

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

**MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

MEMOIRE

Présenté

AU DEPARTEMENT DE MATHEMATIQUE
FACULTE DES SCIENCES
UNIVERSITE MOHAMED CHERIF MESSAADIA SOUK-AHRAS

Pour l'obtention du diplôme

MAGISTER EN MATHEMATIQUE
Option : Mathématique du développement

Par

M. BOUAZIZ Khelifa

***ETUDE DE LA CONVERGENCE D'UNE COMBINAISON DE FAMILLES
DU GRADIENT CONJUGUE***

**DEHICI Abdelkader
LASKRI Yamina
REBBANI Faouzia
BOURAS Cherif**

**professeur, Université MCM Souk-Ahras,
Professeur, Université BM Annaba,
Professeur, Université BM Annaba,
Maître de conférence classe A, Université BM Annaba,**

**Président
Rapporteur
Examineur
Examineur**

ANNEE UNIVERSITAIRE 2012 /2013

Table des matières

Résumé	iii
Abstract	iv
Remerciements	v
Introduction	vi
1 Préliminaires : Optimisation sans contraintes	1
1.1 Notations et définitions	1
1.2 Convergence des algorithmes	3
1.3 Dérivée directionnelle	4
1.4 Direction de descente	4
1.5 Conditions d'optimalité	6
1.5.1 Conditions nécessaires d'optimalité	7
1.5.2 Conditions suffisantes d'optimalité	8
2 Recherches linéaires exactes et inexactes	10
2.1 Recherche linéaire	10
2.1.1 Introduction	10
2.1.2 Objectifs à atteindre	11
2.1.3 But de la recherche linéaire	12
2.1.4 Intervalle de sécurité	12
2.1.5 Algorithme de base	13
2.2 Recherches linéaires exactes	13
2.3 Recherches linéaires inexactes	15
2.3.1 Caractérisation de l'intervalle de sécurité	16
2.4 Convergence des méthodes à directions de descente	26

2.4.1	Condition de Zoutendijk	26
3	Méthodes itératives d'optimisation sans contraintes	28
3.1	Principe des méthodes du gradient	28
3.2	Le principe général d'une méthode à directions conjuguées	30
3.3	La convergence de quelques méthodes du gradient conjugué non linéaire	37
3.3.1	Convergence de la méthode de Fletcher-Reeves	38
3.3.2	Convergence de la méthode de PRP	41
3.3.3	Convergence de la méthode de la descente conjuguée	43
3.3.4	Convergence de la méthode de Dai-Yuan	44
3.4	Principe de la Méthode de Newton	46
3.5	Méthode de quasi Newton	48
3.5.1	Méthode de correction de rang un	49
3.5.2	Méthode de Davidon Fletcher Powell (DFP) . .	50
3.5.3	Méthode de Broyden, Fletcher, Goldfarb et Shanno (BFGS)	52
3.6	La convergence d'une famille de trois paramètres des méthodes du gradient conjugué	54
3.6.1	Critère de relancement de Powell et propriété de descente	59
4	Une famille de deux paramètres du gradient conjugué non linéaire	68
4.1	Introduction	68
4.2	Propriétés de convergence	70
4.3	Convergence globale de la famille de deux paramètres du gradient conjugué non linéaire	76
4.4	Expériences numériques et discussions	79
4.5	Conclusion	84

Résumé

Dans ce mémoire, nous présentons la convergence globale d'une famille de deux paramètres des méthodes du gradient conjugué (cas particulier d'une famille de trois paramètres), dans lesquelles la procédure de recherche linéaire de Wolfe forte est remplacée par une formule fixe de longueur de pas. En plus des résultats de convergence, nous présentons les résultats numériques pour les différentes méthodes du gradient conjugué non linéaire.

Mots clés :

Gradient conjugué. Algorithme. Convergence globale. Recherche linéaire inexacte. Règle d'Armijo. Règle de Wolfe (forte et faible). Méthode de Hestenes-Stiefel. Méthode de Fletcher-Reeves. Méthode de Polak-Ribière-Polyak. Méthode de la descente conjuguée. Méthode de Liu et Storey. Méthode de Dai et Yuan. Méthode de BFGS.

Abstract

We study the global convergence of a two-parameter family of conjugate gradient methods in which the line search procedure is replaced by a fixed formula of stepsize. This character is of significance if the line search is expensive in a particular application. In addition to the convergence results, we present computational results for various conjugate gradient methods without line search.

Key words :

Conjugate gradient. Algorithm. Global convergence. Inexact line search. Armijo line search. Strong Wolfe line search. Weak Wolfe line search. Hestenes-Stiefel Method. Fletcher-Reeves Method. Polak-Ribière-Polyak Method. Conjugate descent Method. Dai-Yuan Method. Liu - Storey Method. BFGS Method.

Remerciements

*Je tiens à adresser mes remerciements les plus chaleureux et ma profonde gratitude à mon encadreur madame **LASKRI Yamina**, professeur à l'Université Badji Mokhtar Annaba, pour m'avoir proposé le sujet de ce mémoire. C'est grâce à sa grande disponibilité, ses conseils, ses orientations, et ses encouragements que j'ai pu mener à bien ce travail.*

*Mes remerciements vont également à monsieur **DEHICI Abdelkader**, professeur à l'Université Mohamed Cherif Messaadia Souk-Ahras, pour avoir bien voulu me faire l'honneur d'accepter de présider le jury.*

*De même je remercie madame **REBBANI Faouzia**, professeur à l'Université Badji Mokhtar Annaba, et monsieur **BOURAS Cherif**, maître de conférence classe A, à l'Université Badji Mokhtar Annaba, pour l'honneur qu'ils m'ont fait de bien vouloir accepter de faire partie du jury.*

Je remercie également tout ceux qui ont contribué de près ou de loin à l'élaboration de ce mémoire, en particulier, ma femme pour ses encouragements.

*Enfin, Merci à toute ma famille, en particulier, ma **mère**, mon **père**, mes enfants **Douaa**, **Ghaith**, **Taha**, ma soeur et mes frères, et à tous mes amis et tous mes collègues sans exception.*

Introduction

Dans la vie courante nous sommes fréquemment confrontés à des problèmes "d'optimisation" plus ou moins complexes. Cela peut commencer au moment où l'on tente de ranger son bureau, de placer son mobilier et aller jusqu'à un processus industriel par exemple pour la planification des différentes tâches. Ces problèmes peuvent être exprimés sous la forme générale d'un "problème d'optimisation".

L'optimisation peut être définie comme la science qui détermine la meilleure solution à certains problèmes mathématiquement définie, qui sont souvent des modèles de physique réel. C'est une technique qui permet de "quantifier" les compromis entre des critères parfois non commensurables.

L'optimisation recouvre l'étude des critères d'optimalité pour les différents problèmes, la détermination des méthodes algorithmiques pour résoudre ces problèmes, l'étude de la structure de telles méthodes et l'expérimentation de ces méthodes avec des problèmes de la vie courante.

D'un point de vue mathématique, l'optimisation consiste à rechercher le minimum ou le maximum d'une fonction avec ou sans contraintes.

L'optimisation puise ses racines du 18^{ième} siècle avec les travaux de :

- Taylor, Newton, Lagrange, qui ont élaboré les bases du développement limité.

- Cauchy (1847) fut le premier à mettre en œuvre une méthode d'optimisation, méthode du pas de descente, pour la résolution de problèmes sans contrainte.

Il faut attendre le milieu du vingtième siècle, avec l'émergence des calculateurs et surtout la fin de la seconde guerre mondiale pour voir apparaître des avancées spectaculaires en termes de techniques d'optimisation. essentiellement en Grande Bretagne.

De nombreuses contributions apparaissent ensuite dans les années soixante. G. Zoutendijk (1960), C. W. Carroll (1961), P. Wolfe (1961), R. Fletcher et

M. J. D. Powell (1963), C. Reeves (1964), A. A. Goldstein (1965) et A. V. Fiacco et G. P. McCormick (1968) pour la programmation non linéaire ainsi que E. Polak et G. Ribière (1969), B.T. Polyak (1969) et J.F. Price (1969).

On s'intéresse dans ce mémoire au problème (P) suivant :

$$(P) \quad \left\{ \begin{array}{l} \min \\ \mathbb{R}^n \end{array} f(x) \right\},$$

où $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$.

Beaucoup de problèmes peuvent se formuler de cette manière. D'autre part, dans les problèmes où les variables x_1, \dots, x_n sont astreintes à vérifier des conditions supplémentaires (du type : $g_i(x_i) \leq 0, i = 1, \dots, m$) on peut dans certaines conditions se ramener à des problèmes d'optimisation sans contraintes.

Parmi les plus anciennes méthodes utilisées pour résoudre les problèmes du type (P), on peut citer la méthode du Gradient conjugué. Cette méthode est surtout utilisée pour les problèmes de grande taille.

Cette méthode a été découverte en 1952 par Hestenes et Steifel, pour la minimisation de fonctions quadratiques strictement convexes.

Plusieurs mathématiciens ont étendu cette méthode pour le cas non linéaire. Ceci a été réalisé pour la première fois, en 1964 par Fletcher et Reeves puis en 1969 par Polak, Ribière et Ployak. Une autre variante a été étudiée en 1987 par Fletcher. Une nouvelle variante a été proposée en 1991 par Liu et Storey. Enfin une dernière variante a été étudiée en 1999 par Dai et Yuan.

Toutes ces méthodes génèrent une suite $\{x_k\}_{k \in \mathbb{N}}$ de la façon suivante :

$$x_{k+1} = x_k + \lambda_k d_k. \tag{0.1}$$

Le pas $\lambda_k \in \mathbb{R}$ est déterminé par une optimisation unidimensionnelle ou recherche linéaire exacte ou inexacte.

Les directions d_k sont calculées de façon récurrente par les formules suivantes :

$$d_k = \begin{cases} -g_1 & \text{si } k = 1 \\ -g_k + \beta_k d_{k-1} & \text{si } k \geq 2 \end{cases} \tag{0.2}$$

$g_k = \nabla f(x_k)$ et $\beta_k \in \mathbb{R}$.

Les différentes valeurs attribuées à β_k définissent les différentes formes du gradient conjugué.

Si on note $y_{k-1} = g_k - g_{k-1}$, on obtient les variantes suivantes :

$$\beta_k^{HS} = \frac{g_k^T y_{k-1}}{d_{k-1}^T y_{k-1}}, \text{ gradient conjugué variante Hestenes-Stiefel.} \quad (0.3)$$

$$\beta_k^{FR} = \frac{\|g_k\|^2}{\|g_{k-1}\|^2}, \text{ gradient conjugué variante Fletcher- Reeves.} \quad (0.4)$$

$$\beta_k^{PRP} = \frac{g_k^T y_{k-1}}{\|g_{k-1}\|^2}, \text{ gradient conjugué variante Polak-Ribière-Polyak.} \quad (0.5)$$

$$\beta_k^{CD} = \frac{\|g_k\|^2}{-d_{k-1}^T g_{k-1}}, \text{ gradient conjugué variante descente conjugué.} \quad (0.6)$$

$$\beta_k^{LS} = \frac{g_k^T y_{k-1}}{-d_{k-1}^T g_{k-1}}, \text{ gradient conjugué variante de Liu-Storey.} \quad (0.7)$$

$$\beta_k^{DY} = \frac{\|g_k\|^2}{d_{k-1}^T y_{k-1}}, \text{ gradient conjugué variante de Dai-Yuan.} \quad (0.8)$$

Malgré l'importance de toutes ces méthodes elles ont été étudiées de façon individuelle et chacune à part par Flecher, Powell, Wolf, El Baali, Polak-Ribière, Polyak, Y. H. Dai et Y. Yuan, ... Il est alors légitime de se poser la question suivante :

Peut on définir et unifier toutes ces méthodes dans une même classe Y. Dai et Y. Yuan ont répondu dans [11] positivement à cette question. La forme unifiée du gradient conjugué en question est de la forme (0.1) et (0.2) où β_k est la forme générale suivante :

$$\beta_k = \frac{(1 - \lambda_k) \|g_k\|^2 + \lambda_k g_k^T y_{k-1}}{(1 - \mu_k - \omega_k) \|g_{k-1}\|^2 + \mu_k d_{k-1}^T y_{k-1} - \omega_k d_{k-1}^T g_{k-1}}, \quad (0.9)$$

avec : $\lambda_k \in [0, 1]$, $\mu_k \in [0, 1]$, $\omega_k \in [0, 1 - \mu_k]$ sont des paramètres.

Le but de ce mémoire est d'étudier la convergence des méthodes du gradient conjugué de deux paramètres où β_k dans notre cas est donné par :

$$\beta_k = \frac{g_k^T y_{k-1}}{(1 - \mu - \omega) \|g_{k-1}\|^2 + \mu d_{k-1}^T y_{k-1} - \omega d_{k-1}^T g_{k-1}}. \quad (0.10)$$

Où $\mu \in [0, 1]$ et $\omega \in [0, 1 - \mu]$, (0.10) est une sous famille de (0.9) avec $\lambda_k = 1$, $\mu_k = \mu$ et $\omega_k = \omega$.

En plus des résultats de convergence nous présentons quelques résultats numériques pour les différentes méthodes du gradient conjugué non linéaire lesquels ont été développés par Sun et Zhang [46].

Ce mémoire comporte quatre chapitres.

Dans le **chapitre premier** on rappelle les notions préliminaires de base concernant l'optimisation sans contraintes.

Dans le **chapitre deux** on expose les grandes lignes des méthodes d'optimisation sans contraintes basées sur les recherches linéaires. On insistera dans ce chapitre sur les recherches linéaires inexactes dites de Wolfe, Armijo et Goldstein-Price.

A travers le **chapitre trois** sont donnés les principes liés aux différentes méthodes itératives d'optimisation sans contraintes. Ainsi on peut citer le principe des méthodes de descente, celui des méthodes du gradient, de la méthode de Newton, méthodes quasi-Newton, les résultats de descente et de convergence de la méthode du gradient conjugué de trois paramètres avec la recherche de Wolfe et le critère de relancement de Powell.

Le **chapitre quatre** est au coeur de ce mémoire car il traite essentiellement de la convergence de la méthode de gradient conjugué de deux paramètres (cas particulier d'une famille de trois paramètres) et les résultats de calcul pour les différentes méthodes de gradient conjugué non linéaire.

Un problème ouvert et sa conjecture ainsi qu'une conclusion achève ce mémoire.

Chapitre 1

Préliminaires : Optimisation sans contraintes

1.1 Notations et définitions

Ensemble convexe

Définition 1.1.1 Soit C un sous ensemble non vide de \mathbb{R}^n . On dit que C est convexe si

$$\forall (x, y) \in C^2, \forall \lambda \in [0, 1], \lambda x + (1 - \lambda)y \in C$$

Définition 1.1.2 Soit $x_1, x_2, \dots, x_k \in \mathbb{R}^n$ et $\lambda_j \geq 0$ tels que $\sum_{j=1}^k \lambda_j = 1$. Toute

expression de la forme $\sum_{j=1}^k \lambda_j x_j$ s'appelle combinaison convexe des points x_j ou barycentre .

Fonction convexe

Définition 1.1.3 Soit $C \subseteq \mathbb{R}^n$ un ensemble convexe non vide. On dit que la fonction $f : C \rightarrow \mathbb{R}$ est convexe si

$$\forall (x, y) \in C^2, \forall \lambda \in [0, 1] : f(\lambda x + (1 - \lambda)y) \leq \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y).$$

Remarque 1.1.1 On dit que f est une fonction concave si $-f$ est convexe.

**CHAPITRE 1. PRÉLIMINAIRES : OPTIMISATION SANS
CANTRAINTES**

Définition 1.1.4 Soit $C \subseteq \mathbb{R}^n$ un ensemble convexe non vide. On dit que f est strictement convexe dans C si

$$\forall (x, y) \in C^2, x \neq y, \forall \lambda \in [0, 1] : f(\lambda x + (1 - \lambda)y) < \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y)$$

Fonction fortement ou uniformément convexe

Définition 1.1.5 Soit $C \subseteq \mathbb{R}^n$ un ensemble convexe non vide. Une fonction $f : C \rightarrow \mathbb{R}$ est fortement ou uniformément convexe de module $v > 0$ si

$$f(\lambda x + (1 - \lambda)y) \leq \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y) - \frac{v}{2} \lambda(1 - \lambda) \|x - y\|^2, \forall (x, y) \in C^2, \forall \lambda \in [0, 1]$$

Fonction convexe différentiable

Définition 1.1.6 Soit $C \subseteq \mathbb{R}^n$ un sous ensemble non vide, $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ et $\hat{x} \in \text{int}(C)$, f est dite différentiable au point \hat{x} , s'il existe un vecteur $A \in \mathbb{R}^n$ et une fonction $\alpha : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ telle que

$$f(x) = f(\hat{x}) + A^T(x - \hat{x}) + \|x - \hat{x}\| \alpha(\hat{x}, x - \hat{x}),$$

où $\alpha(\hat{x}, x - \hat{x}) \xrightarrow{x \rightarrow \hat{x}} 0$. On peut noter le vecteur A comme suit :

$$A = \nabla f(\hat{x}) = \left(\frac{\partial f(\hat{x})}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f(\hat{x})}{\partial x_n} \right)^T. \quad (1.1)$$

Fonction convexe deux fois différentiable

Définition 1.1.7 Soit $C \subseteq \mathbb{R}^n$ un sous ensemble non vide et $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, f est dite deux fois différentiable au point $\hat{x} \in \text{int}(C)$ s'il existe un vecteur $\nabla f(\hat{x})$ et une matrice symétrique $H(\hat{x})$ d'ordre (n, n) appelée matrice hessienne, et une fonction $\alpha : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ tels que

$$\forall x \in C : f(x) = f(\hat{x}) + \nabla f(\hat{x})^T(x - \hat{x}) + \frac{1}{2}(x - \hat{x})^T H(\hat{x})(x - \hat{x}) + \|x - \hat{x}\|^2 \alpha(\hat{x}, x - \hat{x}), \quad (1.2)$$

où $\alpha(\hat{x}, x - \hat{x}) \xrightarrow{x \rightarrow \hat{x}} 0$ et

$$H(\hat{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(\hat{x})}{\partial x_1 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(\hat{x})}{\partial x_1 \partial x_2} & \dots & \dots & \frac{\partial^2 f(\hat{x})}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f(\hat{x})}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(\hat{x})}{\partial x_2 \partial x_2} & \dots & \dots & \frac{\partial^2 f(\hat{x})}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(\hat{x})}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(\hat{x})}{\partial x_n \partial x_2} & \dots & \dots & \frac{\partial^2 f(\hat{x})}{\partial x_n \partial x_n} \end{bmatrix}$$

1.2 Convergence des algorithmes

L'algorithme en optimisation

Un algorithme de résolution est un procédé qui permet, à partir de la donnée d'un point initial x_0 , d'engendrer la suite $x_0, x_1, \dots, x_k, \dots$. Un algorithme est parfaitement défini par la donnée de l'application A qui à x_k associe $x_{k+1} = A(x_k)$. Ceci permettra de confondre un algorithme et l'application A qui lui est associée.

Fonction multivoque

Une application multivoque est une application A qui à $x \in \mathbb{R}^n$ fait correspondre un sous ensemble $A(x)$ de \mathbb{R}^n . Etant donné un point x_k , en appliquant les instructions d'un certain algorithme, on obtient un nouveau point x_{k+1} . Cette procédure peut être décrite par une application multivoque A appelée application algorithmique.

Convergence globale

Nous dirons qu'un algorithme décrit par une application multivoque A , est globalement convergent si, quelque soit le point de départ x_0 choisi, la suite $\{x_k\}$ engendrée par $x_{k+1} \in A(x_k)$ (ou une sous suite) converge vers un point satisfaisant les conditions nécessaires d'optimalité (ou solution optimale).

Les modes de convergence

Soit $\{x_k\}_{k \in \mathbb{N}}$ une suite dans \mathbb{R}^n convergente vers x_* .

◆ Si

$$\limsup_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - x_*\|}{\|x_k - x_*\|} = \alpha < 1.$$

On dit que $\{x_k\}_{k \in \mathbb{N}}$ converge vers x_* linéairement avec le taux α .

◆ Si

$$\frac{\|x_{k+1} - x_*\|}{\|x_k - x_*\|} \rightarrow 0 \text{ quand } k \rightarrow \infty.$$

On dit que la convergence est superlinéaire.

Plus précisément si $\exists \gamma > 1$ tel que :

$$\limsup_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - x_*\|}{\|x_k - x_*\|^\gamma} < +\infty.$$

On dit que la convergence est superlinéaire d'ordre γ .

En particulier si

$$\limsup_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - x_*\|}{\|x_k - x_*\|^2} < +\infty.$$

On dit que la convergence est quadratique (superlinéaire d'ordre 2).

1.3 Dérivée directionnelle

Définition 1.3.1 [10, P.8] Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction et d un vecteur non nul de \mathbb{R}^n . On appelle dérivée directionnelle de f dans la direction d au point x , notée $\delta f(x, d)$, la limite du rapport suivant

$$\frac{f(x + hd) - f(x)}{h} \text{ lorsque } h \text{ tend vers } 0.$$

Autrement dit :

$$\delta f(x, d) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x + hd) - f(x)}{h} = \nabla^T f(x) d. \quad (1.3)$$

◦ Si $\|d\| = 1$: la dérivée directionnelle est le taux d'accroissement de f dans la direction d au point x .

Remarque 1.3.1

- ◆ Le taux d'accroissement est maximal dans la direction du gradient .
- ◆ Le gradient indique la direction de la plus grande pente.

