chicago, Chicago. 206
[325] C.T. Kelley (1995). *Iterative Methods for Linear and Nonlinear Equations*. SIAM Publication, Philadelphia. 19, 357
[326] C.T. Kelley (1999). *Iterative Methods for Optimization*. Frontiers in Applied Mathematics 18. SIAM Publication, Philadelphia. 19, 357
[327] C.T. Kelley (2003). *Solving Nonlinear Equations with Newton's Method*. SIAM Publication, Philadelphia. 357
[328] C.T. Kelley, D.E. Keyes (1998). Convergence analysis of pseudo-transient continuation. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 35, 508–523. 354
[329] D.E. Keyes (1995). Aerodynamic applications of Newton-Krylow-Schwarz solvers. In M. Deshpande, S. Desai, R. Narasimha, éditeurs, *Proc. 14th Internat. Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics*, pages 1–20. Springer. 354
[330] K.V. Kim, Yu.E. Nesterov, B.V. Cherkasskiĭ (1984). An estimate of the effort in computing the gradient. *Soviet Math. Dokl.*, 29, 384–387. 245
[331] D.A. Knoll, D.E. Keyes (2004). Jacobian-free Newton-Krylov methods: a survey of approaches and applications. *Journal of Computational Physics*, 193, 357–397. 357
[332] M. Kojima, S. Mizuno, A. Yoshise (1989). A primal-dual interior-point method for linear programming. In N. Megiddo, éditeur, *Progress in Mathematical Programming, Interior-point and Related Methods*, pages 29–47. Springer, New York. 562
[333] M. Kojima, S. Mizuno, A. Yoshise (1989). A polynomial-time algorithm for a class of linear complementarity problems. *Mathematical Programming*, 44, 1–26. 562
[334] M. Kojima, S. Shindo (1986). Extension of Newton and quasi-Newton methods to systems of PC^1 equations. *Journal of Operations Research Society of Japan*, 29, 352–375. [doi]. 357
[335] N. Kollerstrom (1992). Thomas Simpson and "Newton's method of approximation": an enduring myth. *Brit. J. Hist. Sci.*, 25, 347–354. 355
[336] H. Komiya (1988). Elementary proof for Sion's minimax theorem. *Kodai Mathematical Journal*, 11, 5–7. 471
[337] D. König (1936). *Theorie der Endlichen and Unendlichen Graphen*. Akademische Verlagsgegesellschaft, Leipzig. 68
[338] M.A. Krasnosel'skii, S.G. Krein (1952). An iteration process with minimal residues. *Mat. Sb.*, 31, 315–334. En russe. 286
[339] J. Kruskal (1969). Two convex counterexamples: a discontinuous envelope function and a nondifferentiable nearest-point mapping. *Proceedings of the American Mathematical Society*, 23, 697–703. 51
[340] M. Kubicek, M. Marek (1983). *Computational Methods in Bifurcation Theory and Dissipative Structures*. Springer Series in Comput. Phys. Springer-Verlag, New York. 355
[341] H.W. Kuhn (1976). Nonlinear programming: a historical view. In R.W. Cottle, C.E.Lemke, éditeurs, *Nonlinear Programming*, SIAM-AMS Proceedings IX, pages 1–26. American Mathematical Society, Providence, RI. 206
[342] H.W. Kuhn, A.W. Tucker (1951). Nonlinear programming. In J. Neyman, éditeur, *Proceedings of the second Berkeley Symposium on Mathematical Studies and Probability*, pages 481–492. University of California Press, Berkeley, California. 206
[343] J. Kyparisis (1985). On uniqueness of Kuhn-Tucker multipliers in nonlinear programming. *Mathematical Programming*, 32, 242–246. [doi]. 187
[344] J.-C. Lafaille, B. Heimermann (2003). *Prisonnier de l'Annapurna*. Guérin, Chamonix. xiv