1.4 Direction de descente

Principes généraux

Considérons le problème d'optimisation sans contraintes (P) :

$$(P) \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x),$$

où $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ est supposé régulière.

On note aussi $\nabla f(x)$ et $\nabla^2 f(x)$ le gradient et le hessien de f en x pour le produit scalaire euclidien sur \mathbb{R}^n .

On s'intéresse ici à une classe d'algorithmes qui sont fondés sur la notion de direction de descente.

Définition 1.4.1 Soit d un vecteur non nul de \mathbb{R}^n . On dit que d est une direction de descente de f en $x \in \mathbb{R}^n$ si

$$\nabla f(x)^T d < 0. \quad (1.4)$$

CHAPITRE 1. PRÉLIMINAIRES : OPTIMISATION SANS CANTRAINTES

Ou encore que d fait avec l'opposé du gradient $-\nabla f(x)$ un angle θ strictement plus petit que 90° :

$$\theta = \arccos \frac{-\nabla f(x)^T \cdot d}{\|\nabla f(x)\| \|d\|} \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right[. \quad (1.5)$$

L'ensemble des directions de descente de f en x est le demi espace suivant

$$\{d \in \mathbb{R}^n : \nabla f(x)^T \cdot d < 0\}.$$

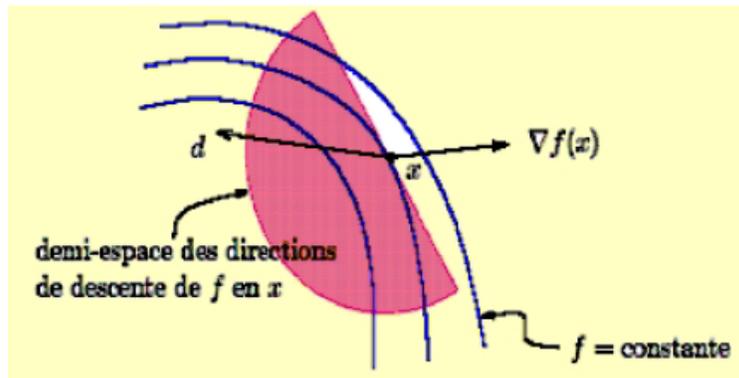


Fig.1.1- Demi-espace(translat) des directions de descente d de f en x .

Résultats d'existence et d'unicité

L'existence et l'unicité de la solution du problème (P) résultent en général de propriétés de convexité de la fonction f et de l'ensemble C sur lequel elle est définie. En effet

Théorème 1.4.1 Soit $f : C \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction strictement convexe et C un ensemble convexe. Le minimum de f sur C , existe et est unique.

Preuve. Soit donc $\hat{x} \in C$ tel que $f(\hat{x}) \leq f(x), \forall x \in C$. Supposons qu'il existe $\hat{y} \neq \hat{x}$ tel que $f(\hat{y}) \leq f(x), \forall x \in C$. Formons pour $\lambda \in]0, 1[$ le vecteur

$$\mu = \lambda \hat{y} + (1 - \lambda) \hat{x}.$$

D'après la stricte convexité de f est puisque nécessairement $f(\hat{y}) = f(\hat{x})$ on a

$$f(\mu) < \lambda f(\hat{y}) + (1 - \lambda)f(\hat{x}) = f(\hat{x}),$$

ce qui contredit le fait que \hat{x} soit un minimum. On a donc $\hat{x} = \hat{y}$. ■

1.5 Conditions d'optimalité

Considérons le problème de minimisation sans contraintes (P).

Définition 1.5.1 a) $x_* \in \mathbb{R}^n$ s'appelle *minimum globale* du problème (P) si

$$f(x_*) \leq f(x), \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

b) x_* s'appelle *minimum local* du problème (P) s'il existe un voisinage $V_\varepsilon(x_*)$ de x_* tel que

$$f(x_*) \leq f(x), \forall x \in V_\varepsilon(x_*).$$

c) x_* s'appelle *minimum local strict* s'il existe un voisinage $V_\varepsilon(x_*)$ de x_* tel que

$$f(x_*) < f(x), \forall x \in V_\varepsilon(x_*) \quad \text{et} \quad x \neq x_*.$$

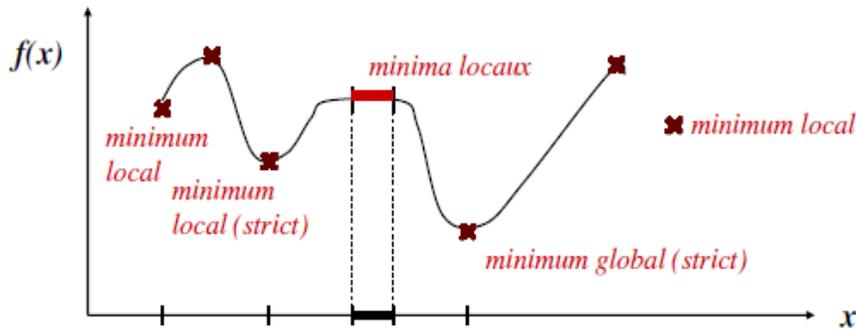


Fig1-2 Type de minimum

1.5.1 Conditions nécessaires d'optimalité

Théorème 1.5.1 *Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ telle que f est différentiable au point $\hat{x} \in \mathbb{R}^n$. Soit $d \in \mathbb{R}^n$ telle que $\nabla f(\hat{x})^T d < 0$. Alors il existe $\delta > 0$ tel que $f(\hat{x} + \alpha d) < f(\hat{x})$ pour tout $\alpha \in]0, \delta[$.*

Preuve. ([10]) Comme f est différentiable en \hat{x} alors

$$f(\hat{x} + \alpha d) = f(\hat{x}) + \alpha \nabla f(\hat{x})^T d + \alpha \|d\| \lambda(\hat{x}, \alpha d),$$

où $\lambda(\hat{x}, \alpha d) \rightarrow 0$ pour $\alpha \rightarrow 0$. Ceci implique :

$$\frac{f(\hat{x} + \alpha d) - f(\hat{x})}{\alpha} = \nabla f(\hat{x})^T d + \|d\| \lambda(\hat{x}, \alpha d), \alpha \neq 0,$$

et comme $\nabla f(\hat{x})^T d < 0$ et $\lambda(\hat{x}, \alpha d) \rightarrow 0$ pour $\alpha \rightarrow 0$, il existe $\delta > 0$ tel que

$$\nabla f(\hat{x})^T d + \|d\| \lambda(\hat{x}, \alpha d) < 0 \text{ pour tout } \alpha \in]0, \delta[,$$

et par conséquent on obtient :

$$f(\hat{x} + \alpha d) < f(\hat{x}) \text{ pour tout } \alpha \in]0, \delta[\tag{1.6}$$

■

Théorème 1.5.2 *Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ différentiable en \hat{x} , si \hat{x} est un minimum local du problème (P) alors $\nabla f(\hat{x}) = 0$.*

Preuve. Par contre, on suppose que $\nabla f(\hat{x}) \neq 0$. Si on pose $d = -\nabla f(\hat{x})$, on obtient :

$$\nabla f(\hat{x})^T d = -\|\nabla f(\hat{x})\|^2 < 0, \tag{1.7}$$

et par le théorème précédent, il existe $\delta > 0$ tel que :

$$f(\hat{x} + \alpha d) < f(\hat{x}) \text{ pour tout } \alpha \in]0, \delta[,$$

mais ceci est contradictoire avec le fait que \hat{x} est un minimum local, d'où $\nabla f(\hat{x}) = 0$ ■

Théorème 1.5.3 *Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ deux fois différentiable en \hat{x} . Supposons que \hat{x} soit un minimum local du problème (P). Alors $\nabla f(\hat{x}) = 0$ et $H(\hat{x})$ est semi définie positive.*

Preuve. ([35]) Le théorème ci-dessus montre la première proposition, pour la deuxième proposition on a :

$$f(\hat{x} + \alpha d) = f(\hat{x}) + \alpha \nabla f(\hat{x})^T \cdot d + \frac{1}{2} \alpha^2 d^T H(\hat{x}) d + \alpha^2 \|d\|^2 \lambda(\hat{x}, \alpha d),$$

où $\lambda(\hat{x}, \alpha d) \rightarrow 0$ pour $\alpha \rightarrow 0$. Ceci implique :

$$\frac{f(\hat{x} + \alpha d) - f(\hat{x})}{\alpha^2} = \frac{1}{2} d^T H(\hat{x}) d + \|d\|^2 \lambda(\hat{x}, \alpha d), \alpha \neq 0. \quad (1.8)$$

Comme \hat{x} est un minimum local alors $f(\hat{x} + \alpha d) > f(\hat{x})$ pour α suffisamment petit, d'où

$$\frac{1}{2} d^T H(\hat{x}) d + \|d\|^2 \lambda(\hat{x}, \alpha d) \geq 0 \text{ pour } \alpha \text{ petit.}$$

En passant à la limite quand $\alpha \rightarrow 0$, on obtient que $d^T H(\hat{x}) d \geq 0$, d'où $H(\hat{x})$ est semi définie positive. ■

1.5.2 Conditions suffisantes d'optimalité

Théorème 1.5.4 Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ deux fois différentiable en \hat{x} . Si $\nabla f(\hat{x}) = 0$ et $H(\hat{x})$ est définie positive, alors \hat{x} est minimum local strict du problème (P).

Preuve. ([35]) f est deux fois différentiable au point \hat{x} . Alors $\forall x \in \mathbb{R}^n$, on obtient :

$$f(x) = f(\hat{x}) + \nabla f(\hat{x})^T (x - \hat{x}) + \frac{1}{2} (x - \hat{x})^T H(\hat{x}) (x - \hat{x}) + \|x - \hat{x}\|^2 \lambda(\hat{x}, x - \hat{x}), \quad (1.9)$$

où $\lambda(\hat{x}, x - \hat{x}) \rightarrow 0$ pour $x \rightarrow \hat{x}$. Supposons que \hat{x} n'est pas un minimum local strict. Donc il existe une suite $\{x_k\}$ convergente vers \hat{x} telle que $f(x_k) \leq f(\hat{x})$, $x_k \neq \hat{x}$, $\forall k$. Posons $d_k = (x_k - \hat{x}) / \|x_k - \hat{x}\|$. Donc $\|d_k\| = 1$ et on obtient à partir le théorème 1.5.2 :

$$\frac{f(x_k) - f(\hat{x})}{\|x_k - \hat{x}\|^2} = \frac{1}{2} d_k^T H(\hat{x}) d_k + \lambda(\hat{x}, x_k - \hat{x}) \leq 0, \forall k$$

**CHAPITRE 1. PRÉLIMINAIRES : OPTIMISATION SANS
CANTRAINTES**

et comme $\|d_k\| = 1, \forall k$ alors $\exists \{d_k\}_{k \in N_1 \subset \mathbb{N}}$ telle que $d_k \rightarrow d$ pour $k \rightarrow \infty$ et $k \in N_1$. On a bien sûr $\|d\| = 1$. Considérons donc $\{d_k\}_{k \in N_1}$ et le fait que $\lambda(\hat{x}, x_k - \hat{x}) \rightarrow 0$ pour $k \rightarrow \infty$ et $k \in N_1$. Alors le théorème 1.5.3 donne : $d_k^T H(\hat{x}) d_k \leq 0$, ce qui contredit le fait que $H(\hat{x})$ est définie positive car $\|d\| = 1$ (donc $d \neq 0$). Donc \hat{x} est un minimum local strict. ■

Chapitre 2

Recherches linéaires exactes et inexactes

2.1 Recherche linéaire

2.1.1 Introduction

Considérons le problème d'optimisation sans contraintes (P) .

$$(P) : \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x),$$

où $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$.

Les algorithmes utilisés par la suite suivent les schémas généraux suivants.

$$x_{k+1} = x_k + \lambda_k d_k, \quad (2.1)$$

où λ_k est une solution optimale du problème d'optimisation unidimensionnel suivant :

$$\min_{\lambda > 0} f(x_k + \lambda d_k), \quad (2.2)$$

c'est -à- dire que λ_k vérifie

$$f(x_k + \lambda_k d_k) \leq f(x_k + \lambda d_k), \forall \lambda > 0,$$

x_k, d_k sont fixes et la fonction à minimiser est une fonction d'une variable réelle définie comme suit :

$$\lambda \rightarrow \varphi(\lambda) = f(x_k + \lambda d_k). \quad (2.3)$$

Il faut noter que dans les problèmes d'optimisation sans contraintes on a besoin de résoudre à chaque itération x_k , un problème d'optimisation dans \mathbb{R} .

Dans ce chapitre nous allons décrire les différentes manières de déterminer un pas $\lambda_k > 0$ le long d'une direction de descente d_k . C'est ce que l'on appelle faire de la recherche linéaire. Il existe deux grandes classes de méthodes qui s'intéressent à l'optimisation unidimensionnelle :

- ▶ les recherches linéaires exactes.
- ▶ les recherches linéaires inexactes.

2.1.2 Objectifs à atteindre

Il s'agit de réaliser deux objectifs :

Le premier objectif, faire décroître f suffisamment, et pour cela on cherche à vérifier l'inégalité :

$$f(x_k + \lambda_k d_k) \leq f(x_k) + \text{“un terme négatif”}. \quad (2.4)$$

Le terme négatif joue un rôle-clé dans la convergence de l'algorithme.

Le second objectif, on choisit le pas $\lambda_k > 0$ d'être trop petit, pour assurer la convergence de l'algorithme au point stationnaire .

Le premier objectif n'est en effet pas suffisant car l'inégalité (2.4) est en général satisfaite par des pas $\lambda_k > 0$ 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 on prend

$$0 < \lambda_k \leq \frac{\varepsilon}{2^k \|d_k\|},$$

la suite $\{x_k\}$ générée par (2.4) est de Cauchy, puisque pour $1 \leq l < k$ on a

$$\|x_k - x_l\| = \left\| \sum_{i=l}^{k-1} \lambda_i d_i \right\| \leq \sum_{i=l}^{k-1} \frac{\varepsilon}{2^i} \rightarrow 0,$$

lorsque $l \rightarrow \infty$.

Donc $\{x_k\}$ converge, disons vers un point \bar{x} . En prenant $l = 1$ et $k \rightarrow \infty$ dans l'estimation ci-dessus, on voit que $\bar{x} \in \overline{B}(x_1, \varepsilon)$ et donc \bar{x} ne saurait être

solution s'il n'y a pas de solution dans $\bar{B}(x_1, \varepsilon)$. 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 $\{x_k + \lambda d_k : \lambda \in \mathbb{R}\}$ et on adopte la notation suivante :

$$\varphi : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}; \quad \lambda \longmapsto \varphi(\lambda) = f(x_k + \lambda d_k).$$

2.1.3 But de la recherche linéaire

Dans le cas non-quadratique les méthodes de descente (2.1), nécessitent la recherche d'une valeur de $\lambda_k > 0$ optimale ou non, vérifiant :

$$f(x_k + \lambda_k d_k) \leq f(x_k). \tag{2.5}$$

Rappelons que si f est différentiable, le pas optimal λ^* peut être caractérisé par

$$\varphi'(\lambda^*) = 0,$$

$$\varphi(\lambda^*) \leq \varphi(\lambda), \text{ pour } 0 < \lambda \leq \lambda^*,$$

autrement dit, λ^* est un minimum local de φ qui assure de plus la décroissance de f . En fait, dans la plupart des algorithmes d'optimisation modernes, on ne fait jamais de recherche linéaire exacte, car trouver λ^* signifie qu'il va falloir calculer un grand nombre de fois la fonction φ , et cela peut être dissuasif du point de vue du temps de calcul. En pratique, on recherche plutôt une valeur de λ qui assure une décroissance suffisante de f . Cela conduit à la notion d'intervalle de sécurité.

2.1.4 Intervalle de sécurité

Définition 2.1.1 *On dit que $[a, b]$ est un intervalle de sécurité s'il permet de classer les valeurs de λ de la façon suivante :*

- ◆ Si $\lambda < a$ alors λ est considéré trop petit.
- ◆ Si $a \leq \lambda \leq b$ alors λ est satisfaisant.
- ◆ Si $\lambda > b$ alors λ est considéré trop grand.

Le problème est de traduire de façon numérique sur φ les trois conditions précédentes, ainsi que de trouver un algorithme permettant de déterminer a et b .

2.1.5 Algorithme de base

Etape 0 : (initialisation)

$a = b = 0$, choisir $\lambda_1 > 0$, poser $k = 1$ et aller à l'étape 1 ;

Etape 1 :

Si λ_k convient, poser $\lambda^* = \lambda_k$ et on s'arrête.

Si λ_k est trop petit on prend $a_{k+1} = \lambda_k$, $b_{k+1} = b$,
et on va à l'étape 2 .

Si λ_k est trop grand on prend $b_{k+1} = \lambda_k$, $a_{k+1} = a$,
et on va à l'étape 2 .

Etape 2 :

Si $b_{k+1} = 0$ déterminer $\lambda_{k+1} \in]a_{k+1}, +\infty[$.

Si $b_{k+1} \neq 0$ déterminer $\lambda_{k+1} \in]a_{k+1}, b_{k+1}[$,
remplacer k par $k + 1$ et aller à l'étape 1.

Il faut maintenant préciser quelles sont les relations sur φ qui vont nous permettre de caractériser les valeurs de λ convenables, ainsi que les techniques utilisées pour réduire l'intervalle.

2.2 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 λ_k comme solution du problème

$$\min_{\lambda > 0} \varphi(\lambda).$$

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. Dans certains cas, on préférera le plus petit point stationnaire de φ qui fait décroître par cette fonction :

$$\lambda_k = \inf \{ \lambda > 0 : \varphi'(\lambda) = 0, \varphi(\lambda) < \varphi(0) \}.$$

On parle alors de règle de Curry et le pas déterminé par cette règle est appelé pas de Curry. De manière un peu imprécise, ces deux règles sont

parfois qualifiées de recherche linéaire exacte.

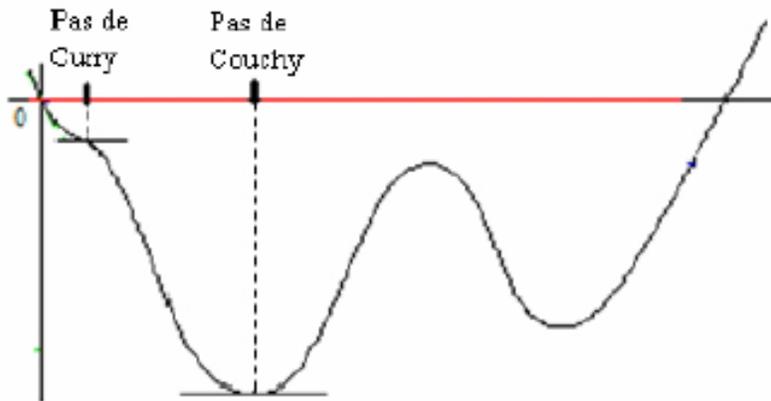


Fig 2.1 - Rgles de Cauchy et de Curry

Remarque 2.2.1 *Ces deux règles ne sont utilisés que dans des cas particuliers, par exemple lorsque φ est quadratique, la solution de la recherche linéaire s'obtient de façon exacte et dans un nombre fini d'itérations.*

Inconvénients : Pour une fonction non linéaire arbitraire,

- ▶ il ne peut 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 toutes façons 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.

Au lieu de demander que λ_k minimise φ , 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 facile.

C'est ce que l'on fait avec les règles d'Armijo, de Goldstein et de Wolfe décrites ci-dessous.

2.3 Recherches linéaires inexactes

On considère la situation qui est typique pour l'application de la technique de recherche linéaire à l'intérieur de la méthode principale multidimensionnelle. Sur une itération k de la dernière méthode nous avons l'itération courante $x_k \in \mathbb{R}^n$ et la direction de recherche $d_k \in \mathbb{R}^n$ qui est direction de descente pour notre objectif : $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$

$$\nabla^T f(x_k)d_k < 0.$$

Le but est de réduire "de façon importante" la valeur de l'objectif par un pas $x_k \rightarrow x_{k+1} = x_k + \lambda_k d_k$ de x_k dans la direction d_k . Pour cela de nombreux mathématiciens (Armijo, Goldstein, Wolfe, Albaali, Lemaréchal, Fletcher...) ont élaboré plusieurs règles.

Schéma des recherches linéaires inexactes

Elles reviennent à déterminer, par tâtonnement un intervalle $[a, b]$, où $\lambda^* \in [a, b]$, dans lequel :

$$f(x_k + \lambda_k d_k) < f(x_k).$$

Le schéma de l'algorithme est donc :

Algorithme (Schéma général des recherches linéaires inexactes)

Etape 0 : (initialisation)

$a_1 = b_1 = 0$, choisir $\lambda_1 > 0$, poser $k = 1$ et aller à l'étape 1 :

Etape 1 :

Si λ_k est satisfaisant (suivant un certain critère) : STOP ($\lambda^* = \lambda_k$).

Si λ_k est trop petit (suivant un certain critère) : nouvel intervalle : $[a_{k+1} = \lambda_k, b_{k+1} = b]$, et aller à l'étape 2.

Si λ_k est trop grand (suivant un certain critère) : nouvel intervalle : $[a_{k+1} = a, b_{k+1} = \lambda_k]$, et aller à l'étape 2.

Etape 2 :

Si $b_{k+1} = 0$ déterminer $\lambda_{k+1} \in]a_{k+1}, +\infty[$.

Si $a_{k+1} \neq 0$ déterminer $\lambda_{k+1} \in]a_{k+1}, b_{k+1}[$, remplacer k par $k + 1$ et aller à l'étape 1.