[345] J.-L. Lagrange (1788). *Méchanique Analytique*, Tome 1. [internet]. 149, 206
[346] P. Lascaux, R. Théodor (1986). *Analyse Numérique Matricielle Appliquée à l'Art de l'Ingénieur*. Masson, Paris. 627
[347] J.B. Lasserre (1997). A Farkas lemma without a standard closure condition. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 35, 265–272. [doi]. 60
[348] J.B. Lasserre (2001). Global optimization with polynomials and the problem of moments. *SIAM Journal on Optimization*, 11, 796–817. [doi]. 20, 341
[349] J.B. Lasserre (2010). *Moments Positive Polynomials and Their Applications*. Imperial College Press Optimization Series 1. Imperial College Press. 24
[350] J.B. Lasserre (2015). *An Introduction to Polynomial and Semi-Algebraic Optimization*. Cambridge Texts in Applied Mathematics. Cambridge University Press. 24
[351] J.B. Lasserre, J.-B. Hiriart-Urruty (2002). Mathematical properties of optimization problems defined by positively homogeneous functions. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 112, 31–52. [doi]. 475
[352] C. Lassez, J.-L. Lassez (1992). *Symbolic and Numerical Computation for Artificial Intelligence*, chapitre 4, pages 103–119. Academic Press. 66
[353] J.-L. Lassez (1990). Query constraints. In *Proceedings ACM Conference Principles of Database Systems*, 4, pages 288–298. 66
[354] P.-J. Laurent (1972). *Approximation et Optimisation*. Hermann, Paris. 471
[355] F.-X. Le Dimet, I.M. Navon, D.N. Daescu (2001). Second order information in data assimilation. *Monthly Weather Review*. 255
[356] E.B. Lee, L. Markus (1967). *Foundations of Optimal Control Theory* (première édition). Wiley. 230
[357] A.M. Legendre (1787). Mémoire sur l'intégration de quelques équations aux différences partielles. *Mém. Acad. Sciences*, pages 309–351. 138
[358] Bruno Lemaitre (2015). *An Essay on Science and Narcissism*. À compte d'auteur [http://brunolemaitre.ch]. 333
[359] C. Lemaréchal. Lagrangian relaxation. In M. Jünger, D. Naddef, éditeurs, *Computational Combinatorial Optimization*, pages 115–160. Springer, Heidelberg. 472
[360] C. Lemaréchal (1981). A view of line-searches. In A. Auslender, W. Oettli, J. Stoer, éditeurs, *Optimization and Optimal Control*, Lecture Notes in Control and Information Science 30, pages 59–78. Springer, Heidelberg. 286
[361] K. Levenberg (1944). A method for the solution of certain nonlinear problems in least squares. *Quaterly of Applied Mathematics*, 2, 164–168. [doi]. 583
[362] E.S. Levitin (1994). *Perturbation Theory in Mathematical Programming and its Applications*. Wiley. 207
[363] E.S. Levitin, B.T. Polyak (1966). Constrained minimization problems. *USSR. Comput. Math. and Math. Phys.*, 6, 1–50. 388, 396
[364] A.S. Lewis, M.L. Overton (2013). Nonsmooth optimization via quasi-Newton methods. *Mathematical Programming*, 141, 135–163. 380
[365] D.H. Li, M. Fukushima (2001). A modified bfgs method and its global convergence in nonconvex minimization. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 129, 15–35. 380
[366] X. Li, D. Sun, K.-C. Toh (2018). On the efficient computation of a generalized Jacobian of the projector over the Birkhoff polytope. Rapport de recherche. [arXiv:1702.05934]. 473
[367] H. Lin, J. Mairal, Z. Harchaoui (2017). A generic quasi-Newton algorithm for faster gradient-based optimization. Rapport de recherche. [arXiv:1610.00960]. 380
[368] Y.Y. Lin, J.-S. Pang (1987). Iterative methods for large scale convex quadratic programs: a survey. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 25, 383–411. 472
[369] J.L. Lions (1968). *Contrôle Optimal de Systèmes Gouvernés par des Equations aux Dérivées Partielles*. Etudes Mathématiques. Dunod – Gauthier-Villars, Paris. 230, 235

[370] D.C. Liu, J. Nocedal (1989). On the limited memory BFGS method for large scale optimization. *Mathematical Programming*, 45, 503–520. 377

[371] S. Lucidi, M. Roma (1978). Nonmonotone conjugate gradient methods for optimization. In J. Henry, J.-P. Yvon, éditeurs, *System Modelling and Optimization*, Lecture Notes in Control and Information Sciences 170, pages 206–214. Springer, Berlin. 286

[372] Z.-Q. Luo, P. Tseng (1992). On the convergence of the coordinate descent method for convex differentiable minimization. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 72, 7–35. 303

[373] S. Mandelbrojt (1939). Sur les fonctions convexes. *C. R. Acad. Sci. Paris*, 209, 977–978. 138

[374] J.-M. Mandosio (2010). Présentation. In *Grammaire Générale et Raisonnée* d'Antoine Arnauld et Claude Lancelot, 1660. Éditions Allia. 3

[375] O.L. Mangasarian, S. Fromovitz (1967). The Fritz John necessary optimality conditions in the presence of equality and inequality constraints. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 17, 37–47. [doi]. 206

[376] O.L. Mangasarian, J. Ponstein (1965). Minmax and duality in nonlinear programming. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 11, 504–518. 435

[377] D.W. Marquardt (1963). An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters. *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics*, 11, 431–441. 583

[378] R.K. Martin (1999). *Large Scale Linear and Integer Optimization: a Unified Approach*. Kluwer Academic Publishers, Boston. 526

[379] B. Martinet (1970). Régularisation d'inéquations variationnelles par approximations successives. *Revue Française d'Informatique et Recherche Opérationnelle*, R-3, 154–179. 287

[380] W.F. Mascarenhas (2004). The BFGS method with exact line searches fails for non-convex objective functions. *Mathematical Programming*, 99, 49–61. 376, 380

[381] W.F. Mascarenhas (2008). Newton's iterates can converge to non-stationary points. *Mathematical Programming*, 112, 327–334. 356

[382] J. Mawhin (1992). *Analyse – Fondements, Techniques, Évolution*. De Boeck. 206, 600

[383] J. Mawhin, N. Rouche (1973). *Équations Différentielles Ordinaires, Tome 1: Théorie Générale*. Masson et C^{ie}, Paris. 308