Il nous reste donc à décider selon quel(s) critère(s) est trop petit ou trop grand ou satisfaisant.

2.3.1 Caractérisation de l'intervalle de sécurité

La règle d'Armijo

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 :

$$f(x_k + \lambda_k d_k) \leq f(x_k) + \omega_1 \lambda_k \nabla f(x_k)^T d_k. \quad (2.6)$$

Elle est de la forme (2.4), car ω_1 devra être choisi dans $]0, 1[$. On voit bien à la figure 2.2 ce que signifie cette condition. Il faut qu'en λ_k , la fonction φ prenne une valeur plus petite que celle prise par la fonction affine

$$\lambda \rightarrow f(x_k) + \omega_1 \lambda \nabla^T f(x_k) d_k. \quad (2.7)$$

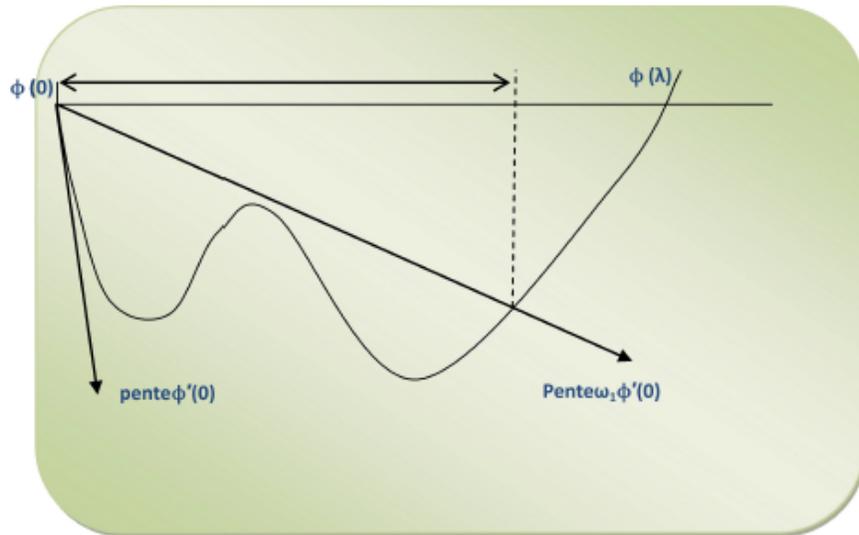


Fig 2.2 - La rgle d'Armijo

Règle d'Armijo

- ◆ Si $\varphi(\lambda) \leq \varphi(0) + \omega_1 \varphi'(0)\lambda$, alors λ convient.
- ◆ Si $\varphi(\lambda) > \varphi(0) + \omega_1 \varphi'(0)\lambda$, alors λ est trop grand.

On peut noter que l'on a

$$\varphi(\lambda) = f(x_k + \lambda d_k)$$

$$\varphi(0) = f(x_k),$$

$$\varphi'(0) = \nabla f(x_k)^T d_k.$$

Algorithme 2.1 (Règle d'Armijo)

Etape 0 : (initialisation)

$a_1 = b_1 = 0$, choisir $\lambda_1 > 0$, $\omega_1 \in]0, 1[$ poser $k = 1$ et aller à l'étape 1.

Etape 1 :

Si $\varphi(\lambda_k) \leq \varphi(0) + \omega_1 \varphi'(0) \lambda_k$: STOP ($\lambda^* = \lambda_k$).

Si $\varphi(\lambda_k) > \varphi(0) + \omega_1 \varphi'(0) \lambda_k$, alors

$b_{k+1} = b$, $a_{k+1} = \lambda_k$ et aller à l'étape 2.

Etape 2 :

Si $b_{k+1} = 0$ déterminer $\lambda_{k+1} \in] a_{k+1}, +\infty [$.

Si $b_{k+1} \neq 0$ déterminer $\lambda_{k+1} \in] a_{k+1}, b_{k+1}[$,

remplacer k par $k + 1$ et aller à l'étape 1.

Remarque 2.3.1 1) *En pratique, la constante ω_1 est prise très petite, de manière à satisfaire (2.6) 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.*

2) *Dans certains algorithmes, il est important de prendre $\omega_1 < \frac{1}{2}$ pour que le pas λ_k soit accepté lorsque x_k est proche d'une solution.*

3) *Il est clair d'après la figure 2.2 que l'inégalité (2.6) est toujours vérifiée si $\lambda_k > 0$ est suffisamment petit.*

Dans le théorème suivant on va assurer l'existence du pas d'Armijo en posant quelques conditions sur la fonction φ

Théorème 2.3.1 *Si $\varphi : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$, définie par $\varphi(\lambda) = f(x_k + \lambda d_k)$ est continue et bornée inférieurement, si d_k est une direction de descente en x_k ($\varphi'(\lambda) < 0$) et si $\omega_1 \in]0, 1[$, alors l'ensemble des pas vérifiant la règle d'Armijo est non vide.*

Preuve. [33] on a

$$\begin{aligned}\varphi(\lambda) &= f(x_k + \lambda d_k) \\ \psi(\lambda) &= f(x_k) + \omega_1 \lambda \nabla^T f(x_k) d_k.\end{aligned}$$

Le développement de Taylor-Yong en $\lambda = 0$ de φ est :

$$\varphi(\lambda) = f(x_k + \lambda d_k) = f(x_k) + \lambda \nabla^T f(x_k) d_k + \lambda \xi(\lambda) \quad \text{où } \xi(\lambda) \rightarrow 0, \lambda \rightarrow 0,$$

et comme $\omega_1 \in]0, 1[$ et $\varphi'(0) = \nabla^T f(x_k) d_k < 0$ on déduit :

$$f(x_k) + \lambda \nabla^T f(x_k) d_k \leq f(x_k) + \omega_1 \lambda \nabla^T f(x_k) d_k \quad \text{pour } \lambda > 0.$$

On voit que pour $\lambda > 0$ assez petit on a :

$$\varphi(\lambda) < \psi(\lambda).$$

De ce qui précède et du fait que φ est bornée inférieurement, et $\psi(\lambda) \rightarrow -\infty, \lambda \rightarrow +\infty$, on déduit que la fonction $\psi(\lambda) - \varphi(\lambda)$ a la propriété :

$$\begin{cases} \psi(\lambda) - \varphi(\lambda) > 0 & \text{pour } \lambda \text{ assez petit,} \\ \psi(\lambda) - \varphi(\lambda) < 0 & \text{pour } \lambda \text{ assez grand,} \end{cases}$$

donc s'annule au moins une fois pour $\lambda > 0$.

En choisissant le plus petit de ces zéros on voit qu'il existe $\bar{\lambda} > 0$ tel que

$$\varphi(\bar{\lambda}) = \psi(\bar{\lambda}) \quad \text{et } \varphi(\lambda) < \psi(\lambda) \quad \text{pour } 0 < \lambda < \bar{\lambda}.$$

Ce qui achève la preuve. ■

La règle de Goldstein

La règle de Goldstein remédie à cet inconvénient (le pas λ_k doit être trop petit).

Dans celle-ci, en ajoutant une deuxième inégalité à la règle d'Armijo on obtient la règle de Goldstein.

$$f(x_k) + \omega_1 \lambda_k \nabla^T f(x_k) d_k \geq f(x_k + \lambda_k d_k) \geq f(x_k) + \omega_2 \lambda_k \nabla^T f(x_k) d_k, \quad (2.8)$$

où ω_1 et ω_2 sont deux constantes vérifiant $0 < \omega_1 < \omega_2 < 1$, cette inégalité qui empêche le pas d'être trop petit.

Règle de Goldstein

- ◆ Si $\varphi(\lambda) < \varphi(0) + \omega_2\varphi'(0)\lambda$, alors λ est trop petit.
- ◆ Si $\varphi(\lambda) > \varphi(0) + \omega_1\varphi'(0)\lambda$, alors λ est trop grand.
- ◆ Si $\varphi(0) + \omega_1\varphi'(0)\lambda \geq \varphi(\lambda) \geq \varphi(0) + \omega_2\varphi'(0)\lambda$, alors λ convient.

On peut noter que l'on a

$$\varphi(\lambda) = f(x_k + \lambda d_k)$$

$$\varphi(0) = f(x_k),$$

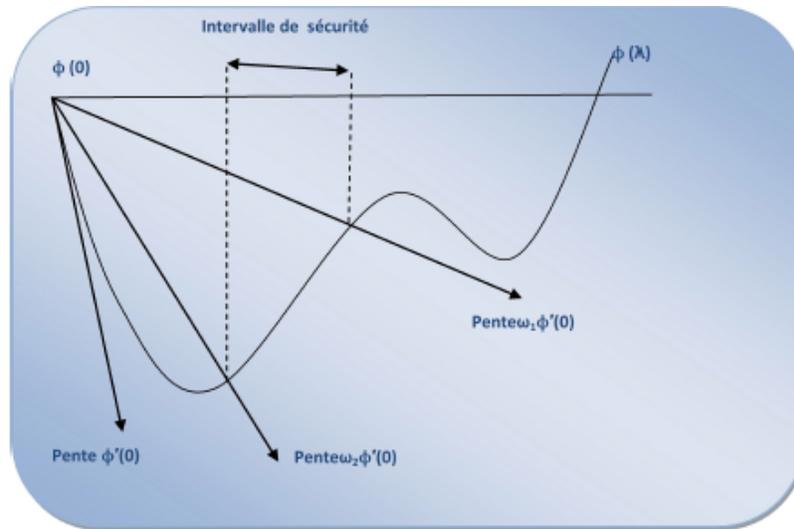


Fig 2.3 - La rgle de Goldstein

Algorithme 2.2 (Règle de Goldstein&Price)

Etape 0 : (initialisation)

$a_1 = b_1 = 0$, choisir $\lambda_1 > 0$, $\omega_1 \in]0, 1[$, $\omega_2 \in]\omega_1, 1[$, poser $k = 1$ et aller à l'étape 1.

Etape 1 :

Si $\varphi(0) + \omega_2\varphi'(0)\lambda \leq \varphi(\lambda_k) \leq \varphi(0) + \omega_1\varphi'(0)\lambda_k$: STOP($\lambda^* = \lambda_k$).

Si $\varphi(\lambda_k) > \varphi(0) + \omega_1\varphi'(0)\lambda_k$, alors

$b_{k+1} = \lambda_k$, $a_{k+1} = a_k$, et aller à l'étape 2.

**CHAPITRE 2. RECHERCHES LINÉAIRES EXACTES ET
INEXACTES**

Si $\varphi(\lambda_k) < \varphi(0) + \omega_2\varphi(0)\lambda_k$, alors
 $b_{k+1} = b_k$, $a_{k+1} = \lambda_k$, et aller à l'étape 2.

Étape 2 :

Si $b_{k+1} = 0$ déterminer $\lambda_{k+1} \in]b_{k+1}, +\infty[$
 Si $b_{k+1} \neq 0$ déterminer $\lambda_{k+1} \in]a_{k+1}, b_{k+1}[$.

Théorème 2.3.2 *Si $\varphi : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$, définie par $\varphi(\lambda) = f(x_k + \lambda d_k)$ est continue et bornée inférieurement, si d_k est une direction de descente en x_k et si $\omega_1 \in]0, 1[$, $\omega_2 \in]\omega_1, 1[$, alors l'ensemble des pas vérifiant la règle de Goldstein et Price est non vide.*

Preuve. [33] on a

$$\begin{aligned}\varphi(\lambda) &= f(x_k + \lambda d_k) \\ \psi_{\omega_1}(\lambda) &= f(x_k) + \omega_1 \lambda \nabla^T f(x_k) d_k \\ \psi_{\omega_2}(\lambda) &= f(x_k) + \omega_2 \lambda \nabla^T f(x_k) d_k.\end{aligned}$$

Le développement de Taylor-Yong en $\lambda = 0$ de φ est :

$$\varphi(\lambda) = f(x_k + \lambda d_k) = f(x_k) + \lambda \nabla^T f(x_k) d_k + \lambda \xi(\lambda) \quad \text{où } \xi(\lambda) \rightarrow 0, \lambda \rightarrow 0,$$

et comme $\omega_1 \in]0, 1[$ et $\varphi'(0) = \nabla^T f(x_k) d_k < 0$ on déduit :

$$f(x_k) + \lambda \nabla^T f(x_k) d_k < f(x_k) + \omega_2 \lambda \nabla^T f(x_k) d_k < f(x_k) + \omega_1 \lambda \nabla^T f(x_k) d_k \quad \text{pour } \lambda > 0.$$

On voit que pour $\lambda > 0$ assez petit on a :

$$\varphi(\lambda) < \psi_{\omega_2}(\lambda) < \psi_{\omega_1}(\lambda).$$

De ce qui précède et du fait que φ est bornée inférieurement, et $\psi_{\omega_1}(\lambda) \rightarrow -\infty, \lambda \rightarrow +\infty$, on déduit que la fonction $\psi_{\omega_1}(\lambda) - \varphi(\lambda)$ a la propriété :

$$\begin{cases} \psi_{\omega_1}(\lambda) - \varphi(\lambda) > 0 & \text{pour } \lambda \text{ assez petit,} \\ \psi_{\omega_1}(\lambda) - \varphi(\lambda) < 0 & \text{pour } \lambda \text{ assez grand,} \end{cases}$$

donc s'annule au moins une fois pour $\lambda > 0$.

En choisissant le plus petit de ces zéros on voit qu'il existe $\bar{\lambda} > 0$ tel que

$$\varphi(\bar{\lambda}) = \psi_{\omega_1}(\bar{\lambda}) \quad \text{et } \varphi(\lambda) < \psi_{\omega_1}(\lambda) \quad \text{pour } 0 < \lambda < \bar{\lambda}.$$

De la même manière, il existe $\hat{\lambda} > 0$ tel que :

$$\varphi(\hat{\lambda}) = \psi_{\omega_2}(\hat{\lambda}) \text{ et } \varphi(\lambda) < \psi_{\omega_2}(\lambda) \text{ pour } 0 < \lambda < \hat{\lambda},$$

et comme $\psi_{\omega_2}(\lambda) < \psi_{\omega_1}(\lambda)$ pour $\lambda > 0$, forcément $\hat{\lambda} < \bar{\lambda}$ et $\lambda = \bar{\lambda}$ satisfait (2.8)

$$\begin{aligned} \psi_{\omega_2}(\hat{\lambda}) = \varphi(\hat{\lambda}) < \psi_{\omega_1}(\lambda), \text{ n'est autre que} \\ f(x_k) + \omega_2 \hat{\lambda} \nabla^T f(x_k) d_k = f(x_k + \hat{\lambda} d_k) < f(x_k) + \omega_1 \hat{\lambda} \nabla^T f(x_k) d_k. \end{aligned}$$

Ce qu'il fallait démontrer. ■

La règle de Wolfe

La règle de Wolfe fait appel au calcul de $\varphi'(\lambda)$, elle est donc en théorie plus coûteuse que la règle de Goldstein. Cependant dans de nombreuses applications, le calcul du gradient $\nabla f(x)$ représente un faible coût additionnel en comparaison du coût d'évaluation de $f(x)$, c'est pourquoi cette règle est très utilisée.

Nous allons présenter les conditions de Wolfe faibles sur $\lambda > 0$:

Règle de wolfe faible

$$f(x_k + \lambda d_k) \leq f(x_k) + \omega_1 \lambda \nabla f(x_k)^T \cdot d_k, \quad (\text{W1}) \quad (2.9)$$

$$\nabla f(x_k + \lambda d_k)^T \cdot d_k \geq \omega_2 \nabla f(x_k)^T \cdot d_k, \quad (\text{W2}) \quad (2.10)$$

avec $0 < \omega_1 < \omega_2 < 1$.

Règle de Wolfe faible

- ◆ Si $\varphi(\lambda) \leq \varphi(0) + \omega_1 \varphi'(0) \lambda$ et $\varphi'(\lambda) \geq \omega_2 \varphi'(0)$, alors λ convient.
- ◆ Si $\varphi(\lambda) > \varphi(0) + \omega_1 \varphi'(0) \lambda$, alors λ est trop grand.
- ◆ Si $\varphi'(\lambda) < \omega_2 \varphi'(0)$, alors λ est trop petit.

On voit bien à la figure 2.4 ce que signifie cette condition.

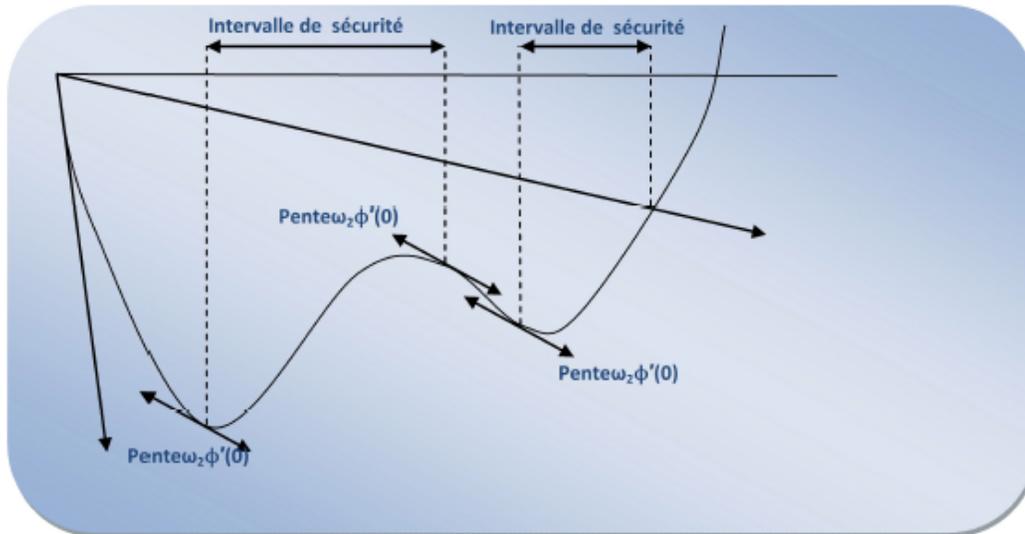


Fig 2.4 - La rgle de Wolfe faible

Algorithme 2.3 (Règle de Wolfe)

Etape 0 : (initialisation)

$a_1 = b_1 = 0$, choisir $\lambda_1 > 0$, $\omega_1 \in]0, 1[$, $\omega_2 \in]\omega_1, 1[$, poser $k = 1$ et aller à l'étape 1.

Etape 1 :

Si $\varphi(\lambda_k) \leq \varphi(0) + \omega_1 \varphi'(0) \lambda_k$ et $\varphi'(\lambda) \geq \omega_2 \varphi'(0)$: STOP ($\lambda^* = \lambda_k$).

Si $\varphi(\lambda_k) > \varphi(0) + \omega_1 \varphi'(0) \lambda_k$, alors

$b_{k+1} = \lambda_k$, $a_{k+1} = a_k$, et aller à l'étape 2.

Si $\varphi'(\lambda) < \omega_2 \varphi'(0)$, alors

$b_{k+1} = b_k$, $a_{k+1} = \lambda_k$ et aller à l'étape 2.

Etape 2 :

Si $b_{k+1} = 0$ déterminer $\lambda_{k+1} \in]a_{k+1}, +\infty[$.

Si $b_{k+1} \neq 0$ déterminer $\lambda_{k+1} \in]a_{k+1}, b_{k+1}[$.

Règle de Wolfe Forte On obtient des contraintes plus fortes si l'on rem-

place (W2) par

$$|\nabla f(x_k + \lambda d_k)^T \cdot d_k| \leq -\omega_2 \nabla f(x_k)^T \cdot d_k. \quad (W3)$$

Les (W1) et (W3) sont les conditions de Wolfe fortes. La contrainte (W3) entraîne que $\omega_2 \varphi'(0) \leq \varphi'(\lambda) \leq -\omega_2 \varphi'(0)$ c-à-d $\varphi'(\lambda)$ n'est pas "trop" positif.

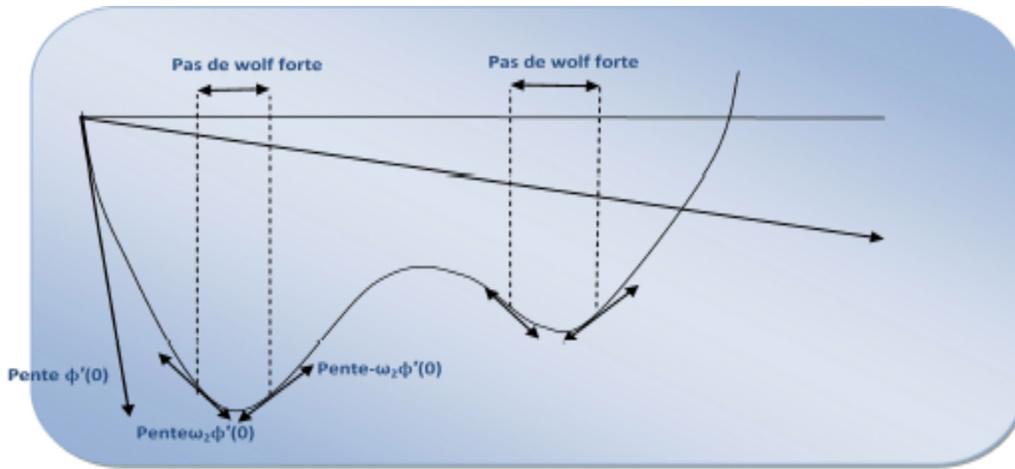


Fig 2.5 - La rgle de Wolfe forte

Remarque 2.3.2 *On voit bien que les conditions de Wolfe fortes impliquent les conditions de Wolfe faibles, en effet :*

$$\begin{aligned} |\nabla^T f(x_k + \lambda_k d_k) d_k| &\leq -\omega_2 \nabla^T f(x_k) d_k \\ \Leftrightarrow \omega_2 \nabla^T f(x_k) d_k &\leq \nabla^T f(x_k + \lambda_k d_k) d_k \leq -\omega_2 \nabla^T f(x_k) d_k \\ \Rightarrow \omega_2 \nabla^T f(x_k) d_k &\leq \nabla^T f(x_k + \lambda_k d_k) d. \end{aligned} \quad (W2)$$

La règle de Wolfe relaxée Proposée par *Dai* et *Yuan* [1996], cette règle consiste à choisir le pas satisfaisant aux conditions :

$$f(x_k + \lambda d_k) \leq f(x_k) + \omega_1 \lambda \nabla^T f(x_k) d_k, \quad (W4)$$

$$\dot{\omega}_2 \nabla^T f(x_k) d_k \leq \nabla^T f(x_k + \lambda_k d_k) d_k \leq -\omega_2 \nabla^T f(x_k) d_k, \quad (W5)$$

où $0 < \omega_1 < \dot{\omega}_2 < 1$ et $\omega_2 > 0$.