[384] G.P. McCormick (1983). *Nonlinear Programming. Theory, Algorithms and Applications*. J. Wiley & Sons, New York. 18

[385] L. McLinden (1980). An analogue of Moreau's proximation theorem, with application to the nonlinear complementarity problem. *Pacific Journal of Mathematics*, 88, 101–161. 563

[386] S. Mehrotra (1992). On the implementation of a primal-dual interior point method. *SIAM Journal on Optimization*, 2(4), 575–601. [doi]. 562

[387] F. Meng, G. Zhao, M. Goh, R. De Souza (2008). Lagrangian-dual functions and Moreau-Yosida regularization. *SIAM Journal on Optimization*, 19, 39–61. 471

[388] H. Minkowski (1896). *Geometrie der Zahlen*. Teubner, Leipzig. 66

[389] M. Minoux (1983). *Programmation Mathématique. Théorie et Algorithmes*. Dunod, Paris. 526

[390] G.J. Minty (1964). On the monotonicity of the gradient of a convex function. *Pacific Journal of Mathematics*, 14, 243–247. 138

[391] S. Mizuno (1992). A new polynomial time method for a linear complementarity problem. *Mathematical Programming*, 56, 31–43. 546

[392] S. Mizuno, M.J. Todd, Y. Ye (1993). On adaptive-step primal-dual interior-point algorithms for linear programming. *Mathematics of Operations Research*, 18(4), 964–981. [doi]. 562

[393] Montaigne (1572-1592). *Les Essais*. Gallimard. Adaptation en français moderne par André Lanly, 2009. 3

[394] R. Monteiro, I. Adler (1989). Interior path following primal-dual algorithms. part I: linear programming. *Mathematical Programming*, 44, 27–41. 562

[395] R.D.C. Monteiro, B.F. Svaiter (2013). Iteration-complexity of block-decomposition algorithms and the alternating direction method of multipliers. *SIAM Journal on Optimization*, 23(1), 475–507. [doi]. 426

[396] E.H. Moore (1919). On the reciprocal of the general algebraic matrix. *Bulletin of the American Mathematical Society*, 26, 394–395. 608

[397] G.H. Moore (2008). The emergence of open sets, closed sets, and limit points in analysis and topology. *Historia Mathematica*, 2008, 220–241. 589

[398] B.S. Mordukhovich (2006). *Variational Analysis and Generalized Differentiation*. Grundlehren der mathematischen Wissenschaften 330-331. Springer. 207

[399] J.J. Moré (1978). The Levenberg-Marquardt algorithm: implementation and theory. In G.A. Watson, éditeur, *Numerical Analysis*, Lecture Notes in Mathematics 630, pages 105–116. Springer, Berlin. 583

[400] J.J. Moré (1983). Recent developments in algorithms and software for trust region methods. In A. Bachem, M. Grötschel, B. Korte, éditeurs, *Mathematical Programming, the State of the Art*, pages 258–287. Springer, Berlin. 229

[401] J.J. Moré (2015). Un hommage à Michael J. D. Powell sur le site http://michaeljd-powell.blogspot.ca. 369

[402] J.J. Moré, G. Toraldo (1989). Algorithms for bound constrained quadratic programming problems. *Numerische Mathematik*, 55, 377–400. [doi]. 391

[403] J.-J. Moreau (1965). Proximité et dualité dans un espace hilbertien. *Bulletin de la Société Mathématique de France*, 93, 273–299. [url]. 70, 138

[404] J.-J. Moreau (1967). Fonctionnelles convexes. *Séminaire Équations aux dérivees partielles, Collège de France*. 138

[405] D.D. Morrison (1960). Methods for nonlinear least squares problems and convergence proofs. *Proceedings of the Seminar on Tracking Programs and Orbit Determination, Jet Propulsion Laboratory, Pasadena, CA, USA*, pages 1–9. 583

[406] T.S. Motzkin (1936). Beiträge zur Theorie der linearen Ungleichungen. University Basel Dissertation, Jerusalem, Israel. 66

[407] T.S. Motzkin, H. Raiffa, G.L. Thompson, R.M. Thrall (1953). The double description method. In *Contributions to the Theory of Games, Vol. 2*, Annals of Mathematics Studies 28, pages 51–73. Princeton University Press, Princeton, NJ. 47

[408] W. Mulder, B.V. Leer (1985). Experiments with implicit upwind methods for the Euler equations. *Journal of Computational Physics*, 59, 232–246. 354

[409] K.G. Murty, S.N. Kabadi (1987). Some NP-complete problems in quadratic and nonlinear programming. *Mathematical Programming*, 39, 117–129. 24, 195

[410] U. Naumann (2008). Optimal jacobian accumulation is np-complete. *Mathematical Programming*, 112, 427–441. 255

[411] L. Nazareth (1994). *The Newton-Cauchy Framework – A unified approach to unconstrained nonlinear minimization*. Lecture Notes in Computer Science 769. Springer. 19

[412] E.D. Nering, A.W. Tucker, éditeurs (1993). Linear Programs and Related Problems. Academic Press. 526

[413] Y. Nesterov (2004). *Introductory Lectures on Convex Optimization – A Basic Course*. Kluwer Academic Publishers. 6, 19, 286

[414] Y.E. Nesterov (1983). A method for solving the convex programming problem with convergence rate $O(1/k^2)$. *Doklady Akad. Nauk SSSR*, 269(3), 543–547. 426

[415] Y.E. Nesterov, A.S. Nemirovskii (1994). *Interior-Point Polynomial Algorithms in Convex Programming*. SIAM Studies in Applied Mathematics 13. SIAM, Philadelphia, PA, USA. 563

[416] J. Nocedal (1980). Updating quasi-Newton matrices with limited storage. *Mathematics of Computation*, 35, 773–782. [doi]. 377, 380

[417] J. Nocedal, R.A. Waltz (2001). KNITRO 1.00 – User's manual. Department of Electrical Engineering and Computer Science, Northwestern University, Evanston, Il 60208, USA. 563

[418] J. Nocedal, S.J. Wright (2006). *Numerical Optimization* (seconde édition). Springer Series in Operations Research. Springer, New York. 19

[419] Y. Notay (1993). On the convergence rate of the conjugate gradients in presence of rounding errors. *Numerische Mathematik*, 65, 301–317. 329

[420] J.M. Ortega, W.C. Rheinboldt (1970). *Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables*. Academic Press, New York. Reprinted in 2000 by SIAM, Classics in Applied Mathematics 30, [doi]. 18

[421] M.R. Osborne (1976). Nonlinear least squares – the Levenberg algorithm revisited. *Journal of the American Mathematical Society*, 19 (Series B)(3), 343–357. [doi]. 576, 577, 583

[422] M. Padberg (1999). *Linear Optimization and Extensions* (seconde édition). Springer, Berlin. 526

[423] C.C. Paige, M.A. Saunders (1982). LSQR: an algorithm for sparse linear equations and sparse least squares. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 8, 43–71. 569

[424] D.P. Palomar, Y.C. Eldar, éditeurs (2010). *Convex Optimization in Signal Processing and Communications*. Cambridge University Press, Cambridge. 290

[425] J.-S. Pang (1990). Newton's method for B-differentiable equations. *Mathematics of Operations Research*, 15, 311–341. [doi]. 357

[426] J.-S. Pang (1991). A B-differentiable equation-based, globally and locally quadratically convergent algorithm for nonlinear programs, complementarity and variational inequality problems. *Mathematical Programming*, 51(1-3), 101–131. [doi]. 357

[427] C.H. Papadimitriou, K. Steiglitz (1982). *Combinatorial optimization: Algorithms and Complexity*. Prentice-Hall, New Jersey. 223

[428] V.Th. Paschos (2004). *Complexité et approximation polynomiale*. Lavoisier, Paris. 255

[429] V.Th. Paschos, éditeur (2005). *Optimisation combinatoire 1 – Concepts fondamentaux*. Lavoisier, Paris. 6, 255

[430] G. Peano (1887). *Applicazioni Geometriche del Calcolo Infinitesimale*. Fratelli Bocca Editori, Torino. [Cornell]. 206

[431] G. Peano (1908). *Formulario Mathematico,* Editio V. Fratelli Bocca Editori, Torino. 206

[432] R. Penrose (1955). A generalized inverse for matrices. *Proceedings Cambridge Philos. Soc.*, 51, 406–413. [doi]. 608

[433] R.R. Phelps (1993). *Convex Functions, Monotone Operators and Differentiability*. Lecture Notes in Mathematics 1364. Springer, Berlin. 87, 138

[434] E. Polak (1971). *Computational Methods in Optimization - A Unified Approach*, Mathematics in Science and Engineering, Tome 77. Academic Press, New York. 303

[435] E. Polak (1997). *Optimization – Algorithms and Consistent Approximations*. Applied Mathematical Sciences 124. Springer. 19

[436] B.T. Polyak (1987). *Introduction to Optimization*. Optimization Software, New York. 142

[437] B.T. Polyak (2001). History of mathematical programming in the USSR: analyzing the phenomenon. *Mathematical Programming*, 91, 401–416. 206

[438] M.J.D. Powell (1969). A method for nonlinear constraints in minimization problems. In R. Fletcher, éditeur, *Optimization*, pages 283–298. Academic Press, London. 430

[439] M.J.D. Powell (1970). A hybrid method for nonlinear equations. In P. Rabinowitz, éditeur, *Numerical Methods for Nonlinear Algebraic Equations*, pages 87–114. Gordon and Breach, New York. 356

[440] M.J.D. Powell (1973). On search directions for minimization algorithms. *Mathematical Programming*, 4, 193–201. [doi]. 303

[441] M.J.D. Powell (1976). Some global convergence properties of a variable metric algorithm for minimization without exact line searches. In R.W. Cottle, C.E. Lemke, éditeurs, *Nonlinear Programming*, SIAM-AMS Proceedings 9. American Mathematical Society, Providence, RI. 380