Remarque 2.3.3 1) *On voit bien que les conditions de Wolfe relaxées impliquent les conditions de Wolfe fortes. Effectivement (W4) est équivalente à (W1), tandis que pour le cas particulier $\dot{\omega}_2 = \omega_2 = \omega_2$, (W5) est équivalente à (W3). En effet :*

$$\begin{aligned} \dot{\omega}_2 \nabla^T f(x_k) d_k &\leq \nabla^T f(x_k + \lambda_k d_k) d_k \leq -\omega_2 \nabla^T f(x_k) d_k \\ &\Rightarrow \omega_2 \nabla^T f(x_k) d_k \leq \nabla^T f(x_k + \lambda_k d_k) d_k \leq -\omega_2 \nabla^T f(x_k) d_k \\ &\Rightarrow |\nabla^T f(x_k + \lambda_k d_k) d_k| \leq -\omega_2 \nabla^T f(x_k) d_k. \end{aligned} \quad (W3)$$

2) *Les conditions de Wolfe relaxées impliquent les conditions de Wolfe faibles. Effectivement (W4) est équivalente à (W1), tandis que pour le cas particulier $\dot{\omega}_2 = \omega_2$ et $\omega_2 = +\infty$, (W5) est équivalente à (W2). En effet :*

$$\begin{aligned} \dot{\omega}_2 \nabla^T f(x_k) d_k &\leq \nabla^T f(x_k + \lambda_k d_k) d_k \leq -\omega_2 \nabla^T f(x_k) d_k \\ &\Rightarrow \omega_2 \nabla^T f(x_k) d_k \leq \nabla^T f(x_k + \lambda_k d_k) d_k. \end{aligned} \quad (W2)$$

Dans le théorème suivant on va assurer l'existence du pas de Wolfe en posant quelques conditions sur la fonction φ :

Théorème 2.3.3 *Si $\varphi : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$, définie par $\varphi(\lambda) = f(x_k + \lambda d_k)$ est dérivable et bornée inférieurement, si d_k est une direction de descente en x_k et si $\omega_1 \in]0, 1[$, $\omega_2 \in]\omega_1, 1[$, alors l'ensemble des pas vérifiant la règle de Wolfe (faible) est non vide.*

Preuve. [33] on a

$$\begin{aligned} \varphi(\lambda) &= f(x_k + \lambda d_k) \\ \psi_{\omega_1}(\lambda) &= f(x_k) + \omega_1 \lambda \nabla^T f(x_k) d_k. \end{aligned}$$

**CHAPITRE 2. RECHERCHES LINÉAIRES EXACTES ET
INEXACTES**

Le développement de Taylor-Yong en $\lambda = 0$ de φ est :

$$\varphi(\lambda) = f(x_k + \lambda d_k) = f(x_k) + \lambda \nabla^T f(x_k) d_k + \lambda \xi(\lambda) \quad \text{où } \xi(\lambda) \rightarrow 0, \lambda \rightarrow 0,$$

et comme $\omega_1 \in]0, 1[$ et $\varphi'(0) = \nabla^T f(x_k) d_k < 0$ on déduit :

$$f(x_k) + \lambda \nabla^T f(x_k) d_k < f(x_k) + \omega_1 \lambda \nabla^T f(x_k) d_k \quad \text{pour } \lambda > 0.$$

On voit que pour $\lambda > 0$ assez petit on a :

$$\varphi(\lambda) < \psi_{\omega_1}(\lambda).$$

De ce qui précède et du fait que φ est bornée inférieurement, et $\psi_{\omega_1}(\lambda) \rightarrow -\infty, \lambda \rightarrow +\infty$, on déduit que la fonction $\psi_{\omega_1}(\lambda) - \varphi(\lambda)$ a la propriété :

$$\begin{cases} \psi_{\omega_1}(\lambda) - \varphi(\lambda) > 0 & \text{pour } \lambda \text{ assez petit,} \\ \psi_{\omega_1}(\lambda) - \varphi(\lambda) < 0 & \text{pour } \lambda \text{ assez grand,} \end{cases}$$

donc s'annule au moins une fois pour $\lambda > 0$.

En choisissant le plus petit de ces zéros on voit qu'il existe $\bar{\lambda} > 0$ tel que

$$\varphi(\bar{\lambda}) = \psi_{\omega_1}(\bar{\lambda}) \quad \text{et } \varphi(\lambda) < \psi_{\omega_1}(\lambda) \quad \text{pour } 0 < \lambda < \bar{\lambda}. \quad (2.11)$$

La formule des accroissements finis fournit alors un nombre $\hat{\lambda}, 0 < \hat{\lambda} < \bar{\lambda}$ tel qu

$$\begin{aligned} \varphi(\bar{\lambda}) - \varphi(0) &= \bar{\lambda} \varphi'(\hat{\lambda}) = \bar{\lambda} \nabla^T f(x_k + \hat{\lambda} d_k) d_k \\ &\Rightarrow \omega_1 \bar{\lambda} \nabla^T f(x_k) d_k = \bar{\lambda} \nabla^T f(x_k + \hat{\lambda} d_k) d_k \\ &\Rightarrow \nabla^T f(x_k + \hat{\lambda} d_k) d_k = \omega_1 \nabla^T f(x_k) d_k \geq \omega_2 \nabla^T f(x_k) d_k, \end{aligned}$$

car $0 < \omega_1 < \omega_2 < 1$ et $\nabla^T f(x_k) d_k < 0$.

Donc $\hat{\lambda}$ satisfait (2.10). D'autre part, $\lambda = \hat{\lambda}$ satisfait (2.9), en effet $\hat{\lambda}$ satisfait (2.11)

$$\begin{aligned} \varphi(\hat{\lambda}) &< \psi_{\omega_1}(\lambda), \text{ n'est autre que} \\ f(x_k + \hat{\lambda} d_k) &< f(x_k) + \omega_1 \hat{\lambda} \nabla^T f(x_k) d_k. \end{aligned}$$

Ce qu'il fallait démontrer. ■

2.4 Convergence des méthodes à directions de descente

2.4.1 Condition de Zoutendijk

Dans cette section on va étudier la contribution de la recherche linéaire inexacte à la convergence des algorithmes à directions de descente.

On dit qu'une règle de recherche linéaire satisfait la condition de Zoutendijk s'il existe une constante $C > 0$ telle que pour tout indice $k \geq 1$ on ait

$$f(x_{k+1}) \leq f(x_k) - C \|\nabla f(x_k)\|^2 \cos^2 \theta_k, \quad (2.12)$$

où θ_k est l'angle que fait d_k avec $-\nabla f(x_k)$, défini par

$$\cos \theta_k = \frac{-\nabla^T f(x_k) d_k}{\|\nabla f(x_k)\| \|d_k\|}.$$

Voici comment on se sert de la condition de Zoutendijk.

Proposition 2.4.1 *Si la suite $\{x_k\}$ générée par un algorithme d'optimisation vérifie la condition de Zoutendijk (2.12) et si la suite $\{f(x_k)\}$ est minorée, alors*

$$\sum_{k \geq 1} \|\nabla f(x_k)\|^2 \cos^2 \theta_k < \infty. \quad (2.13)$$

Preuve. En sommant les inégalités (2.12), on a

$$\sum_{k \geq 1}^l \|\nabla f(x_k)\|^2 \cos^2 \theta_k \leq \frac{1}{C} (f(x_1) - f(x_{l+1})).$$

La série est donc convergente puisqu'il existe une constante C' telle que pour tout k , $f(x_k) \geq C'$.

Il ya des propositions précisent les circonstances dans lesquelles la condition de Zoutendijk (2.12) est vérifiée avec les règles de la recherche linéaire exacte (Cauchy, Curry) et aussi les règles de la recherche linéaire inexacte (Armijo, Wolfe). ■

Proposition 2.4.2 Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction continuellement différentiable dans un voisinage de $\Gamma = \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leq f(x_1)\}$.

On considère un algorithme à directions de descente d_k , qui génère une suite $\{x_k\}$ en utilisant la recherche linéaire de Wolfe (W1) – (W2). Alors il existe une constante $C > 0$ telle que, pour tout $k \geq 1$, la condition de Zoutendijk (2.12) est vérifiée.

Preuve. Noton $g_k = \nabla f(x_k)$ et $g_{k+1} = \nabla f(x_k + \lambda_k d_k)$.

D'après (W2)

$$\begin{aligned} g_{k+1}^T d_k &\geq \omega_2 g_k^T d_k \\ \Rightarrow (\omega_2 - 1) g_k^T d_k &\leq (g_{k+1} - g_k)^T d_k, \end{aligned}$$

et du fait que f est continuellement différentiable :

$$\begin{aligned} (g_{k+1} - g_k)^T d_k &\leq L \|x_{k+1} - x_k\| \|d_k\| \\ &= L \lambda_k \|d_k\| \|d_k\| \\ \Rightarrow \lambda_k &\geq \frac{(\omega_2 - 1) g_k^T d_k}{L \|d_k\|^2}, \end{aligned}$$

en utilisant (W1), on aura :

$$\begin{aligned} f(x_k + \lambda_k d_k) &\leq f(x_k) + \omega_1 \lambda_k g_k^T d_k \\ &\leq f(x_k) - \omega_1 \frac{(1 - \omega_2)}{L} \frac{g_k^T d_k}{\|d_k\|^2} g_k^T d_k \\ &= f(x_k) - \omega_1 \frac{(1 - \omega_2)}{L} \cos^2 \theta_k \|g_k\|^2. \end{aligned}$$

On en déduit (2.12) ■

Chapitre 3

Méthodes itératives d'optimisation sans contraintes

Il convient de souligner que la plupart des algorithmes d'optimisation sans ou avec contrainte fonctionnent selon un schéma général consistant, à chaque itération, à se rapprocher du minimum par la résolution d'un sous-problème de minimisation. Nous considérons ici les méthodes permettant de résoudre un problème d'optimisation sans contraintes, soit le problème (P)

$$(P) \min \{f(x) : x \in \mathbb{R}^n\},$$

pour lequel nous allons commencer par décrire les méthodes suivantes :

- ◆ Les méthodes de gradient
- ◆ Les méthodes utilisant des directions conjuguées
- ◆ Les méthodes de Newton et quasi-Newton.

Ces méthodes utilisent des dérivées (et donc la propriété de différentiabilité de f) à l'exception des méthodes de directions conjuguées (sauf dans le cas particulier de la méthode du gradient conjugué) basée elle, sur des propriétés plus géométriques.

3.1 Principe des méthodes du gradient

On cherche à déterminer la direction de descente qui fait décroître

$$\phi(\alpha) = f(x + \alpha d).$$

CHAPITRE 3. MÉTHODES ITÉRATIVES D'OPTIMISATION SANS CONTRAINTES

Le plus vite possible (au moins localement). Pour cela on va essayer de minimiser la dérivée de $\phi(\alpha)$ en 0. On a

$$\phi'(0) = \nabla f(x)^T d,$$

et on cherche d solution du problème

$$\min_{d \in \mathbb{R}^n, \|d\|=1} \phi'(0).$$

La solution est bien sûr

$$d = -\frac{\nabla f(x)}{\|\nabla f(x)\|}.$$

En vertu de l'inégalité de Schwartz.

Il y a ensuite de nombreuses façons d'utiliser cette direction de descente. On peut par exemple utiliser un pas fixé à priori $\lambda_k = \alpha > 0; \forall k$. On obtient alors la méthode du gradient simple :

$$\begin{cases} d_k = -\nabla f(x), \\ x_{k+1} = x_k + \lambda d_k. \end{cases} \quad (3.1)$$

Sous certaines hypothèses de régularité (f deux fois différentiable) cette méthode converge si λ est choisi assez petit. Ou bien consiste à faire les itérations suivantes

$$\begin{cases} d_k = -\nabla f(x), \\ x_{k+1} = x_k + \lambda_k d_k. \end{cases} \quad (3.2)$$

Où λ_k est choisi de manière à ce que

$$f(x_k + \lambda_k d_k) \leq f(x_k + \lambda d_k), \forall \lambda > 0. \quad (3.3)$$

On obtient alors la méthode du gradient à pas optimal, cette méthode possède une propriété intéressante :

Proposition 3.1.1 *Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction différentiable. Les directions de descente d_k générées par la méthode (3.2) et (3.3) vérifient*

$$d_{k+1}^T d_k = 0. \quad (3.4)$$

Preuve. Si on introduit la fonction

$$\phi(\lambda) = f(x_k + \lambda d_k),$$

on a

$$\phi'(\lambda) = \nabla f(x_k + \lambda d_k)^T d_k,$$

et puisque ϕ est dérivable on a nécessairement

$$\phi'(\lambda) = 0,$$

donc

$$\nabla f(x_k + \lambda_k d_k)^T d_k = \nabla f(x_{k+1})^T d_k = -d_{k+1}^T d_k = 0.$$

■

3.2 Le principe général d'une méthode à directions conjuguées

Définition 3.2.1 Soit A une matrice symétrique $n \times n$, définie positive. On dit que deux vecteurs x et y de \mathbb{R}^n sont A -conjugués (ou conjugués par rapport à A) s'ils vérifient $x^T A y = 0$

Description de la méthode

Soit $\{d_0, d_1, \dots, d_n\}$ une famille de vecteurs A -conjugués. On appelle alors méthode de directions conjuguées toute méthode itérative appliquée à une fonction quadratique strictement convexe de n variables : $q(x) = \frac{1}{2}x^T A x + b^T x + c$, avec $x \in \mathbb{R}^n$ et $A \in M_{n \times n}$ est symétrique et définie positive, $b \in \mathbb{R}^n$ et $c \in \mathbb{R}$ conduisent à l'optimum en n étapes au plus. Et cette méthode de la forme :

$$\begin{aligned} x_0 & \text{ donné,} \\ x_{k+1} & = x_k + \lambda_k d_k, \end{aligned} \tag{3.5}$$

où λ_k est optimal et d_0, d_1, \dots, d_n possédant la propriété d'être mutuellement conjugués par rapport à la fonction quadratique. Si l'on note $g_k = \nabla q(x_k)$, la méthode se construit comme suit :

Calcul de λ_k

Comme λ_k minimise q dans la direction d_k , on a, $\forall k$:

$$\begin{aligned} \dot{q}(\lambda_k) &= d_k^T \nabla q(x_{k+1}) = 0 \\ d_k^T \nabla q(x_{k+1}) &= d_k^T (Ax_{k+1} + b) = 0. \end{aligned}$$

Soit

$$d_k^T A(x_k + \lambda_k d_k) + d_k^T b = 0,$$

d'où l'on tire :

$$\lambda_k = \frac{-d_k^T (Ax_k + b)}{d_k^T A d_k} \quad (3.6)$$

Construire les directions A-conjuguées

Des directions A-conjuguées d_0, d_1, \dots, d_n peuvent être générées à partir d'un ensemble de vecteurs linéairement indépendants ξ_0, \dots, ξ_k en utilisant la procédure dite de Gram-Schmidt, de telle sorte que pour tout i entre 0 et k , le sous-espace généré par d_0, \dots, d_i soit égale au sous-espace généré par ξ_0, \dots, ξ_i . Alors d_{i+1} est construite comme suit :

$$d_{i+1} = \xi_{i+1} + \sum_{m=0}^i \varphi_{(i+1)m} d_m$$

La méthode du gradient conjugué

La méthode du gradient conjugué est obtenue en appliquant la procédure de Gram-Schmidt aux gradients $\nabla q(x_0), \dots, \nabla q(x_{k-1})$, c'est-à-dire en posant $\xi_0 = -\nabla q(x_0), \dots, \xi_{n-1} = -\nabla q(x_{n-1})$. En outre, nous avons que

$$\begin{aligned} \nabla q(x) &= Ax + b, \\ \text{et } \nabla^2 q(x) &= A. \end{aligned}$$

Notons que la méthode se termine si $\nabla q(x_k) = 0$. La particularité intéressante de la méthode du gradient conjugué est que le membre de droite de l'équation donnant la valeur de d_{k+1} dans la procédure de Gram-Schmidt peut être grandement simplifié. Notons que la méthode du gradient conjugué est inspirée de celle du gradient (plus profonde pente).

Algorithme de La méthode du gradient conjugué pour les fonctions quadratiques (cas linéaire)

On suppose ici que la fonction à minimiser est quadratique sous la forme :

$$q(x) = \frac{1}{2} x^T A x + b^T x + c.$$

**CHAPITRE 3. MÉTHODES ITÉRATIVES D'OPTIMISATION
SANS CONTRAINTES**

Si l'on note $g_k = \nabla q(x_k)$, l'algorithme prend la forme suivante. Cet algorithme consiste à générer une suite d'itérés $\{x_k\}$ sous la forme :

$$x_{k+1} = x_k + \lambda_k d_k. \quad (3.7)$$

L'idée de la méthode est :

1-construire itérativement des directions d_0, \dots, d_k mutuellement conjuguées

A chaque étape k la direction d_k est obtenue comme combinaison linéaire du gradient en x_k et de la direction précédente d_{k-1} c'est-à-dire

$$d_{k+1} = -\nabla q(x_{k+1}) + \beta_{k+1} d_k, \quad (3.8)$$

les coefficients β_{k+1} étant choisis de telle manière que d_k soit conjuguée avec toutes les directions précédentes. Autrement dit :

$$d_{k+1}^T A d_k = 0,$$

on en déduit :

$$\begin{aligned} d_{k+1}^T A d_k &= 0 \Rightarrow (-\nabla q(x_{k+1}) + \beta_{k+1} d_k)^T A d_k = 0 \\ &\Rightarrow -\nabla^T q(x_{k+1}) A d_k + \beta_{k+1} d_k^T A d_k = 0 \\ &\Rightarrow \beta_{k+1} = \frac{\nabla^T q(x_{k+1}) A d_k}{d_k^T A d_k} = \frac{g_{k+1}^T A d_k}{d_k^T A d_k} \end{aligned} \quad (3.9)$$

2-déterminer le pas λ_k :

En particulier, une façon de choisir λ_k peut être de résoudre le problème d'optimisation (à une seule variable)

$$\lambda_k = \min q(x_k + \lambda d_k), \quad \lambda > 0, \quad (3.10)$$

on en déduit :

$$\lambda_k = \frac{-d_k^T g_k}{d_k^T A d_k}. \quad (3.11)$$

Théorème 3.2.1 $\forall x_0 \in \mathbb{R}^n$, la suite $\{x_k\}$, définie par l'algorithme des directions conjuguées (définie par (3.7) et (3.11)), converge en au maximum n pas vers x^* .

**CHAPITRE 3. MÉTHODES ITÉRATIVES D'OPTIMISATION
SANS CONTRAINTES**

Preuve. [30] Sachant que d_0, \dots, d_{n-1} engendrent \mathbb{R}^n , définissons

$$\sigma_k = \frac{d_k^T A(x^* - x_0)}{d_k^T A d_k},$$

t.q. $x^* - x_0 = \sigma_0 d_0 + \sigma_1 d_1 + \dots + \sigma_{n-1} d_{n-1}$.

Selon l'algorithme (3.7), nous avons que $x_k = x_0 + \lambda_0 d_0 + \lambda_1 d_1 + \dots + \lambda_{n-1} d_{n-1}$.

En multipliant cette expression par $d_k^T A$, on voit que $d_k^T A(x_k - x_0) = 0$ et donc que

$$d_k^T A(x^* - x_0) = d_k^T A(x^* - x_k) = d_k^T (-b - Ax_k) = -d_k^T g_k.$$

Ainsi, finalement $\sigma_k = \lambda_k$, ce qui démontre le théorème. ■

Algorithme 3.1 (Algorithme du gradient conjugué "linéaire")

Etape 0 : (initialisation)

Soit x_0 le point de départ, $g_0 = \nabla q(x_0) = Ax_0 + b$, poser $d_0 = -g_0$.

Poser $k = 0$ et aller à l'étape 1.

Etape 1 :

Si $g_k = 0$: STOP ($x^* = x_k$). "Test d'arrêt".

Si non aller à l'étape 2.

Etape 2 :

Définir $x_{k+1} = x_k + \lambda_k d_k$ avec :

$$\begin{aligned} \lambda_k &= \frac{-d_k^T g_k}{d_k^T A d_k} \\ d_{k+1} &= -g_{k+1} + \beta_{k+1} d_k \\ \beta_{k+1} &= \frac{g_{k+1}^T A d_k}{d_k^T A d_k}. \end{aligned}$$

Poser $k = k + 1$ et aller à l'étape 1.