[442] M.J.D. Powell (1978). Algorithms for nonlinear constraints that use Lagrangian functions. *Mathematical Programming*, 14, 224–248. 499

[443] M.J.D. Powell (1984). Nonconvex minimization calculations and the conjugate gradient method. In *Lecture Notes in Mathematics 1066*, pages 122–141. Springer, Berlin. 380

[444] M.J.D. Powell (1987). Updating conjugate directions by the BFGS formula. *Mathematical Programming*, 38, 29–46. 375

[445] M.J.D. Powell (1991). A view of nonlinear optimization. In J.K. Lenstra, A.H.G. Rinnooy Kan, A. Schrijver, éditeurs, *History of Mathematical Programming, A Collection of Personal Reminiscences*, pages 119–125. CWI North-Holland, Amsterdam. 359, 373, 518

[446] M.J.D. Powell (2000). On the convergence of the DFP algorithm for unconstrained optimization when there are only two variables. *Mathematical Programming*, 87, 281–301. 380

[447] M.J.D. Powell (2003). An interview with M. J. D. Powell. *Bulletin of the International Center for Mathematics*, 14. Interview by Luís Nunes Vicente, University of Coimbra. 414, 531

[448] L. Pronzato, H.P. Wynn, A.A. Zhigljavsky (2001). Renormalised steepest descent in Hilbert space converges to a two-point attractor. *Acta Applicandae Mathematicae*, 67, 1–18. 286

[449] L. Pronzato, H.P. Wynn, A.A. Zhigljavsky (2004). Asymptotic behaviour of a family of gradient algorithms in $\mathbb{R}^d$ and Hilbert spaces. Manuscript. 286

[450] B.N. Pshenichnyj (1994). *The Linearization Method for Constrained Optimization*. Computational Mathematics 22. Springer. 499

[451] L. Qi, X. Chen (1997). A preconditioning proximal Newton method for nondifferentiable convex optimization. *Mathematical Programming*, 76, 411–429. 287, 296

[452] L. Qi, J. Sun (1993). A nonsmooth version of Newton's method. *Mathematical Programming*, 58, 353–367. [doi]. 357

[453] J. Raphson (1690). *Analysis aequationum universalis seu ad aequationes algebraicas resolvendas methodus generalis, et expedita, ex nova infinitarum serierum doctrina deducta ac demonstrata*. London. 355

[454] J. Rawls (1987). *Théorie de la Justice*. Collection Points 354. Seuil. Traduction française de Catherine Audard da la version remaniée en 1975 de *A Theory of Justice*, The Belknap Press of Harvard University Press, 1971. 436

[455] B. Recht, M. Fazel, P. Parrilo (2010). Guaranteed minimum-rank solutions of linear matrix equations via nuclear norm minimization. *SIAM Review*, 53, 471–501. [doi]. 476

[456] S. Reich (1977). On infinite products of resolvents. *Rend. Classe Sci. Fis. Mat. e Nat. Accad. Naz. Lincei Ser. VIII*, LXIII, Fasc. 5. 425

[457] J. Renegar (2001). *A Mathematical View of Interior-Point Methods in Convex Optimization*. MPS-SIAM Series on Optimization 3. SIAM. 474, 563

[458] S.M. Robinson (1976). Stability theory for systems of inequalities, part II: differentiable nonlinear systems. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 13, 497–513. [doi]. 173, 206

[459] S.M. Robinson (1982). Generalized equations and their solutions, Part II: Applications to nonlinear programming. *Mathematical Programming Study*, 19, 200–221. 211, 485

[460] R.T. Rockafellar (1969). Duality in nonlinear programming. Mathematics of the Decision Sciences, Part I, pages 401–422. American Mathematical Society, Providence. 435

[461] R.T. Rockafellar (1969). Convex functions and duality in optimization problems and dynamics. Lecture Notes in Operations Research and Mathematical Economics 11, pages 117–141. Springer. 471

[462] R.T. Rockafellar (1970). *Convex Analysis*. Princeton Mathematics Ser. 28. Princeton University Press, Princeton, New Jersey. 31, 73, 104, 137, 471

[463] R.T. Rockafellar (1971). New applications of duality in convex programming. In *Proceedings of the 4th Conference of Probability, Brasov, Romania*, pages 73–81. (version écrite d'un exposé donné à différentes conférences, en particulier au "7th International Symposium on Mathematical Programming", La Haye, 1970). 430, 471

[464] R.T. Rockafellar (1973). A dual approach to solving nonlinear programming problems by unconstrained optimization. *Mathematical Programming*, 5, 354–373. [doi]. 462, 469, 471

[465] R.T. Rockafellar (1973). The multiplier method of Hestenes and Powell applied to convex programming. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 12, 555–562. [doi]. 418, 430, 472

[466] R.T. Rockafellar (1974). Augmented Lagrange multiplier functions and duality in nonconvex programming. *SIAM Journal on Control*, 12, 268–285. 430

[467] R.T. Rockafellar (1974). *Conjugate Duality and Optimization*. Regional Conference Series in Applied Mathematics 16. SIAM, Philadelphia, PA, USA. 471