La validité de l'algorithme du gradient conjugué linéaire

On va maintenant montrer que l'algorithme ci-dessus définit bien une méthode de directions conjuguées.

Théorème 3.2.2 *A une itération k quelconque de l'algorithme où l'optimum de $q(x)$ n'est pas encore atteint (c'est-à-dire $g_i \neq 0$, $i = 0, 1, \dots, k$) on a*

a)

$$\lambda_k = \frac{g_k^T g_k}{d_k^T A d_k} \neq 0 \tag{3.12}$$

**CHAPITRE 3. MÉTHODES ITÉRATIVES D'OPTIMISATION
SANS CONTRAINTES**

b)

$$\beta_{k+1} = \frac{g_{k+1}^T [g_{k+1} - g_k]}{g_k^T g_k} \quad (3.13)$$

$$= \frac{g_{k+1}^T g_{k+1}}{g_k^T g_k} \quad (3.14)$$

c) Les directions d_0, d_1, \dots, d_{k+1} engendrées par l'algorithme sont mutuellement conjuguées.

Preuve. ([35])

On raisonne par récurrence sur k en supposant que d_0, d_1, \dots, d_k sont mutuellement conjuguées

a) Montrons d'abord l'équivalence de (3.11) et de (3.12).

On a : $d_k = -g_k + \beta_k d_{k-1}$.

Donc (3.11) s'écrit :

$$\begin{aligned} \lambda_k &= \frac{-d_k^T g_k}{d_k^T A d_k} \\ &= \frac{-[-g_k + \beta_k d_{k-1}]^T g_k}{d_k^T A d_k} \\ &= \frac{g_k^T g_k}{d_k^T A d_k} - \beta_k \frac{d_{k-1}^T g_k}{d_k^T A d_k}. \end{aligned}$$

Comme $(d_0, d_1, \dots, d_{k-1})$ sont mutuellement conjuguées, x_k est l'optimum de $q(x)$ sur la variété v^k passant par x_0 et engendrée par $(d_0, d_1, \dots, d_{k-1})$ (Théorème 3.3.2).

Donc $d_{k-1}^T g_k = 0$ d'où l'on déduit (3.12).

b) Pour démontrer (3.13) remarquons que :

$$\begin{aligned} g_{k+1} - g_k &= A(x_{k+1} - x_k) = \lambda_k A d_k \\ \Rightarrow A d_k &= \frac{1}{\lambda_k} [g_{k+1} - g_k]. \end{aligned}$$

On a alors :

$$g_{k+1}^T A d_k = \frac{1}{\lambda_k} g_{k+1}^T [g_{k+1} - g_k],$$

et en utilisant (3.12)

$$\lambda_k = \frac{g_k^T g_k}{d_k^T A d_k},$$

**CHAPITRE 3. MÉTHODES ITÉRATIVES D'OPTIMISATION
SANS CONTRAINTES**

il vient

$$\begin{aligned} g_{k+1}^T Ad_k &= \frac{d_k^T Ad_k}{g_k^T g_k} g_{k+1}^T [g_{k+1} - g_k] \\ \Rightarrow \frac{g_{k+1}^T Ad_k}{d_k^T Ad_k} &= \frac{g_{k+1}^T [g_{k+1} - g_k]}{g_k^T g_k}. \end{aligned}$$

Or de (3.9) on aura :

$$\beta_{k+1} = \frac{g_{k+1}^T Ad_k}{d_k^T Ad_k} = \frac{g_{k+1}^T [g_{k+1} - g_k]}{g_k^T g_k},$$

ce qui démontre (3.13).

(3.14) découle alors du fait que :

$$g_{k+1}^T g_k = 0,$$

car

$$g_k = -d_k + \beta_k d_{k-1}.$$

Appartient au sous-espace engendré par (d_0, d_1, \dots, d_k) et que g_{k+1} est orthogonal à ce sous-espace.

c) Montrons enfin que d_{k+1} est conjuguée par rapport à (d_0, d_1, \dots, d_k) . On a bien $d_{k+1}^T Ad_k$ car, en utilisant $d_{k+1} = -g_{k+1} + \beta_{k+1} d_k$ on aura :

$$\begin{aligned} d_{k+1}^T Ad_k &= (-g_{k+1} + \beta_{k+1} d_k)^T Ad_k \\ &= -g_{k+1}^T Ad_k + \beta_{k+1} d_k^T Ad_k \\ &= -g_{k+1}^T Ad_k + \frac{g_{k+1}^T Ad_k}{d_k^T Ad_k} d_k^T Ad_k \\ &= 0. \end{aligned}$$

Vérifions maintenant que :

$$d_{k+1}^T Ad_i = 0 \text{ pour } i = 0, 1, \dots, k-1.$$

On a :

$$d_{k+1}^T Ad_i = -g_{k+1}^T Ad_i + \beta_{k+1} d_k^T Ad_i.$$

Le seconde terme est nul par l'hypothèse de récurrence ((d_0, d_1, \dots, d_k) sont mutuellement conjuguées).

**CHAPITRE 3. MÉTHODES ITÉRATIVES D'OPTIMISATION
SANS CONTRAINTES**

Montrons qu'il en est de même du premier terme. Puisque $x_{i+1} = x_i + \lambda_i d_i$ et que $\lambda_i \neq 0$ on a :

$$\begin{aligned} Adi &= \frac{1}{\lambda_i}(Ax_{i+1} - Ax_i) \\ &= \frac{1}{\lambda_i}(g_{i+1} - g_i). \end{aligned}$$

En écrivant :

$$\begin{aligned} g_{i+1} &= -d_{i+1} + \beta_i d_i \\ g_i &= -d_i + \beta_{i-1} d_{i-1}, \end{aligned}$$

on voit que Adi est combinaison linéaire de d_{i+1} , d_i et de d_{i-1} seulement. Mais puisque (d_0, d_1, \dots, d_k) sont mutuellement conjuguées, on sait que le point x_{k+1} est l'optimum de $q(x)$ sur la variété v^{k+1} , engendrée par (d_0, d_1, \dots, d_k) . Donc g_{k+1} est orthogonal au sous-espace engendré par (d_0, d_1, \dots, d_k) et comme Adi appartient à ce sous-espace pour $i = 0, 1, \dots, k-1$, on en déduit $g_{k+1}^T Ad_i = 0$ ce qui achève la preuve. ■

Remarque 3.2.1 Dans ce cas d_k est une direction de descente puisque

$$\begin{aligned} d_k^T \nabla q(x_k) &= (-\nabla q(x_k) + \beta_k d_{k-1})^T \nabla q(x_k) \\ &= -\nabla q(x_k)^T \nabla q(x_k) + \beta_k d_{k-1}^T \nabla q(x_k) \\ &= -\|\nabla q(x_k)\|^2 \quad (\text{car } d_{k-1}^T \nabla q(x_k) = 0) \\ &< 0 \end{aligned}$$

Algorithme des différentes méthodes du gradient conjugué non linéaire

Etape0 :(initialisation)

Soit x_0 le point de départ, $g_0 = \nabla f(x_0)$, poser $d_0 = -g_0$.

Poser $k = 0$ et aller à l'étape 1.

Etape1 :

Si $g_k = 0$: STOP($x^* = x_k$). "Test d'arrêt"

Si non aller à l'étape 2.

Etape2 :

Définir $x_{k+1} = x_k + \lambda_k d_k$ avec :

λ_k :calculer par la recherche linéaire

$d_{k+1} = -g_{k+1} + \beta_{k+1} d_k$,

où β_{k+1} :définir selon la méthode.

Poser $k = k + 1$ et aller à l'étape1.

3.3 La convergence de quelques méthodes du gradient conjugué non linéaire

On s'intéresse dans cette section à la minimisation d'une fonction $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, non nécessairement quadratique :

$$\min f(x), x \in \mathbb{R}^n.$$

Les méthodes du gradient conjugué pour résoudre ce problème sont des méthodes itératives de la forme :

$$x_{k+1} = x_k + \lambda_k d_k. \quad (3.15)$$

Le pas $\lambda_k \in \mathbb{R}$ étant déterminé par une recherche linéaire. La direction d_k est définie par la formule de récurrence suivante ($\beta_k \in \mathbb{R}$)

$$d_k = \begin{cases} -g_1 & \text{si } k = 1 \\ -g_k + \beta_k d_{k-1} & \text{si } k \geq 2 \end{cases} \quad (3.16)$$

Supposition 3.1.

(i) L'ensemble $\mathcal{L} := \{x \in \mathbb{R}^n; f(x) \leq f(x_1)\}$ est borné; où $x_1 \in \mathbb{R}^n$ est le point initial.

(ii) Sur un voisinage \mathcal{N} de \mathcal{L} , la fonction objectif f est continûment différentiable et son gradient est lipschitzien i.e

$$\exists L > 0 \text{ tel que } \|g(x) - g(\tilde{x})\| \leq L \|x - \tilde{x}\|, \forall x, \tilde{x} \in \mathcal{N} \quad (3.17)$$

Remarque 3.3.1 Ces suppositions impliquent qu'il existe $\gamma > 0$ tel que

$$\|g(x)\| \leq \gamma, \forall x \in \mathcal{L} \quad (3.18)$$

Définition 3.3.1 ([26, 1992]) On dit que d_k est une direction de descente suffisante si

$$g_k^T d_k < -c \|g_k\|^2. \quad (3.19)$$

Rappelons les conditions de Wolfe faibles :

$$f(x_k + \lambda d_k) \leq f(x_k) + \omega_1 \lambda \nabla f(x_k)^T d_k \quad (3.20)$$

$$\nabla f(x_k + \lambda d_k)^T d_k \geq \omega_2 \nabla f(x_k)^T d_k \quad (3.21)$$

$$0 < \omega_1 < \omega_2 < 1.$$

Les conditions de Wolfe fortes :

$$f(x_k + \lambda_k d_k) \leq f(x_k) + \omega_1 \lambda_k \nabla f(x_k)^T \cdot d_k.$$

$$|\nabla f(x_k + \lambda_k d_k)^T \cdot d_k| \leq -\omega_2 \nabla f(x_k)^T \cdot d_k, \quad (3.22)$$

où

$$0 < \omega_1 < \omega_2 < 1.$$

Les conditions de Wolfe relaxées :

$$\begin{aligned} f(x_k + \lambda_k d_k) &\leq f(x_k) + \omega_1 \lambda_k \nabla^T f(x_k) d_k \\ \acute{\omega}_2 \nabla^T f(x_k) d_k &\leq \nabla^T f(x_k + \lambda_k d_k) d_k \leq -\acute{\omega}_2 \nabla^T f(x_k) d_k, \end{aligned} \quad (3.23)$$

où

$$0 < \omega_1 < \acute{\omega}_2 < 1 \text{ et } \acute{\omega}_2 > 0.$$

Théorème 3.3.1 *Considérons une méthode du type (3.20) et (3.21) dans laquelle d_k est une direction de descente et le pas λ_k est déterminé par la règle de Wolfe faible avec $0 < \omega_1 < 1/2$: Considérons aussi que la supposition 3.1 soit satisfaite. Alors pour une telle méthode la condition de Zoutendijk suivante :*

$$\sum_{k \geq 1} \cos^2 \theta_k \|g_k\|^2 < \infty,$$

est vérifiée.

3.3.1 Convergence de la méthode de Fletcher-Reeves

Le premier résultat de convergence de la méthode du gradient conjugué non linéaire (version Fletcher-Reeves) avec des recherches linéaires inexactes (recherche linéaire inexacte de Wolfe forte où $\omega_2 < \frac{1}{2}$) était démontré par Al-Baali ([1, 1985]).

Touati Ahmed et Story ([45,1990]) ont généralisé ce résultat pour

$$0 \leq \beta_k \leq \beta_k^{FR}.$$

**CHAPITRE 3. MÉTHODES ITÉRATIVES D'OPTIMISATION
SANS CONTRAINTES**

Gilbert et Nocedal ([26, 1992]) ont généralisé ce résultat pour

$$|\beta_k| \leq \beta_k^{FR}. \quad (3.24)$$

$$\beta_k^{FR} = \frac{\|g_k\|^2}{\|g_{k-1}\|^2}, \text{ gradient conjugué variante Fletcher-Reeves}$$

Théorème 3.3.2 *Supposons que l'hypothèse 3.1 soit satisfaite. Considérons une méthode du type (3.7) et (3.16) dont β_k satisfait à (3.24) et le pas λ_k satisfait aux conditions de Wolfe fortes où $\omega_2 \in]0, \frac{1}{2}[$. Alors cette méthode est globalement convergente, dans le sens suivant :*

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0. \quad (3.25)$$

Preuve. . ([26, 1992])

Puisque les conditions du théorème 3.3.1 sont satisfaites alors on a :

$$\frac{-1}{1 - \omega_2} \leq \frac{d_k^T g_k}{\|g_k\|^2} \Rightarrow -\omega_2 d_{k-1}^T g_{k-1} \leq \frac{\omega_2}{1 - \omega_2} \|g_{k-1}\|^2.$$

D'autre part de (3.22)

$$|d_k^T g_{k+1}| \leq -\omega_2 d_k^T g_k \Rightarrow |d_{k-1}^T g_k| \leq -\omega_2 d_{k-1}^T g_{k-1},$$

d'où

$$|d_{k-1}^T g_k| \leq -\omega_2 d_{k-1}^T g_{k-1} \leq \frac{\omega_2}{1 - \omega_2} \|g_{k-1}\|^2. \quad (3.26)$$

De (3.7), (3.24) et (3.26) :

$$\begin{aligned} \|d_k\|^2 &= \left| \|g_k\|^2 - 2\beta_k d_{k-1}^T g_k + \beta_k^2 \|d_{k-1}\|^2 \right| \\ &\leq \|g_k\|^2 + |2\beta_k d_{k-1}^T g_k| + \beta_k^2 \|d_{k-1}\|^2 \\ &\leq \frac{1 + \omega_2}{1 - \omega_2} \|g_k\|^2 + (\beta_k^{FR})^2 \|d_{k-1}\|^2. \end{aligned}$$

Posons

$\hat{\omega} = \frac{1 + \omega_2}{1 - \omega_2}$ on aura :

**CHAPITRE 3. MÉTHODES ITÉRATIVES D'OPTIMISATION
SANS CONTRAINTES**

$$\begin{aligned}
 \|d_k\|^2 &\leq \hat{\omega} \|g_k\|^2 + (\beta_k^{FR})^2 \|d_{k-1}\|^2 \\
 &\leq \hat{\omega} \|g_k\|^2 + (\beta_k^{FR})^2 \left[\hat{\omega} \|g_{k-1}\|^2 + (\beta_{k-1}^{FR})^2 \|d_{k-2}\|^2 \right] \\
 &= \hat{\omega} \|g_k\|^4 \sum_{j=2}^k \|g_j\|^{-2} + \hat{\omega} \|g_k\|^4 \|g_1\|^{-2} = \hat{\omega} \|g_k\|^4 \sum_{j=1}^k \|g_j\|^{-2}.
 \end{aligned}$$

Supposons que g_k est borné en dehors du zéro ($\lim_{k \rightarrow \infty} \inf \|g_k\| \neq 0$), c'est-à-dire :

$$\|g_k\| \geq \omega > 0; \forall k \Rightarrow \|g_k\|^{-2} \leq \omega^{-2},$$

de (3.18) on a :

$$\begin{aligned}
 \|d_k\|^2 &\leq \hat{\omega} \|g_k\|^4 \sum_{j=1}^k \|g_j\|^{-2} \leq \hat{\omega} \frac{\gamma^4}{\omega^2} \sum_{j=1}^k 1 \\
 \Rightarrow \|d_k\|^2 &\leq \hat{\omega} \frac{\gamma^4}{\omega^2} k,
 \end{aligned}$$

d'où

$$\sum_{k \geq 1} \frac{1}{\|d_k\|^2} \geq \frac{\omega^2}{\hat{\omega} \gamma^4} \sum_{k \geq 1} \frac{1}{k} > \infty. \quad (3.27)$$

Ce qui veut dire que $\sum_{k \geq 1} \frac{1}{\|d_k\|^2}$ est divergente.

D'autre part, puisque les conditions du Théorème 3.3.1 sont satisfaites on a :

$$\sum_{k \geq 1} \cos^2 \theta_k \|g_k\|^2 < \infty,$$

et

$$c_1 \frac{\|g_k\|}{\|d_k\|} \leq \cos \theta_k \leq c_2 \frac{\|g_k\|}{\|d_k\|},$$

d'où

$$\begin{aligned}
 \sum_{k \geq 1} c_1^2 \frac{\|g_k\|^2}{\|d_k\|^2} \|g_k\|^2 &\leq \sum_{k \geq 1} \cos^2 \theta_k \|g_k\|^2 < \infty \\
 &\Rightarrow \sum_{k \geq 1} \frac{\|g_k\|^4}{\|d_k\|^2} < \infty \\
 &\Rightarrow \sum_{k \geq 1} \frac{\omega^4}{\|d_k\|^2} < \infty \\
 &\Rightarrow \sum_{k \geq 1} \frac{1}{\|d_k\|^2} < \infty.
 \end{aligned}$$

Ce qui contredit (3.27), d'où le résultat :

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0.$$

■

3.3.2 Convergence de la méthode de PRP

La convergence de cette méthode est assurée pour une fonction fortement convexe avec recherche linéaire, mais si f n'est pas convexe elle ne converge pas.

$$\beta_k^{PRP} = \frac{g_k^T y_{k-1}}{\|g_{k-1}\|^2}, \text{ gradient conjugué variante Polak-Ribière-Polyak} \quad (3.28)$$

Théorème 3.3.3 *Si f est fortement convexe, continûment différentiable 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 .*

Preuve. ([33]) Montrons dans un premier temps que

**CHAPITRE 3. MÉTHODES ITÉRATIVES D'OPTIMISATION
SANS CONTRAINTES**

$$\cos \theta_k = \frac{-d_k^T g_k}{\|g_k\| \|d_k\|},$$

est uniformément positif.

Grâce à la recherche linéaire exacte, on a

$$\begin{aligned} d_{k-1}^T y_{k-1} &= d_{k-1}^T (g_k - g_{k-1}) \\ &= -d_{k-1}^T g_{k-1} = -(-g_{k-1} + \beta_{k-1}^{PRP} d_{k-2})^T g_{k-1} \\ &= \|g_{k-1}\|^2. \end{aligned}$$

La forte convexité de f implique que

$$d_{k-1}^T y_{k-1} = \frac{1}{\lambda_{k-1}} (x_k - x_{k-1})^T y_{k-1} \geq \frac{\eta}{\lambda_{k-1}} \|x_k - x_{k-1}\|^2,$$

où $\eta > 0$ est le module de forte convexité de f .

On en déduit, en utilisant la constante de lipschitz L de g :

$$|\beta_k^{PRP}| = \frac{|g_k^T y_{k-1}|}{\|g_{k-1}\|^2} = \frac{|g_k^T y_{k-1}|}{d_{k-1}^T y_{k-1}} \leq \frac{\lambda_{k-1} L \|g_k\| \|x_k - x_{k-1}\|}{\eta \|x_k - x_{k-1}\|^2} = \frac{L}{\eta} \frac{\|g_k\|}{\|d_{k-1}\|}.$$

On peut alors borner $\|d_k\|$ par :

$$\begin{aligned} \|d_k\| &\leq \|g_k\| + |\beta_k^{PRP}| \|d_{k-1}\| \\ &\leq \|g_k\| + \frac{L}{\eta} \frac{\|g_k\|}{\|d_{k-1}\|} \|d_{k-1}\| \\ &\leq \left(1 + \frac{L}{\eta}\right) \|g_k\|. \end{aligned}$$

Ensuite

$$d_k^T g_k = -\|g_k\|^2 \leq -\left(1 + \frac{L}{\eta}\right)^{-1} \|g_k\| \|d_k\|,$$

ou encore

$$\cos \theta_k = \frac{-d_k^T g_k}{\|g_k\| \|d_k\|} \geq \left(1 + \frac{L}{\eta}\right)^{-1}.$$

La condition de Zoutendijk est vérifiée. Donc $\{f(x_k)\}$ est bornée inférieurement (car f est fortement convexe).

On en déduit que $g_k \rightarrow 0$.

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 $g_k \rightarrow 0$).

Donc toute la suite $\{x_k\}$ converge vers x^* .

■

3.3.3 Convergence de la méthode de la descente conjuguée

Yuan ([47, 1993]) a démontré la convergence au sens (3.17) de cette méthode avec un pas satisfaisant aux conditions (3.20), (3.23) si $\omega_2 < \frac{1}{2}$ et $\acute{\omega}_2 = 0$.

Dai et Yuan ([15,1996]) ont démontré ce résultat pour $\omega_2 < 1$ et $\acute{\omega}_2 = 0$,

$$\beta_k^{CD} = \frac{\|g_k\|^2}{-d_{k-1}^T g_{k-1}}, \text{ gradient conjugué variante descente conjuguée} \quad (3.29)$$

Théorème 3.3.4 . *Supposons que la l'hypothèse 3.1 est satisfaite. Toute méthode du type (3.7) et (3.16) dans laquelle β_k vérifie (3.29) et le pas λ_k est déterminé par la règle de Wolfe relaxée où $0 < \omega_1 < \omega_2 < 1$ et $\acute{\omega}_2 = 0$, est de descente convergente, dans le sens où*

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0$$

Preuve. ([15,1996]) Du théorème 3.3.2 on a :

$$\begin{aligned}
 1 - \omega_2 &\leq \frac{-d_k^T g_k}{\|g_k\|^2} \leq 1 + \omega_2 \\
 \Rightarrow 1 &\leq \frac{-d_k^T g_k}{\|g_k\|^2} \leq 1 + \omega_2 \\
 \Rightarrow (1 + \omega_2)^{-1} &\leq \frac{\|g_k\|^2}{-d_k^T g_k} \leq 1 \\
 \Rightarrow (1 + \omega_2)^{-1} &\leq \frac{\|g_{k+1}\|^2 \|g_k\|^2}{-d_k^T g_k \|g_{k+1}\|^2} \leq 1 \\
 \Rightarrow (1 + \omega_2)^{-1} &\leq \frac{\beta_{k+1}^{CD}}{\beta_{k+1}^{FR}} \leq 1 \\
 \Rightarrow \beta_{k+1}^{CD} &\leq \beta_{k+1}^{FR}.
 \end{aligned}$$

Donc β_{k+1}^{CD} vérifie l'inégalité (3.24).