[468] R.T. Rockafellar (1976). Monotone operators and the proximal point algorithm. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 14, 877–898. [doi]. 142, 147, 287

[469] R.T. Rockafellar (1976). Augmented Lagrangians and applications of the proximal point algorithm in convex programming. *Mathematics of Operations Research*, 1, 97–116. 147, 287, 296, 430

[470] R.T. Rockafellar (1981). Proximal subgradients, marginal values, and augmented Lagrangians in nonconvex optimization. *Mathematics of Operations Research*, 6, 424–436. 207

[471] R.T. Rockafellar (1993). Lagrange multipliers and optimality. *SIAM Review*, 35, 183–238. 23, 153, 206

[472] R.T. Rockafellar, R. Wets (1991). Scenarios and policy aggregation in optimization under uncertainty. *Mathematics of Operations Research*, 16, 119–147. 472

[473] R.T. Rockafellar, R. Wets (1998). *Variational Analysis*. Grundlehren der mathematischen Wissenschaften 317. Springer. 433

[474] C. Roos, T. Terlaky, J.-Ph. Vial (1997). *Theory and Algorithms for Linear Optimization – An Interior Point Approach*. John Wiley & Sons, Chichester. 562

[475] Y. Saad (2003). *Iterative Methods for Sparse Linear Systems* (seconde édition). SIAM Publication, Philadelphia. 330

[476] Y. Saad, M.H. Schultz (1986). GMRES: a generalized minimal residual algorithm for solving non symmetric linear systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 7, 856–869. 324, 330

[477] Y. Saad, H.A. van der Vorst (2000). Iterative solution of linear systems in the 20th century. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 123, 1–33. 330

[478] R. Saigal (1995). *Linear Programming – A Modern Integrated Analysis*. Kluwer Academic Publisher, Boston. 526, 562

[479] J.W. Sawyer (1984). First partial differentiation by computer with an application to categorial data analysis. *The American Statistician*, 38, 300–308. 245

[480] Cplex. [internet]. 562

[481] Mosek. [internet]. 562

[482] SeDuMi. [internet]. 562

[483] D. Schott (1995). Basic properties of Fejer monotone sequences. *Rostocker Mathematisches Kolloquium*, 49, 57–74. 256

[484] A. Schrijver (1986). *Theory of Linear and Integrated Programming*. John Wiley & Sons. 526
[485] L. Schwartz (1991). *Analyse I – Théorie des Ensembles et Topologie*. Hermann, Paris. 600
[486] L. Schwartz (1992). *Analyse II – Calcul Différentiel et Équations Différentielles*. Hermann, Paris. 631, 648
[487] D.F. Shanno (1970). Conditioning of quasi-Newton methods for function minimization. *Mathematics of Computation*, 24, 647–656. 366
[488] A. Shapiro (1990). On concepts of directional differentiability. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 66, 477–487. [doi]. 632
[489] A. Shapiro (1994). Directionally nondifferentiable metric projection. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 1, 203–204. 51
[490] D. Siegel (1993). Updating conjugate direction matrices using members of Broyden's family. *Mathematical Programming*, 60, 167–185. 375
[491] P.J.S. Silva, J. Eckstein (2006). Double-regularization proximal methods, with complementarity applications. *Computational Optimization and Applications*, 33, 115–156. 430
[492] T. Simpson (1737). *A New Treatise of Fluxions*. 356
[493] T. Simpson (1740). Essays on several curious and useful subjects in speculative and mix'd mathematiks, illustrated by a variety of examples. *London*. 356
[494] M. Sion (1958). On general minimax theorems. *Pacific Journal of Mathematics*, 8, 171–176. 471
[495] M. Slater (1950). Lagrange multipliers revisited: a contribution to non-linear programming. Cowles Commission Discussion Paper, Math. 403. 206
[496] M.V. Solodov, B.F. Svaiter (1999). A hybrid approximate extragradient-proximal point algorithm using the enlargement of a maximal monotone operator. *Set-Valued Analysis*, 7, 323–345. [doi]. 424
[497] M.V. Solodov, B.F. Svaiter (1999). A hybrid projection-proximal point algorithm. *Journal of Convex Analysis*, 6, 59–70. [journal]. 424
[498] M.V. Solodov, B.F. Svaiter (2000). An inexact hybrid generalized proximal point algorithm and some new results on the theory of Bregman functions. *Mathematics of Operations Research*, 25, 214–230. [doi]. 424
[499] G. Sonnevend, J. Stoer, G. Zhao (1989). On the complexity of following the central path of linear programs by linear extrapolation. *Mathematics of Operations Research*, 63, 19–31. 562
[500] G. Sonnevend, J. Stoer, G. Zhao (1991). On the complexity of following the central path of linear programs by linear extrapolation II. *Mathematical Programming*, 52, 527–553. 562
[501] L. Sorber, M. Van Barel, L. De Lathauwer (2012). Unconstrained optimization of real functions in complex variables. *SIAM Journal on Optimization*, 22(3), 879–898. 380
[502] D.C. Sorensen (1982). Collinear scaling and sequential estimation in sparse optimization algorithms. *Mathematical Programming*, 18, 135–159. 380
[503] B. Speelpenning (1980). *Compiling fast partial derivatives of functions given by algorithms*. PhD thesis, Department of Computer Science, University of Illinois at Urbana-Champaign, Urbana, IL 61801. 245
[504] J.E. Spingarn (1987). A projection method for least-squares solutions to overdetermined systems of linear inequalities. *Linear Algebra and its Applications*, 86, 211–236. [doi]. 425
[505] S. Sra, S. Nowozin, S.J. Wright, éditeurs (2011). *Optimization for Machine Learning*. MIT Press, Cambridge. 290
[506] E. Stiefel (1952). Ausleichung ohne aufstellung der gausschen normalgleichungen. *Wiss. Z. Technische Hochschule Dresden*, 2, 441–442. 569