D'après le théorème 3.3.1 on a :

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0$$

■

3.3.4 Convergence de la méthode de Dai-Yuan

Dai-Yuan ([16, 1998]) ont démontré la convergence de la méthode de Dai-Yuan au sens (3.25) si le pas λ_k est déterminé par la règle de Wolfe faible.

$$\beta_k^{DY} = \frac{\|g_k\|^2}{d_{k-1}^T y_{k-1}}, \text{ gradient conjugué variant Dai-Yuan} \quad (3.30)$$

Théorème 3.3.5 *Supposons que la proposition 3.1 est satisfaite. La suite $\{x_k\}$ converge dans le sens*

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0$$

**CHAPITRE 3. MÉTHODES ITÉRATIVES D'OPTIMISATION
SANS CONTRAINTES**

Preuve. ([16, 1998]) En utilisant le théorème 3.3.1, on aura :

$$\sum_{k \geq 1} \cos^2 \theta \|g_k\|^2 < \infty, \quad (3.31)$$

d'autre part on a :

$$\begin{aligned} \|d_{k+1} + g_{k+1}\|^2 &= \|\beta_{k+1}^{DY} d_k\|^2 \\ \Rightarrow \|d_{k+1}\|^2 &= (\beta_{k+1}^{DY})^2 \|d_k\|^2 - 2d_{k+1}^T g_{k+1} - \|g_{k+1}\|^2. \end{aligned} \quad (3.32)$$

De (3.30) :

$$\begin{aligned} d_{k+1}^T g_{k+1} &= (-g_{k+1} + \beta_{k+1}^{DY} d_k)^T g_{k+1} \\ &= \frac{\|g_{k+1}\|^2}{d_k^T g_k} d_k^T g_k = \beta_{k+1}^{DY} d_k^T g_k \\ \Rightarrow \beta_{k+1}^{DY} &= \frac{d_{k+1}^T g_{k+1}}{d_k^T g_k}, \end{aligned}$$

remplaçant ceci dans (3.32), on aura :

$$\begin{aligned} \frac{\|d_{k+1}\|^2}{(d_{k+1}^T g_{k+1})^2} &= \frac{(\beta_{k+1}^{DY})^2 \|d_k\|^2}{(d_{k+1}^T g_{k+1})^2} - \frac{2d_{k+1}^T g_{k+1}}{(d_{k+1}^T g_{k+1})^2} - \frac{\|g_{k+1}\|^2}{(d_{k+1}^T g_{k+1})^2} \\ &= \frac{\|d_k\|^2}{(d_k^T g_k)^2} - \left[\frac{1}{\|g_{k+1}\|^2} + 2 \frac{1}{d_{k+1}^T g_{k+1}} + \frac{\|g_{k+1}\|^2}{(d_{k+1}^T g_{k+1})^2} \right] + \frac{1}{\|g_{k+1}\|^2} \\ &= \frac{\|d_k\|^2}{(d_k^T g_k)^2} - \left[\frac{1}{\|g_{k+1}\|} + \frac{\|g_{k+1}\|}{d_{k+1}^T g_{k+1}} \right]^2 + \frac{1}{\|g_{k+1}\|^2} \\ &\leq \frac{\|d_k\|^2}{(d_k^T g_k)^2} + \frac{1}{\|g_{k+1}\|^2}, \end{aligned}$$

d'où

$$\begin{aligned} \frac{\|d_k\|^2}{(d_k^T g_k)^2} &\leq \frac{1}{\|g_k\|^2} + \frac{\|d_{k-1}\|^2}{(d_{k-1}^T g_{k-1})^2} \\ &\leq \frac{1}{\|g_k\|^2} + \frac{1}{\|g_{k-1}\|^2} + \frac{\|d_{k-2}\|^2}{(d_{k-2}^T g_{k-2})^2} \\ &\leq \sum_{i=1}^k \frac{1}{\|g_i\|^2}. \end{aligned}$$

CHAPITRE 3. MÉTHODES ITÉRATIVES D'OPTIMISATION SANS CONTRAINTES

Supposons maintenant que (3.18) n'est pas satisfaite, autrement dit :

$$\exists \omega > 0 \text{ tel que } \|g_k\| > \omega; \forall k.$$

On aura :

$$\begin{aligned} \frac{\|d_k\|^2}{(d_k^T g_k)^2} &\leq \sum_{i=1}^k \frac{1}{\|g_i\|^2} \leq \frac{1}{\omega^2} \sum_{i=1}^k 1 = \frac{1}{\omega^2} k \\ \Rightarrow \sum_{k \geq 1} \frac{(d_k^T g_k)^2}{\|d_k\|^2} &\geq \omega^2 \sum_{k \geq 1} \frac{1}{k}, \end{aligned}$$

d'où

$$\sum_{k \geq 1} \frac{(d_k^T g_k)^2}{\|d_k\|^2} = \infty,$$

ce qui contredit (3.31).

Ce qui achève la preuve ■

3.4 Principe de la Méthode de Newton

Considérons le problème d'optimisation sans contraintes (P)

$$(P) : \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad \text{où} \quad f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}.$$

Le principe de la méthode de Newton consiste à minimiser successivement les approximations du second ordre de f , plus précisément si

$$f(x) = f(x_k) + \nabla f(x_k)^T (x - x_k) + \frac{1}{2} (x - x_k)^T A(x_k) (x - x_k) + o(\|x - x_k\|^2),$$

posons

$$q(x) = f(x_k) + \nabla f(x_k)^T (x - x_k) + \frac{1}{2} (x - x_k)^T A(x_k) (x - x_k).$$

Soit x_{k+1} l'optimum de q , alors il vérifie $\nabla q(x_{k+1}) = 0$, soit en remplaçant :

$$\nabla f(x_k) + A(x_k) (x_{k+1} - x_k) = 0,$$

CHAPITRE 3. MÉTHODES ITÉRATIVES D'OPTIMISATION SANS CONTRAINTES

donc

$$x_{k+1} = x_k - [A(x_k)]^{-1} \nabla f(x_k)$$

Avantages

Si le point x_1 est assez proche de la solution optimale locale x_* telle que $A(x_*)$ soit définie positive, alors l'algorithme de Newton converge de façon quadratique vers la solution x_* , c'est à dire que l'on a,

$$\|x_{k+1} - x_*\| \leq \gamma \|x_k - x_*\|^2 \quad \gamma \geq 0$$

Inconvénients

1-Cette méthode fonctionne très bien pour les problèmes de petite dimension ($1 \leq n \leq 10$), lorsque on peut calculer facilement la matrice Hessienne A et sont inverse. Ce calcul nécessite des itérations plus nombreuses et coûteuses dans les problèmes de grandes tailles.

2-Comme $x_{k+1} = x_k - [A(x_k)]^{-1} \nabla f(x_k)$. On voit bien que le successeur x_{k+1} de x_k n'est pas toujours bien défini.

3-Même si $[A(x_k)]^{-1}$ existe la direction $d_k = - [A(x_k)]^{-1} \nabla f(x_k)$ n'est pas toujours une direction de descente.

Donc pour obtenir une méthode qui converge superlinéairement, il est nécessaire d'approximer l'étape de Newton asymptotiquement. C'est le principe de Dennis et Moré. Comment peut-on y aboutir sans évaluer la matrice Hessienne dans chaque itération ?

La réponse à été découverte par Davidon en 1959 et a été développée et popularisée par Fletcher et Powell en 1963. Elle consiste à commencer par n'importe quelle approximation de la matrice Hessienne et à chaque itération, on améliore la matrice en introduisant la courbure du problème mesuré tous au long de l'étape. Si cette amélioration est faite correctement, on obtient quelques méthodes remarquablement robustes et efficaces, qu'on appelle les méthodes de la variable métrique ou quasi Newton. Ils ont libéré l'optimisation non linéaire en procurant une alternative à la méthode de Newton, qui est très coûteuse pour plusieurs applications. Il y a plusieurs méthodes de variable métrique, on s'étalera particulièrement sur les trois plus importantes, la méthode de correction de rang un, la méthode DFP (Davidon, Fletcher, Powell) et la méthode BFGS (Broyden, Fletcher, Goldfarb, Shanno).

3.5 Méthode de quasi Newton

Une méthode de quasi Newton est une méthode de type :

$$\begin{cases} x_{k+1} = x_k + \lambda_k d_k, \\ d_k = -B_k g_k. \end{cases} \quad (3.33)$$

Où B_k est une matrice destinée à approcher l'inverse du Hessien de f (respectivement le Hessien de f) en x_k . Le problème posé est : quelle stratégie à adopter pour faire cette approximation ? On peut par exemple poser $B_0 = I$, mais comment ensuite mettre à jour l'approximation B_k au cours des itérations ?

L'idée est la suivante : on sait que au point x_k , le gradient et le hessien de f vérifient la relation

$$g_{k+1} = g_k + H(x_k)(x_{k+1} - x_k) + \epsilon(x_{k+1} - x_k).$$

Si on suppose que l'approximation quadratique est bonne, on peut alors négliger le reste et considérer que l'on a

$$g_{k+1} \simeq g_k + H(x_k)(x_{k+1} - x_k),$$

cela conduit à la notion de relation de quasi-Newton

Définition 3.5.1 *On dit que les matrices B_{k+1} et H_{k+1} vérifient une relation de quasi-Newton si on a*

$$H(x_{k+1})(x_{k+1} - x_k) = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k),$$

ou

$$x_{k+1} - x_k = B_{k+1} [\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)].$$

Il reste un problème à résoudre : comment mettre à jour B_k tout en assurant $B_k > 0$? C'est ce que nous allons voir maintenant

Formules de mise à jour de l'approximation du hessien :

Le principe de la mise à jour consiste, à une itération donnée de l'algorithme

$$\begin{cases} x_{k+1} = x_k + \lambda_k d_k \\ d_k = -B_k g_k, \end{cases}$$

à appliquer une formule du type

$$B_{k+1} = B_k + \Delta_k, \quad (3.34)$$

avec Δ_k symétrique, assurant la relation de quasi-Newton

$$x_{k+1} - x_k = B_{k+1} [g_{k+1} - g_k],$$

ainsi que $B_{k+1} > 0$, sous l'hypothèse que $B_k > 0$.

La formule (3.18) permet d'utiliser les nouvelles informations obtenues lors de l'étape k de l'algorithme, c'est à dire essentiellement le gradient $g_{k+1} = \nabla f(x_{k+1})$ au point x_{k+1} , obtenu par recherche linéaire (exacte ou approchée) dans la direction d_k . Il existe différentes formules du type (3.33). Suivant que Δ_k est de rang un ou deux, on parlera de correction de rang un ou de rang deux .

3.5.1 Méthode de correction de rang un

Etant donné que $[H(x_k)]^{-1}$ est symétrique, la formule de mise à jour de l'approximation du Hessien B_k est la suivante :

$$B_{k+1} = B_k + a_k u_k u_k^T, \quad u_k \in \mathbb{R}^n$$

donc la condition de quasi -Newton s'écrit comme suit

$$s_k = (B_k + a_k u_k u_k^T) y_k,$$

ou encore

$$s_k - B_k y_k = a_k u_k u_k^T y_k.$$

D'ou l'on déduit que u_k est proportionnel à $s_k - B_k y_k$, avec un facteur qui peut être pris en compte dans a_k . Un choix évident pour vérifier cette dernière équation est de prendre $u_k = s_k - B_k y_k$ et a_k tel que $a_k (u_k^T y_k) = 1$, on obtient :

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(s_k - B_k y_k) (s_k - B_k y_k)^T}{(s_k - B_k y_k)^T y_k} \quad (3.35)$$

Théorème 3.5.1 *Si f est quadratique, de matrice Hessienne H définie positive et si s_1, s_2, \dots, s_n sont des vecteurs indépendants, alors la méthode de correction de rang un converge au plus dans $(n + 1)$ itérations et $(B_{n+1})^{-1} = H$.*

Avantages :

Cette méthode présente l'avantage, que le point x_{k+1} n'a pas besoin d'être choisi comme le minimum exact, c'est à dire qu'on n'a pas besoin d'effectuer des recherches linéaire exactes.

Inconvénients :

Même si la fonction est quadratique, et même si son Hessien est défini positif, il se peut que la matrice B_k ne soit pas définie positive. Le dénominateur $(s_k - B_k y_k)^T y_k$ peut devenir nul ou très petit, ce qui rend le procédé instable.

3.5.2 Méthode de Davidon Fletcher Powell (DFP)

Cette méthode a été proposée par Davidon en 1959 et développé plus tard en 1963 par Fletcher. La formule de mise à jour de **DFP** est une formule de correction de rang deux. De façon plus précise construisons B_{k+1} en fonction de B_k de la forme :

$$B_{k+1} = B_k + A_k + \Delta_k, \quad (3.36)$$

avec Δ_k et A_k deux matrices de rang un tel que

$$A_k = a_k u_k u_k^T, \quad \Delta_k = b_k v_k v_k^T,$$

a_k, b_k sont des constantes, u_k, v_k sont deux vecteurs de \mathbb{R}^n . B_{k+1} doit satisfaire la condition quasi -Newton c'est à dire

$$x_{k+1} - x_k = B_{k+1} [g_{k+1} - g_k].$$

Si on pose par suite

$$s_k = x_{k+1} - x_k, \quad y_k = g_{k+1} - g_k,$$

donc

$$\begin{aligned} s_k &= B_{k+1} y_k \\ &= (B_k + a_k u_k u_k^T + b_k v_k v_k^T) y_k, \end{aligned} \quad (3.37)$$

par suite

$$a_k u_k u_k^T y_k + b_k v_k v_k^T y_k = s_k - B_k y_k.$$

Un choix évident pour satisfaire cette équation est de prendre

$$u_k = s_k, \quad v_k = B_k y_k, \quad a_k u_k^T y_k = 1, \quad b_k v_k^T y_k = -1,$$

**CHAPITRE 3. MÉTHODES ITÉRATIVES D'OPTIMISATION
SANS CONTRAINTES**

d'où

$$B_{k+1} = B_k + \frac{s_k s_k^T}{s_k^T y_k} - \frac{B_k y_k y_k^T B_k}{y_k^T B_k y_k} \quad (3.38)$$

Remarque 3.5.1 *Le résultat suivant montre que sous certaines conditions, la formule (3.38) conserve la définie positivité des matrices B_k .*

Théorème 3.5.2 *On considère la méthode définie par*

$$\begin{cases} x_{k+1} = x_k + \lambda_k d_k, \\ d_k = -B_k g_k, \end{cases}$$

où λ_k optimal, $B_0 > 0$ est donnée ainsi que x_0 , alors les matrices B_k sont définies positives.

Théorème 3.5.3 *Appliqué à une forme quadratique f , l'algorithme DFP décrit par la relation*

$$B_{k+1} = B_k + \frac{s_k s_k^T}{s_k^T y_k} - \frac{B_k y_k y_k^T B_k}{y_k^T B_k y_k},$$

engendre des directions conjuguées d_1, d_2, \dots, d_k vérifiant

$$d_i^T H d_j = 0, \quad 1 \leq i \leq j \leq k, \quad (3.39)$$

$$B_{k+1} H d_i = d_i, \quad 1 \leq i \leq k. \quad (3.40)$$

La méthode **DFP** se comporte donc dans le cas quadratique, comme une méthode de directions conjuguées. On peut aussi remarquer qu'on a pour $k = n - 1$ la relation

$$B_{n+1} H d_i = d_i, \quad i = 1, \dots, n - 1.$$

Et comme les d_i sont linéairement indépendants (car mutuellement conjugués) on en déduit que $B_{n+1} = H^{-1}$.

Avantages :

1-Pour des fonctions quadratiques (avec une recherche linéaire exacte) :

- L'algorithme converge dans au plus n étapes avec $B_{n+1} = H^{-1}$.
- Elles engendrent des directions conjuguées.

2-Pour les fonctions quelconques :

-La matrice B_k reste définie positive, ce qui est nécessaire pour que la direction soit une direction de descente.

Inconvénients :

-La méthode DFP est sensible à la précision de la recherche linéaire.

3.5.3 Méthode de Broyden, Fletcher, Goldfarb et Shanno (BFGS)

La formule de mise à jour de Broyden, Fletcher, Goldfarb et Shanno (**BFGS**) est une formule de correction de rang deux, qui s'obtient à partir de la formule DFP en intervertissant les rôles de s_k et y_k . La formule obtenue permet de mettre à jour une approximation B_k de Hessien lui même et non de son inverse comme dans le cas de la méthode DFP. On exigera que posée dans les mêmes propriétés, à savoir B_{k+1} reste définie positive si B_k l'est et bien sur l'équation d'approximation de quasi-Newton doit être vérifiée, c'est à dire

$$B_{k+1}s_k = y_k.$$

On obtient donc

$$B_{k+1} = B_k + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k} - \frac{B_k s_k s_k^T B_k}{s_k^T B_k s_k} \quad (3.41)$$

1-Notons que la direction d_k est obtenue par une résolution d'un système linéaire. En particulier la mise à jour de B_k est faite directement sur le facteur de Cholesky C_k où $B_k = C_k C_k^T$ ce qui ramène le calcul de d_k au même coût que pour la formule de DFP.

2-La méthode BFGS possède les mêmes propriétés que la méthode DFP dans le cas quadratique. Les directions engendrées sont conjuguées. Cette méthode est reconnue comme étant beaucoup moins sensible que la méthode DFP aux imprécisions dans la recherche linéaire, du point de vue de vitesse de convergence. Elle est donc tout à fait adaptée quand la recherche linéaire est faite de façon économique, avec par exemple la règle de Goldstein ou la règle de wolfe et Powell.

3-La relation (3.41) permet de construire une approximation de la matrice Hessienne elle même (et non pas son inverse).

En effet : Posons

$$C_k = \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k} - \frac{B_k s_k s_k^T B_k}{s_k^T B_k s_k}. \quad (3.42)$$

Nous avons

$$H_{k+1} = [B_{k+1}]^{-1} = [B_k + C_k]^{-1}.$$

Par application de la formule de Sherman-Morrison-Woodbury suivante

$$(A + ab^T)^{-1} = A^{-1} - \frac{A^{-1}ab^T A^{-1}}{1 + b^T A^{-1}a}. \quad (3.43)$$

**CHAPITRE 3. MÉTHODES ITÉRATIVES D'OPTIMISATION
SANS CONTRAINTES**

Où A est une matrice inversible, et b est un vecteur de \mathbb{R}^n , et en supposant que $b^T A^{-1} a \neq -1$, alors on a

$$H_{k+1} = [B_{k+1}]^{-1} = [B_k + C_k]^{-1} = \left[B_k + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k} - \frac{B_k s_k s_k^T B_k}{s_k^T B_k s_k} \right]^{-1}.$$

Posons

$$A = B_k + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k}, \quad a = -\frac{B_k s_k}{s_k^T B_k s_k}, \quad b^T = s_k^T B_k,$$

donc

$$H_{k+1} = \left[B_k + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k} \right]^{-1} + \frac{\left[B_k + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k} \right]^{-1} \frac{B_k s_k}{s_k^T B_k s_k} s_k^T B_k \left[B_k + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k} \right]^{-1}}{1 - s_k^T B_k \left[B_k + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k} \right]^{-1} \frac{B_k s_k}{s_k^T B_k s_k}}, \quad (3.44)$$

on doit calculer $\left[B_k + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k} \right]^{-1}$ pour cela on applique la formule de Sherman-Morrison-Woodbury une deuxième fois, on pose :

$$A = B_k, \quad a = \frac{y_k}{y_k^T s_k}, \quad b^T = y_k^T$$

$$\begin{aligned} \left[B_k + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k} \right]^{-1} &= [B_k]^{-1} - \frac{[B_k]^{-1} \frac{y_k}{y_k^T s_k} y_k^T [B_k]^{-1}}{1 + y_k^T [B_k]^{-1} \frac{y_k}{y_k^T s_k}} \\ &= [B_k]^{-1} - \frac{[B_k]^{-1} y_k y_k^T [B_k]^{-1}}{y_k^T s_k + y_k^T [B_k]^{-1} y_k}. \end{aligned}$$

Remplaçons cette dernière dans la formule (3.44) et d'après un calcul on obtient

$$\begin{aligned} H_{k+1} &= [B_{k+1}]^{-1} \\ &= [B_k]^{-1} + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k} - \frac{[B_k]^{-1} s_k s_k^T [B_k]^{-1}}{s_k^T [B_k]^{-1} s_k} \\ &= H_k + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k} - \frac{H_k s_k s_k^T H_k}{s_k^T H_k s_k}. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Algorithme de Broyden, Fletcher, Goldfarb et Shanno

1. Choisir x_0 et H_0 définie positive quelconque (par exemple $H_0 = I$)
2. A l'itération k , calculer la direction de déplacement

$$d_k = -H_k^{-1} \nabla f(x_k),$$

déterminer le pas optimal λ_k et poser

$$x_{k+1} = x_k + \lambda_k d_k$$

3. Poser $s_k = \lambda_k d_k$ et $y_k = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)$ puis calculer

$$H_{k+1} = H_k + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k} - \frac{H_k s_k s_k^T H_k}{s_k^T H_k s_k} \quad (3.46)$$

4. Faire $k \leftarrow k + 1$. Retourner en 2 sauf si le critère d'arrêt est vérifié.
Comme critère d'arrêt on retiendra par exemple $\|g_{k+1}\| < \epsilon$.

3.6 La convergence d'une famille de trois paramètres des méthodes du gradient conjugué

Considérons le problème d'optimisation sans contrainte (P) suivant

$$(P) : \min \{f(x) : x \in \mathbb{R}^n\},$$

où f est une fonction différentiable.

Les méthodes du gradient conjugué sont considérées comme des méthodes importantes pour résoudre le problème (P) , particulièrement pour les problèmes à grande taille. Ces méthodes suivent le schéma itératif suivant :

$$x_{k+1} = x_k + \lambda_k d_k, \quad (3.47)$$

la direction d_k est définie par la formule de récurrence suivante :

$$d_k = \begin{cases} -g_1 & \text{si } k = 1, \\ -g_k + \beta_k d_{k-1} & \text{si } k \geq 2, \end{cases} \quad (3.48)$$

où $g_k = \nabla f(x_k)$; λ_k est la longueur de direction obtenue par une recherche linéaire unidimensionnelle et β_k est un scalaire.

**CHAPITRE 3. MÉTHODES ITÉRATIVES D'OPTIMISATION
SANS CONTRAINTES**

Les λ_k vérifient les relations de wolfe fortes suivantes :

$$f(x_k + \lambda_k d_k) \leq f(x_k) + \omega_1 \lambda_k d_k^T g_k, \quad (3.49)$$

$$|d_k^T g_{k+1}| \leq -\omega_2 d_k^T g_k, \quad (3.50)$$

avec $0 < \omega_1 < \omega_2 < 1$.

Le scalaire β_k est choisi de telle sorte que la méthode (3.47) (3.48) est réduite á la méthode du gradient conjugué linéaire dans le cas quand o f est quadratique convexe et la recherche linéaire est exacte.

Pour des fonctions générales, cependant, de différentes formules pour le scalaire β_k résultent des méthodes du gradient conjugué.

On peut citer par exemple Fletcher-Reeves (*FR*), Polak-Ribiere-Polyak (*PRP*), et Hestenes-Stiefel (*HS*) (voir [23,41,43,28]) lesquelles sont données par

$$\beta_k^{FR} = \frac{\|g_k\|^2}{\|g_{k-1}\|^2}, \quad (3.51)$$

$$\beta_k^{PRP} = \frac{g_k^T y_{k-1}}{\|g_{k-1}\|^2}, \quad (3.52)$$

$$\beta_k^{HS} = \frac{g_k^T y_{k-1}}{d_{k-1}^T y_{k-1}}, \quad (3.53)$$

respectivement, où $\|\cdot\|$ signifie la norme euclidienne et $y_{k-1} = g_k - g_{k-1}$.

Les propriétés de convergence de ces méthodes ont été étudiées dans beaucoup de références, par exemple [1,20,14,26,27,33,39,43,48].

Cependant, si la condition imposée à ω_2 dans (3.50) est seulement $\omega_2 < 1$, ni l'une ni l'autre des trois méthodes du gradient conjugué non-linéaires citées ci-dessus ne peuvent assurer la descente avec la recherche linéaire de Wolfe forte (3.50), même si f est quadratique (voir [5,14]).

La méthode de descente conjuguée (*CD*) de Fletcher [23], où

$$\beta_k^{CD} = \frac{\|g_k\|^2}{-d_{k-1}^T g_{k-1}}, \quad (3.54)$$

assure une direction de descente pour des fonctions générales qui satisfont la recherche linéaire de Wolfe forte (3.49) (3.50) avec $\omega_2 < 1$.

**CHAPITRE 3. MÉTHODES ITÉRATIVES D'OPTIMISATION
SANS CONTRAINTES**

Mais la convergence globale de la méthode de CD est prouvée (voir[15]) seulement pour le cas de la recherche linéaire qui satisfait la condition de wolfe (3.49) et

$$\omega_2 d_k^T g_k \leq g(x_k + \lambda_k d_k)^T d_k \leq 0. \quad (3.55)$$

Pour toute constante positive ω_2 , un exemple dans [15] montre que la méthode de descente conjuguée avec λ_k satisfaisant (P) et

$$\omega_2 d_k^T g_k \leq g(x_k + \lambda_k d_k)^T d_k \leq -\hat{\omega}_2 d_k^T g_k, \quad (3.56)$$

ne converge pas.

Dai et Yuan [13] ont proposé une nouvelle méthode du gradient conjugué, dans laquelle

$$\beta_k^{DY} = \frac{\|g_k\|^2}{d_{k-1}^T y_{k-1}}. \quad (3.57)$$

Une propriété remarquable de la méthode de DY fournit une direction de descente à chaque itération et converge globalement à condition que λ satisfait la condition de Wolfe (3. 49), à savoir :

$$g(x_k + \lambda_k d_k)^T d_k \geq \omega_2 d_k^T g_k. \quad (3.58)$$

Quelques autres propriétés de la méthode de DY ont été exposées dans les références [6,16,18,19].

Dans [18], Dai et Yuan proposent une famille d'un paramètre entre deux méthodes (FR) et (DY) pour le scalaire β_k défini de la manière suivante :

$$\beta_k = \frac{\|g_k\|^2}{\lambda \|g_{k-1}\|^2 + (1 - \lambda) d_{k-1}^T y_{k-1}},$$

où $\lambda \in [0; 1]$ est un paramètre. Ils établissent que la famille d'un paramètre converge globalement si les paramètres $\omega_2, \hat{\omega}_2$ dans les conditions de wolfe relaxée (3. 49) et (3. 56), et λ sont tels que :

$$\omega_2 - 1 \leq (\omega_2 + \hat{\omega}_2) \lambda \leq 1. \quad (3.59)$$

Nazareth a considéré les formules FR, PRP, HS , et DY comme les quatre compétiteurs principaux pour le scalaire β_k , et a proposé une famille

de deux paramètres des méthodes du gradient conjugué de la manière suivante :

$$\beta_k = \frac{\lambda_k \|g_k\|^2 + (1 - \lambda_k) g_k^T y_{k-1}}{\mu_k \|g_{k-1}\|^2 + (1 - \mu_k) d_{k-1}^T y_{k-1}},$$

où $\lambda_k, \mu_k \in [0; 1]$.

Dans cette section, on propose une famille de trois paramètres des méthodes du gradient conjugué, qui inclue les méthodes du gradient conjugué non linéaire mentionnés ci-dessus, et nous étudierons la propriété de descente de la famille de trois paramètres ainsi obtenue. Nous prouverons, si le critère de relancement de Powell [41] est utilisé que la famille de trois paramètres avec la recherche linéaire de Wolfe forte produit une direction de descente à chaque itération.

Une famille de trois paramètres des méthodes du gradient conjugué

Dans [32], Liu et Storey ont présenté la formule suivante pour le scalaire β_k :

$$\beta_k^{LS} = \frac{g_k^T y_{k-1}}{-d_{k-1}^T g_{k-1}}. \quad (3.60)$$

On observe d'après les formules (3. 53) et (3. 60) que la prochaine direction d_{k+1} dans (3. 47) est indépendante de la longueur de d_k quand β_k prend la forme de (3. 53) ou (3. 60).

Beaucoup d'auteurs ont présenté d'autres choix pour le scalaire β_k , par exemple Buckley et Lenir, Daniel [21], Gilbert et Nocedal [26], Qi et Al [43], Shanno [45], et Touati-Ahmed et Storey [47]. On observe alors que les formules (3. 51) (3. 54) (3. 57) et (3. 60) partagent deux numérateurs et trois dénominateurs, nous pouvons utiliser les combinaisons de ces numérateurs et dénominateurs afin d'obtenir la famille de trois-paramètres suivante :

$$\beta_k = \frac{(1 - \lambda_k) \|g_k\|^2 + \lambda_k g_k^T y_{k-1}}{(1 - \mu_k - \omega_k) \|g_{k-1}\|^2 + \mu_k d_{k-1}^T y_{k-1} - \omega_k d_{k-1}^T g_{k-1}}, \quad (3.61)$$

où $\lambda_k \in [0, 1]$, $\mu_k \in [0, 1]$, $\omega_k \in [0, 1 - \mu_k]$ sont des paramètres.

Puisque

**CHAPITRE 3. MÉTHODES ITÉRATIVES D'OPTIMISATION
SANS CONTRAINTES**

$$g_k^T y_{k-1} = \|g_k\|^2 - g_k^T g_{k-1},$$

et

$$d_{k-1}^T g_{k-1} = \beta_{k-1} d_{k-2}^T g_{k-1} - \|g_{k-1}\|^2,$$

on peut écrire la formule (3.61) ainsi

$$\beta_k = \frac{\|g_k\|^2 - \lambda_k g_k^T g_{k-1}}{\|g_{k-1}\|^2 + \mu_k g_k^T d_{k-1} - (\mu_k + \omega_k) \beta_{k-1} d_{k-2}^T g_{k-1}}. \quad (3.62)$$

Si la fonction objective est quadratique convexe et λ la minimisation unidimensionnelle exacte, la formule ci-dessus pour β_k se réduit clairement à la formule de *FR* (3.51), dans ce cas nous avons

$$g_k^T d_{k-1} = 0, \quad (3.63)$$

et

$$g_k^T g_{k-1} = 0. \quad (3.64)$$

Cependant, pour des fonctions générales, les relations (3.63) et (3.64) n'ont pas besoin d'être satisfaites.

Par conséquent les méthodes (3.47), (3.48) et (3.62) avec des valeurs différentes de λ_k , μ_k , ω_k forment une famille de trois paramètres du gradient conjugué non-linéaire.

Il est facile de voir de (3.61) que la famille de trois paramètres inclut six méthodes simples du gradient conjugué non-linéaire qui existes déjà.

Si $\omega_k = 0$, alors la famille se réduit à la famille des méthodes de deux paramètres du gradient conjugué [37].

En outre, si $\lambda_k = 0$, $\mu_k = \mu$, $\omega_k = 0$, alors la famille se réduit à la famille d'un paramètre [18].

Par conséquent la famille d'un paramètre et la famille de deux paramètres sont des cas particuliers de la famille de trois paramètres.

En outre, les méthodes hybrides dans [13,26,29] peuvent être également considérées comme des cas particuliers de familles de trois paramètres.

Par exemple, pour améliorer la propriétés de convergence de la Méthode de *FR* et les bonnes exécutions numériques de la méthode de *PRP*, Hu et

Storey[29] ont proposé une méthode hybride de la manière suivante :

$$\beta_k = \max \{0; \min \{\beta_k^{PRP}; \beta_k^{FR}\}\}. \quad (3.65)$$

On peut facilement voir cela, la formule (3. 65) correspond à (3. 62)

$$\lambda_k = \begin{cases} \frac{\|g_k\|^2}{g_k^T g_{k-1}} & \text{si } g_k^T g_{k-1} \geq \|g_k\|^2, \\ 1 & \text{si } g_k^T g_{k-1} \in (0, \|g_k\|^2) \\ 0 & \text{si } g_k^T g_{k-1} \leq 0, \end{cases},$$

$$\mu_k \equiv 0, \quad \omega_k \equiv 0.$$

3.6.1 Critère de relancement de Powell et propriété de descente

Si nous avons besoin seulement que $\omega_2 < 1$, quelques méthodes comme *FR*, *PRP*, et *HS* avec la recherche linéaire de Wolfe forte peuvent produire des directions de recherche qui ne sont pas de descente même si la fonction objective est quadratique. Ainsi, de particulières attentions doivent être données au problème suivant : comment garder la propriété de descente des méthodes du gradient conjugué ?

Dans cette section, nous prouverons cela, si la recherche linéaire de Wolfe peut garantir la propriété de descente de chaque direction de recherche. Dans [41], Powell a suggéré le relancement $d_k = -g_k$ si la condition suivante est satisfaite :

$$|g_k^T g_{k-1}| \leq \xi \|g_k\|^2, \quad (3.66)$$

pour traiter la méthode du gradient conjugué de trois paramètres de Beale's. où $\xi > 0$ est une certaine constante positive.

En fait, pour les méthodes du gradient conjugué classique, si la fonction est quadratique convexe et la recherche linéaire est exacte alors la relation (3.64) n'implique aucun relancement.

Dans les réalisations des méthodes du gradient conjugué, le critère de relancement de Powell a été employé par beaucoup d'auteurs, par exemple Buckley et Lenir et Khoda et Al [31].

Pour montrer l'importance du critère de relancement de Powell en gardant la propriété de descente des méthodes du gradient conjugué, considérons d'abord la méthode de *HS* comme exemple d'illustration.

**CHAPITRE 3. MÉTHODES ITÉRATIVES D'OPTIMISATION
SANS CONTRAINTES**

A cette fin, nous définissons :

$$r_k = \frac{-g_k^T d_k}{\|g_k\|^2}. \quad (3.67)$$

Il est évident que d_k soit une direction de descente si et seulement si $r_k > 0$. Pour la méthode de *HS* (3. 47), (3. 48) et (3.53), des calculs directs donnent

$$r_k = \frac{-g_{k-1}^T d_{k-1}}{d_{k-1}^T y_{k-1}} \left[1 - \frac{g_k^T g_{k-1}}{\|g_k\|^2} \frac{g_k^T d_{k-1}}{g_{k-1}^T d_{k-1}} \right]. \quad (3.68)$$

Supposons que d_{k-1} est une direction de descente dans l'étape $(k-1)$ et la recherche linéaire satisfait les conditions de Wolfe fortes (3.49), (3.50).

Alors nous avons $g_{k-1}^T d_{k-1} < 0$ et $d_{k-1}^T y_{k-1} > 0$.

En outre, il suit de (3.50) que :

$$\left| \frac{g_k^T d_{k-1}}{g_{k-1}^T d_{k-1}} \right| \leq \omega_2. \quad (3.69)$$

Par conséquent d'après (3. 68), si le critère de relancement de Powell (3. 67) est employé, la méthode de HS peut assurer la propriété de descente de la prochaine direction d_k , à condition que le paramètre ξ et ω_2 satisfont

$$\xi \omega_2 < 1. \quad (3.70)$$

Pour la famille de trois paramètres du gradient conjugué, nous pouvons prouver le théorème général suivant.

Théorème 3.6.1 *Considérons n'importe quelle méthode de la forme (3. 47), (3.48) et (3.61) avec $\lambda_k \in [0, 1]$, $\mu_k \in [0, 1]$, $\omega_k \in [0, 1 - \mu_k]$ et la recherche de wolfe forte (3.50), ainsi que le critère de relancement de Powell (3.66). Si de plus les paramètres ξ et ω_2 satisfont*

$$(1 + \xi) \omega_2 \leq \frac{1}{2}, \quad (3.71)$$

alors pour tout $k \geq 1$ on a

$$0 < r_k < \frac{1}{1 - (1 + \xi) \omega_2}. \quad (3.72)$$

**CHAPITRE 3. MÉTHODES ITÉRATIVES D'OPTIMISATION
SANS CONTRAINTES**

Preuve. Supposons que (3.66) soit satisfaite pour tout k . Nous allons montrer (3.72) par recurrence.

Notant $d_1 = -g_1$ alors $r_1 = 1$, nous remarquons que (3.72) est satisfaite pour $k = 1$.

Nous supposons maintenant que (3.72) est satisfaite pour $k - 1$, on a

$$0 < r_{k-1} < \frac{1}{1 - (1 + \xi)\omega_2}, \quad (3.73)$$

d'après (3.48) et (3.62) et par un calcul direct on trouve

$$r_k = 1 - \left[1 - \lambda_k \frac{g_k^T g_{k-1}}{\|g_k\|^2} \right] b_k, \quad (3.74)$$

où

$$b_k = \frac{g_k^T d_{k-1}}{(1 - \mu_k - \omega_k) \|g_{k-1}\|^2 + \mu_k g_k^T d_{k-1} - (\mu_k + \omega_k) g_{k-1}^T d_{k-1}}.$$

On utilise (3.50), (3.73) et le fait que $\mu_k, \omega_k \geq 0$ dans (3.74), on obtient

$$\begin{aligned} b_k &\leq \frac{-\omega_2 g_{k-1}^T d_{k-1}}{(1 - \mu_k - \omega_k) \|g_{k-1}\|^2 - \omega_2 \mu_k g_{k-1}^T d_{k-1} - (\mu_k + \omega_k) g_{k-1}^T d_{k-1}} \\ &= \frac{\omega_2 r_{k-1}}{(1 - \mu_k - \omega_k) + [(1 + \omega_2) \mu_k + \omega_k] r_{k-1}} \\ &< \frac{\omega_2 [1 - (1 + \xi)\omega_2]^{-1}}{(1 - \mu_k - \omega_k) + [(1 + \omega_2) \mu_k + \omega_k] [1 - (1 + \xi)\omega_2]^{-1}} \\ &\leq \frac{\omega_2}{[1 - (1 + \xi)\omega_2] + (2 + \xi)\omega_2 \mu_k + (1 + \xi)\omega_2 \omega_k} \\ &\leq \frac{\omega_2}{1 - (1 + \xi)\omega_2}. \\ &\leq \frac{\omega_2}{1 - (1 + \xi)\omega_2}, \end{aligned} \quad (3.75)$$

de la même manière on établit

$$b_k > -\frac{\omega_2}{1 - (1 + \xi)\omega_2}, \quad (3.76)$$

donc de (3.74), (3.75), (3.76), (3.66), (3.71) et le fait que $\lambda_k \in [0, 1]$, on obtient

$$0 \leq 1 - \frac{(1 + \xi)\omega_2}{1 - (1 + \xi)\omega_2} < r_k < 1 + \frac{(1 + \xi)\omega_2}{1 - (1 + \xi)\omega_2} = \frac{1}{1 - (1 + \xi)\omega_2}, \quad (3.77)$$

donc (3.72) satisfaite pour tout $k \geq 1$. ■

Dans les calculs, Powell [41] a proposé que la valeur de ξ dans (3.66) est $\xi = 0,2$. Nous devons préciser que la condition (3.71) permet des valeurs relativement grandes de ξ et par conséquent le point courant x_k est instable parce que le paramètre ω_2 dans (3.50) prend généralement une petite valeur, normalement $\omega_2 = 0,1$.

Propriétés de convergence

Pour la convergence, nous proposons que $g_k \neq 0$ pour tout k . car autrement on a un point stationnaire.

Nous supposons aussi que $\beta_k \neq 0$ pour tout k . car la direction dans (3.48) est réduite à $-g_k$ si $\beta_k = 0$, alors le nouveau point de départ reste stationnaire et nous pouvons prendre $x_{\bar{k}}$ où \bar{k} est le plus grand indice pour lequel $\beta_k = 0$ et où la convergence faible suivante :

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0,$$

est satisfaite.

On suppose dans tout ce qui suit que la supposition (3.1) est vérifiée.

Pour donner le premier résultat de convergence pour la famille de trois paramètres nous avons besoin du lemme suivant :

Lemme 3.6.1 *supposons que x_1 est un point de départ pour que la supposition (3.1) soit satisfaite.*

Considérons la méthode de la forme (3.47). (3.48) où d_k est une direction de descente et λ_k satisfait les conditions de Wolfe faible (3.49) et (3.58). S'il existe une suite ϕ_k positive telle que

$$|\beta_k| \leq \frac{\phi_k}{\phi_{k-1}}, \tag{3.78}$$

et

$$\sum_{k \geq 1} \frac{\|g_k\|^2}{\phi_k^2} = +\infty, \tag{3.79}$$

alors la méthode converge dans le sens suivant

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0. \tag{3.80}$$

**CHAPITRE 3. MÉTHODES ITÉRATIVES D'OPTIMISATION
SANS CONTRAINTES**

Par le lemme 3.6.1, nous pouvons trouver le résultat général suivant pour la famille de trois paramètres du gradient conjugué non-linéaire.

Théorème 3.6.2 *supposons que x_1 est un point de départ pour que la supposition (3.1) soit satisfaite.*

Pour toute méthode du type (3.47), (3.48) et (3.61) avec $\lambda_k \in [0, 1]$, $\mu_k \in [0, 1]$ et $\omega_k \in [0, 1 - \mu_k]$ et la recherche linéaire de Wolfe forte (3.49) (3.50) ainsi que le critère de relancement de Powell (3.66).

Notons par $\iota_k = |\beta_k / \beta_k^{FR}|$.

Si (3.71) est vérifiée et si les paramètres λ_k , μ_k , et ω_k sont tels que

$$\prod_{j=2}^k \iota_j \leq r\sqrt{k}, \quad (3.81)$$

pour une certaine constante $r > 0$ et tout $k \geq 2$ alors la méthode converge au sens faible (3.80).

Preuve. Puisque les paramètres ξ et ω_2 satisfont (3.71), nous avons par le théorème 3.6.1 que (3.72) est satisfaite pour tout k , ceci implique que chaque d_k est une direction de descente.

Définissons

$$\phi_k = \left(\prod_{j=2}^k \iota_j \right) \|g_k\|^2. \quad (3.82)$$

D'après (3.51) et la définition de ι_k , on peut écrire que

$$|\beta_k| = \frac{\phi_k}{\phi_{k-1}}. \quad (3.83)$$

D'autre part (3.18), (3.81) et (3.82) impliquent que

$$\frac{\|g_k\|^2}{\phi_k^2} \geq \frac{1}{r^2 \bar{\gamma}^2 k}, \quad (3.84)$$

d'où (3.79).