[507] J. Stoer (1963). Duality in nonllinear programming and the minimax theorem. *Numerische Mathematik*, 5, 371–379. 435
[508] V. Strassen (1969). Gaussian elimination is not optimal. *Numerische Mathematik*, 13, 354–356. 329
[509] B. Stroustrup (1994). *The Design and Evolution of C++*. Addison-Wesley. iii
[510] J.F. Sturm (1999). Using SeDuMi 1.02, a Matlab toolbox for optimization over symmetric cones. *Optimization Methods and Software*, 11, 625–653. 562
[511] M. Teboulle (1992). Entropic proximal mappings with applications to nonlinear programming. *Mathematics of Operations Research*, 17, 670–681. 138, 430
[512] C.M. Teobald (1975). An inequality for the trace of the product of two symmetric matrices. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 77(2), 265–266. 627
[513] T. Terlaky (1985). A convergent criss-cross method. *Math. Operationsforsch. und Statist., ser. Optimization*, 16, 683–690. 525
[514] T. Terlaky (1987). A finite criss-cross method for oriented matroids. *Journal of Combinatorial Theory*, 42, 319–327. 525
[515] T. Terlaky, éditeur (1996). *Interior Point Methods of Mathematical Programming*. Kluwer Academic Press, Dordrecht. [doi]. 562
[516] A.N. Tikhonov (1963). Solution of ill-posed problems and the regularization method. *Soviet Mathematics Doklady*, 4, 1035–1038. 583
[517] F. Tisseur (2001). Newton's method in floating point arithmetic and iterative refinement of generalized eigenvalue problems. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 22, 1038–1057. 357
[518] H.R. Tiwary (2008). On computing the shadows and slices of polytopes. Rapport de recherche. [arXiv:0804.4150v2] (2012 version). 66
[519] Ph.L. Toint (1977). On sparse and symmetric matrix updating subject to a linear equation. *Mathematics of Computation*, 31, 954–961. 380
[520] J.F. Toland (1978). Duality in nonconvex optimization. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 66, 399–415. [doi]. 471
[521] L.N. Trefethen, D. Bau (1997). *Numerical Linear Algebra*. SIAM Publication, Philadelphia. 627
[522] K. Ueda, N. Yamashita (2010). On a global complexity bound of the Levenberg-Marquardt method. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 147(3), 443–453. [doi]. 580, 583
[523] K. Ueda, N. Yamashita (2012). Global complexity bound analysis of the Levenberg-Marquardt method for nonsmooth equations and its application to the nonlinear complementarity problem. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 152, 450–467. [doi]. 578, 583
[524] M. Ulbrich (2011). *Semismooth Newton Methods for Variational Inequalities and Constrained Optimization Problems in Function Spaces*. MPS-SIAM Series on Optimization 11. SIAM Publications, Philadelphia, PA, USA. [doi]. 357
[525] A. van der Sluis (1969). Condition numbers and equilibration of matrices. *Numerische Mathematik*, 15, 14–23. 319
[526] H.A. van der Vorst (1990). The convergence behaviour of preconditioned CG and CG-S in the presence of rounding errors. In O. Axelsson, L.Y. Kolotilina, éditeurs, *Preconditioned Conjugate Gradient Methods*, Lecture Notes in Mathematics 1457, pages 126–136. Springer, Berlin. 329
[527] H.A. van der Vorst (2000). Krylov subspace iteration. *Computing in Science & Engineering*, 2, 32–37. [doi]. 306, 330
[528] H.A. van der Vorst (2003). *Iterative Krylov Methods for Large Linear Systems*. Cambridge monographs on applied and computational mathematics 13. Cambridge University Press, Oxford. 330

[529] R.J. Vanderbei (1997). *Linear Programming: Foundations and Extensions*. Kluwer Academic Publishers, Boston. 526, 562
[530] R.S. Varga (1962). *Matrix Iterative Analysis*. Prentice-Hall, Upper Saddle River, NJ, USA. 306
[531] S.A. Vavasis (1991). *Nonlinear Optimization – Complexity Issues*. Oxford University Press, New York. 223, 224
[532] Vax Unix Macsyma: Reference manual, version 11 (1985). Symbolics. 240
[533] V. Venkatakrishnan (1989). Newton solution of inviscid and viscous problems. *AIAA J.*, 27, 885–891. 354
[534] J. Ville (1938). Sur la théorie générale des jeux où intervient l'habileté des joueurs. In *Traité du Calcul des Probabilités et de ses Applications,* E. Borel, Tome IV, Fascicule II*, Applications aux jeux de hasard,* J. Ville (ed.), pages 105–113. Gauthier-Villars, Paris. 72
[535] P.M.B. Vitanyi (2009). Turing machine. Scholarpedia, 4(3):6240. 224
[536] V.V. Voevodin (1983). The problem of a non-selfadjoint generalization of the conjugate gradient method has been closed. *USSR Computational Math. and Math. Phys.*, 23, 143–144. 324
[537] J. von Neumann (1928). Zur Theorie der Gesellshaftsphiele. *Mathematische Annalen*, 100, 295–320. 471, 528
[538] J. von Neumann (1937). Some matrix inequalities and metrization of matrix-space. *Tomsk University Review*, 1, 286–300. *Collected Works*, Pergamon, Oxford, 1962, Volume IV, 205-218. 627
[539] M. Walk (1989). *Theory of Duality in Mathematical Programming*. Springer, Wien. 471
[540] Z. Wang (1987). A conformal elimination-free algorithm for oriented matroid programming. *Chin. Ann. Math.*, 8, B1. 525
[541] L.T. Watson (1990). Globally convergent homotopy algorithms for nonlinear systems of equations. *Nonlinear Dynamics*, 1, 143–191. 355
[542] D.T. Whiteside, éditeur (1967-1976). *The Mathematical Papers of Isaac Newton, Volumes I-VII*. Cambridge University Press, Cambridge. 380
[543] A.C. Williams (1970). Boundedness relations for linear constraint sets. *Linear Algebra and its Applications*, 3, 129–141.
[544] R.B. Wilson (1963). *A simplicial algorithm for concave programming*. Thèse de doctorat, Graduate School of Business Administration, Harvard University, Cambridge, MA, USA. 499
[545] P. Wolfe (1961). A duality theorem for non-linear programming. *Quaterly of Applied Mathematics*, 19, 239–244. [doi]. 435
[546] P. Wolfe (1969). Convergence conditions for ascent methods. *SIAM Review*, 11, 226–235. [doi]. 286
[547] P. Wolfe (1971). Convergence conditions for ascent methods II: some corrections. *SIAM Review*, 13, 185–188. [doi]. 286
[548] P. Wolfe (1972). On the convergence of gradient methods under constraint. *IBM Journal of Research and Development*, 16, 407–411. 385
[549] H. Wolkowicz, R. Saigal, L. Vandenberghe, éditeurs (2000). *Handbook of Semidefinite Programming – Theory, Algorithms, and Applications*, International Series in Operations Research & Management Science, Tome 27. Kluwer Academic Publishers. 563
[550] D.H. Wolpert, W.G. Macready (1997). No free lunch theorems for optimization. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 1, 67–82. 6
[551] S.J. Wright (1993). Identifiable surfaces in constrained optimization. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 31, 1063–1079. 391
[552] S.J. Wright (1997). *Primal-Dual Interior-Point Methods*. SIAM Publication, Philadelphia. 556, 562

[553] S.J. Wright (1999). Modified Cholesky factorizations in interior-point algorithms for linear programming. *SIAM Journal on Optimization*, 9, 1159–1191. 562

[554] T. Yamamoto (2000). Historical developments in convergence analysis for Newton's and Newton-like methods. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 124, 1–23. 356

[555] Y. Ye (1997). *Interior Point Algorithms – Theory and Analysis*. Wiley-Interscience Series in Discrete Mathematics and Optimization. Wiley. 536, 562

[556] M. Yourcenar (1968). *L'œuvre au noir*. Gallimard. 433

[557] R. Yousefpour (2015). Combination of steepest descent and BFGS methods for nonconvex nonsmooth optimization. *Numerical Algorithms*. [doi]. 380

[558] T.J. Ypma (1983). Finding a multiple zero by transformations and Newton-like methods. *SIAM Review*, 25, 365–378. 356

[559] T.J. Ypma (1995). Historical development of the Newton-Raphson method. *SIAM Review*, 37, 531–551. 355, 356, 380

[560] A.J. Zaslavski (2010). *Optimization on Metric and Normed Spaces*. Optimization and its Applications 44. Springer, New York. 18, 431

[561] X. Zhan (2002). *Matrix Inequalities*. Springer. 627

[562] Y. Zhang (1998). Solving large-scale linear programs with interior-point methods under the Matlab environment. *Optimization Methods and Software*, 10, 1–31. 562

[563] Ruizue Zhao, Jinyan Fan (2016). Global complexity bound of the levenberg-marquardt method. *Optimization Methods and Software*, 31(4), 805–814. [doi]. 583

[564] G. Zoutendijk (1970). Nonlinear programming, computational methods. In J. Abadie, éditeur, *Integer and Nonlinear Programming*, pages 37–86. North-Holland, Amsterdam. 286

[565] J. Zowe, S. Kurcyusz (1979). Regularity and stability for the mathematical programming problem in Banach spaces. *Applied Mathematics and Optimization*, 5(1), 49–62. 206

Index