Par conséquent par le lemme 3.6.1, on obtient (3.80). ■

Maintenant nous discutons quelques choix spéciaux des paramètres λ_k , μ_k , et ω_k qui satisfont la condition (3.81).

En utilisant le théorème ci-dessus, nous pouvons déduire encore la convergence globale des méthodes hybrides.

**CHAPITRE 3. MÉTHODES ITÉRATIVES D'OPTIMISATION
SANS CONTRAINTES**

Par exemple, pour la méthode hybride (3.65), nous avons $0 \leq \iota_k \leq 1$, qui indique que la relation (3.81) est satisfaite avec $r = 1$. Par conséquent considérons (3.80) et supposons que $\prod_{j=2}^{k-1} \iota_k \leq r\sqrt{k-1}$ pour un certain $k \geq 3$.

Alors à l'itération de k -ième, (3.81) est vérifiée :

$$\iota_k \leq \sqrt{1 + \frac{1}{k-1}}. \quad (3.85)$$

Pour $\lambda_k = \mu_k = \omega_k = 0$, β_k est réduit à β_k^{FR} , et par conséquent $\iota_k = 1$. Ainsi même si $\iota_k = 1$ pour k grand, nous pouvons voir de la relation (3.85) qu'il existe un certain intervalle dans $[0, 1]$ pour chacun des paramètres λ_k , μ_k , et ω_k , tels que (3.81) soit vérifiée.

Généralement il existe les choix de λ_k , μ_k , et ω_k , qui satisfont la condition (3.81) (comme cité ci-dessus), cette restriction peut réduire les intervalles admissibles pour $\lambda_k \in [0, 1]$, $\mu_k \in [0, 1]$ et $\omega_k \in [0, 1 - \mu_k]$.

Généralement, pour un certain k la valeur de ι_k peut être moins de 1, et en conséquence ceci permettra à ι_k de prendre une grande valeur. Par exemple, si l'étape $\|x_k - x_{k-1}\|$ est très petite et λ_k est proche de 1 à une certaine itération loin de la solution, alors ι_k peut être plus petite que 1.

Un autre point qui devrait être précisé ici, nous pouvons également agrandir l'intervalle admissible pour λ_k , μ_k , et ω_k , par la situation (réglage) de r dans (3.81) a une grande valeur.

L'inégalité (3.81) suggère une seule possibilité pour choisir λ_k , μ_k , et ω_k , à savoir que la valeur absolue du côté droit de (3.61) est aussi petite que possible.

Par le lemme 3.6.1, nous pouvons également prouver le résultat de convergence suivant.

Théorème 3.6.3 *Supposons que x_1 est un point de départ pour la supposition (3.1) est satisfaite.*

Considérons toute méthode sous la forme (3.47), (3.48) et (3.61) avec $\lambda_k \in [0, 1]$, $\mu_k \in [0, 1]$ et $\omega_k \in [0, 1 - \mu_k]$, avec la recherche linéaire de Wolfe forte (3.49) – (3.50) et le critère de relancement de Powell (3.66).

Si (3.71) satisfait, et si les paramètres λ_k , μ_k , et ω_k sont tels que :

$$0 \leq \lambda g_k g_{k-1}^T \leq \|g_k\|^2, \quad (3.86)$$

et

$$\mu_k d_{k-1}^T g_k - \omega_k \beta_{k-1} d_{k-2}^T g_{k-1} \geq -\lambda_{k-1} g_{k-1}^T g_{k-2}, \quad (3.87)$$

pour tout $k \geq 2$, alors la méthode converge au sens faible (3.80) .

**CHAPITRE 3. MÉTHODES ITÉRATIVES D'OPTIMISATION
SANS CONTRAINTES**

Preuve. Puisque les paramètres ξ et ω_2 satisfont (3.71), nous avons par le théorème 3.6.1 que (3.72) est satisfaite pour tout k , ce qui implique que chaque d_k est une direction de descente.

De (3.86), (3.87) avec k remplacé par $k + 1$, et la formule équivalente (3.62) de β_k , on voit que la relation (3.78) est satisfaite avec

$$\phi_k = (1 - \mu_{k+1} - \omega_{k+1}) \|g_k\|^2 + \mu_{k+1} d_k^T y_k - \omega_{k+1} d_k^T g_k, \quad (3.88)$$

en utilisant (3.50) et (3.72) dans (3.88), on peut prouver que

$$\begin{aligned} \phi_k &\leq [(1 - \mu_{k+1} - \omega_{k+1}) + (1 + \omega_2) \mu_{k+1} r_k + \omega_{k+1} r_k] \|g_k\|^2 \quad (3.89) \\ &\leq [1 + (2 + \omega_2) (1 - (1 + \xi) \omega_2)^{-1}] \|g_k\|^2 \\ &= \frac{3 - \xi \omega_2}{1 - (1 + \xi) \omega_2} \|g_k\|^2. \end{aligned}$$

Pour tout $\mu_{k+1} \in [0, 1]$ et $\omega_{k+1} \in [0, 1 - \mu_{k+1}]$.

La relation ci-dessus et (3.80) implique

$$\sum_{k \geq 1} \frac{\|g_k\|^2}{\phi_k^2} = +\infty,$$

ainsi, par le lemme 3.6.1, on a (3.83).

Si $\xi \leq 1$, la deuxième inégalité dans (3.89) découle clairement, puisque (3.66) et le fait que $\lambda_k \in [0, 1]$ donnent

$$\lambda_k g_k^T g_{k-1} \leq |g_k^T g_{k-1}| \leq \xi \|g_k\|^2 \leq \|g_k\|^2.$$

Il est facile de voir que la méthode *FR* ($\lambda_k = \mu_k = \omega_k = 0$) satisfait les deux conditions (3.86) et (3.87). ■

Cependant, pour d'autres méthodes il n'est pas clair que ces conditions soient vérifiées tant que ces dernières dépendent de l'ordre des points produits par les méthodes. Par exemple, dans le cas extrême $g_k^T g_{k-1} < 0$, $g_k^T d_{k-1} < 0$ et $\beta_{k-1} d_{k-2}^T g_{k-1} > 0$, nous devons choisir $\lambda_k = \mu_{k+1} = \omega_{k+1} = 0$. Si $g_k^T g_{k-1} > 0$, il existe toujours des intervalles admissibles pour λ_k , μ_{k+1} et ω_{k+1} .

Le lemme suivant est dû à Gilbert et de Nocedal [26]

Lemme 3.6.2 *Supposons que x_1 est un point de départ pour que la supposition (3.1) soit satisfaite.*

**CHAPITRE 3. MÉTHODES ITÉRATIVES D'OPTIMISATION
SANS CONTRAINTES**

considérons que la méthode sous la forme (3.47) – (3.48) avec les trois propriétés suivantes

(i) $\beta_k > 0$

(ii) les conditions de Wolfe faible (3.49) et (3.58), et la condition de descente suffisante

$$g_k^T d_k < -c \|g_k\|^2, \text{ où } c > 0,$$

pour tout k et une certaine constante positive c .

(iii) Il existe des constantes $b > 1$ et $\lambda > 0$ tels que $|\beta_k| \leq b$ pour tout k , et si $\|x_k - x_{k-1}\| \leq \lambda$ alors $|\beta_k| \leq (2b)^{-1}$.

Alors la méthode converge au sens faible (3.80).

Par le lemme 3.6.2, nous pouvons prouver le résultat général suivant pour la famille de trois paramètres du gradient conjugué non-linéaire.

Théorème 3.6.4 *Supposons que x_1 est un point de départ pour que la supposition (3.1) soit satisfaite. Considérons que la méthode dans la forme (3.47), (3.48) et (3.61), où $\lambda_k \in [0, 1]$, $\mu_k \in [0, 1]$ et $\omega_k \in [0, 1 - \mu_k]$, où λ satisfait les conditions de Wolfe forte (3.49) – (3.50), et où le critère de relancement*

$$-\xi \|g_k\|^2 \leq g_k^T g_{k-1} \leq \|g_k\|^2, \tag{3.90}$$

est utilisé.

Si les paramètres sont tels que

$$(1 + \xi) \omega_2 < \frac{1}{2}, \tag{3.91}$$

et

$$\lambda_k \geq 1 - c_1 \|x_k - x_{k-1}\|,$$

où $c_1 > 0$ est constante, la méthode converge au sens faible (3.80).

Preuve. Supposons que

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| \neq 0,$$

alors il existe une constante positive γ , telle que

$$\|g_k\| \geq \gamma, \forall k \geq 1. \tag{3.92}$$

En utilisant (3.90), (3.91) et (3.77) on obtient pour tout $k \geq 1$:

$$r_k \geq \frac{1 - 2(1 + \xi) \omega_2}{1 - (1 + \xi) \omega_2} = c_2,$$

**CHAPITRE 3. MÉTHODES ITÉRATIVES D'OPTIMISATION
SANS CONTRAINTES**

où r_k est donné dans (3.67). Ainsi les conditions de descente suffisantes sont satisfaites.

De (3.50), (3.70), (3.17), (3.18), (3.92) et le fait que $\lambda_k \leq 1$, on peut montrer que

$$\begin{aligned} |\beta_k| &\leq \frac{(c_1 \|g_k\|^2 + L \|g_k\|) \|x_k - x_{k-1}\|}{\|g_{k-1}\|^2 [(1 - \mu_k - \omega_k) + \mu_k (1 - \omega_2) c_2 + \omega_k c_2]} \\ &\leq \frac{(c_1 \|g_k\|^2 + L \|g_k\|) \|x_k - x_{k-1}\|}{c_2 \|g_{k-1}\|^2} \leq c_3 \|x_k - x_{k-1}\|, \end{aligned} \quad (3.93)$$

où

$$c_3 = \frac{c_1 \bar{\gamma}^2 + L \bar{\gamma}}{\gamma^2}.$$

la supposition (3.1) implique qu'il existe une constante positive ρ telle que

$$\|x\| \leq \rho, \quad \forall x \in \mathcal{L}, \quad (3.94)$$

$b = 2c_3\rho$ et $\lambda = (4c_3^2\rho)^{-1}$, de (3.93) et (3.94) on a

$$|\beta_k| \leq b,$$

et si

$$\|x_k - x_{k-1}\| \leq \lambda,$$

alors

$$|\beta_k| \leq (2b)^{-1}.$$

Ainsi la propriété (iii) est satisfaite.

En outre, (3.72) et (3.90) impliquent que $\beta_k \geq 0$.

Par conséquent les conditions du lemme 3.6.2 sont toutes satisfaites et donc on obtient (3.80). ■

Chapitre 4

Une famille de deux paramètres du gradient conjugué non linéaire

On expose dans ce chapitre la convergence globale d'une famille de deux paramètres des méthodes du gradient conjugué dans lesquelles la procédure de recherche linéaire de Wolfe forte est remplacée par une formule fixe de longueur de pas. En plus des résultats de convergence, nous présentons les résultats numériques pour les différentes méthodes du gradient conjugué non linéaire, qui sont développés par Sun et Zhang [46].

4.1 Introduction

Considérons le problème sans contrainte d'optimisation :

$$(P) \quad \min \{f(x) : x \in \mathbb{R}^n\}.$$

Où f est une fonction différentiable.

Les méthodes du gradient conjugué sont des méthodes largement utilisées pour résoudre le problème (P) particulièrement pour les problèmes à grande échelle. Ces méthodes sont de type itératifs, elles génèrent toutes une suite infinie de points de la manière suivante :

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k, \tag{4.1}$$

**CHAPITRE 4. UNE FAMILLE DE DEUX PARAMÈTRES DU
GRADIENT CONJUGUÉ NON LINÉAIRE**

la direction d_k est définie par la formule de récurrence suivante:

$$d_k = \begin{cases} -g_1 & \text{si } k = 1, \\ -g_k + \beta_k d_{k-1} \dots \dots \dots & \text{si } k \geq 2, \end{cases} \quad (4.2)$$

où

$$g_k = \nabla f(x_k), \quad (4.3)$$

α_k est un pas de discrétisation et β_k est un scalaire donné par les différentes formules. Plusieurs formules célèbres pour β_k sont données par :

$$\beta_k^{HS} = \frac{g_k^T y_{k-1}}{d_{k-1}^T y_{k-1}}, \quad (4.4)$$

$$\beta_k^{FR} = \frac{\|g_k\|^2}{\|g_{k-1}\|^2}, \quad (4.5)$$

$$\beta_k^{PRP} = \frac{g_k^T y_{k-1}}{\|g_{k-1}\|^2}, \quad (4.6)$$

$$\beta_k^{CD} = \frac{\|g_k\|^2}{-d_{k-1}^T g_{k-1}}, \quad (4.7)$$

$$\beta_k^{LS} = \frac{g_k^T y_{k-1}}{-d_{k-1}^T g_{k-1}}, \quad (4.8)$$

et

$$\beta_k^{DY} = \frac{\|g_k\|^2}{d_{k-1}^T y_{k-1}}, \quad (4.9)$$

où $y_{k-1} = g_k - g_{k-1}$.

Récemment, Dai et Yuan [11] ont proposé une famille de trois paramètres de méthodes des gradient conjugué.

La formule proposée est :

$$\beta_k = \frac{(1 - \lambda_k) \|g_k\|^2 + \lambda_k g_k^T y_{k-1}}{(1 - \mu_k - \omega_k) \|g_{k-1}\|^2 + \mu_k d_{k-1}^T y_{k-1} - \omega_k d_{k-1}^T g_{k-1}}, \quad (4.10)$$

avec : $\lambda_k \in [0, 1]$, $\mu_k \in [0, 1]$, $\omega_k \in [0, 1 - \mu_k]$.

CHAPITRE 4. UNE FAMILLE DE DEUX PARAMÈTRES DU GRADIENT CONJUGUÉ NON LINÉAIRE

Dans la mise en oeuvre de toute méthode du gradient conjugué, la longueur de pas α_k est souvent déterminée par une certaine recherche linéaire des conditions de Wolfe notamment

$$f(x_k + \alpha_k d_k) - f(x_k) \leq \delta \alpha_k g_k^T d_k, \quad (4.11)$$

$$g(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k \geq \sigma g_k^T d_k, \quad (4.12)$$

ou conditions de Wolfe fortes, à savoir (4.11) et

$$|g(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k| \leq -\sigma g_k^T d_k, \quad (4.13)$$

avec $0 < \delta < \sigma < 1$. Ces types de recherche linéaire impliquent un calcul étendu des valeurs de la fonction et du gradient, qui deviennent souvent une lourde charge pour les problèmes à grande échelle. Plus récemment, une formule simple pour la longueur de pas a été proposée par Sun et Zhang [46] pour les six méthodes du gradient conjugué, en prouvant la convergence globale de la famille Dai-Yuan lorsque $\lambda = 1$, et μ_k et ω_k sont constantes. Autrement dit, nous supposons que β_k est donné par

$$\beta_k = \frac{g_k^T y_{k-1}}{(1 - \mu - \omega) \|g_{k-1}\|^2 + \mu d_{k-1}^T y_{k-1} - \omega d_{k-1}^T g_{k-1}}. \quad (4.14)$$

4.2 Propriétés de convergence

Nous adoptons les hypothèses suivantes pour la fonction f .

Hypothèse 4.1

La fonction f est de classe LC^1 au voisinage de N de l'ensemble $L = \{x \in \mathbb{R}^n / f(x) \leq f(x_1)\}$, on suppose que L est borné, ici nous entendons par LC^1 , le gradient $\nabla f(x)$ est μ -lipschitzien continu, i.e, il existe $\mu > 0$ tel que

$$\|\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)\| \leq \mu \|x_{k+1} - x_k\| \text{ pour tout } x_{k+1}, x_k \in N \quad (4.15)$$

L'hypothèse 4.1 est suffisante pour la convergence globale de la méthode de PR et la méthode de CD, mais ne semble pas suffisante pour la convergence

**CHAPITRE 4. UNE FAMILLE DE DEUX PARAMÈTRES DU
GRADIENT CONJUGUÉ NON LINÉAIRE**

de la méthode FR, la méthode HS et la méthode de DY. Ainsi pour ces trois méthodes nous imposons une hypothèse plus forte qui est la suivante :

Hypothèse 4.2

La fonction f est LC^1 et fortement convexe dans un voisinage N . En d'autres termes il existe $\tau > 0$ tel que

$$[\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)]^T (x_{k+1} - x_k) \geq \tau \|x_{k+1} - x_k\|^2 \text{ pour tout } x_{k+1}, x_k \in N. \quad (4.16)$$

Soit $\{Q_k\}$ une suite de matrices définies positives. Supposons qu'il existe $\nu_{\min} > 0$ et $\nu_{\max} > 0$ telles que $\forall d \in \mathbb{R}^n$

$$\nu_{\min} d^T d \leq d^T Q_k d \leq \nu_{\max} d^T d. \quad (4.17)$$

Cette condition est suffisante. Par exemple si $Q_k = Q$ et Q est définie positive la longueur de pas fixe est donnée par la formule suivante :

$$\alpha_k = -\delta g_k^T d_k / \|d_k\|_{Q_k}^2, \quad (4.18)$$

où $\|d_k\|_{Q_k} = \sqrt{d_k^T Q_k d_k}$ et $\delta \in (0, \nu_{\min}/\mu)$ pour assurer que $\delta\mu/\nu_{\min} < 1$.

Lemme 4.2.1 *Supposons que x_k est donnée par (4.1), (4.2) et (4.18). Alors*

$$g_{k+1}^T d_k = \rho_k g_k^T d_k, \quad (4.19)$$

est vérifiée pour tout k , où

$$0 < \rho_k = 1 - \delta \phi_k \|d_k\|^2 / \|d_k\|_{Q_k}^2, \quad (4.20)$$

et

$$\phi_k = \begin{cases} 0 & , \alpha_k = 0, \\ (g_{k+1} - g_k)^T (x_{k+1} - x_k) / \|x_{k+1} - x_k\|^2 & , \alpha_k \neq 0. \end{cases} \quad (4.21)$$

De plus si $\alpha_k \neq 0$, alors

$$\rho_k < 1 - \delta\tau/\nu_{\max} \quad (4.22)$$

Preuve. Le cas de $\alpha_k = 0$ implique que $\rho_k = 1$ et $g_{k+1} = g_k$. Par conséquent (4.19) est vérifiée.

Nous prouvons maintenant pour le cas de $\alpha_k \neq 0$.

**CHAPITRE 4. UNE FAMILLE DE DEUX PARAMÈTRES DU
GRADIENT CONJUGUÉ NON LINÉAIRE**

De (4.1) et (4.18), on a

$$\begin{aligned}
 g_{k+1}^T d_k &= g_k^T d_k + (g_{k+1} - g_k)^T d_k \\
 &= g_k^T d_k + \alpha_k^{-1} (g_{k+1} - g_k)^T (x_{k+1} - x_k) \\
 &= g_k^T d_k + \alpha_k^{-1} \phi_k \|x_{k+1} - x_k\|^2 \\
 &= g_k^T d_k + \alpha_k \phi_k \|d_k\|^2 \\
 &= g_k^T d_k - (\delta g_k^T d_k / \|d_k\|_{Q_k}^2) \phi_k \|d_k\|^2 \\
 &= (1 - \delta \phi_k \|d_k\|^2 / \|d_k\|_{Q_k}^2) g_k^T d_k \\
 &= \rho_k g_k^T d_k,
 \end{aligned} \tag{4.23}$$

dans le cas où $\alpha_k \neq 0$ pour démontrer que (4.22) on besoin le corollaire suivant : ■

Corollaire 4.2.1 *Il est vérifié que*

$$1 - \delta\mu/\nu_{\min} \leq \rho_k \leq 1 + \delta\mu/\nu_{\min}, \tag{4.24}$$

pour tout k si l'hypothèse 4.1 est satisfaite, et cette estimation peut être affinée pour

$$0 \leq \rho_k \leq 1 - \delta\lambda/\nu_{\max}, \tag{4.25}$$

si l'hypothèse 4.2 est satisfaite.

Preuve. D'après (4.20) et (4.21), on a :

$$\begin{aligned}
 \rho_k &= 1 - \delta \phi_k \frac{\|d_k\|^2}{\|d_k\|_{Q_k}^2} \\
 &= 1 - \frac{\delta (g_{k+1} - g_k)^T (x_{k+1} - x_k) \|d_k\|^2}{\|x_{k+1} - x_k\|^2 \|d_k\|_{Q_k}^2}.
 \end{aligned} \tag{4.26}$$

Alors, d'après l'hypothèse 4.1 au 4.2, nous avons soit :

$$\|g_{k+1} - g_k\| \leq \mu \|x_{k+1} - x_k\|, \tag{4.27}$$

ou

$$[g_{k+1} - g_k]^T (x_{k+1} - x_k) \geq \lambda \|x_{k+1} - x_k\|^2, \tag{4.28}$$

qui, conjointement avec (4.17) et (4.26), conduit aux bornes correspondantes pour ρ_k ■

**CHAPITRE 4. UNE FAMILLE DE DEUX PARAMÈTRES DU
GRADIENT CONJUGUÉ NON LINÉAIRE**

Corollaire 4.2.2 Dans la formule (4.7), (4.9) on a

$$\beta_k^{DY} = \beta_k^{CD} / (1 - \rho_{k-1}) \quad (4.29)$$

Preuve. D'après (4.7), (4.9) et (4.19) nous obtenons :

$$\begin{aligned} \beta_k^{DY} &= \frac{\|g_k\|^2}{d_{k-1}^T (g_k - g_{k-1})} \\ &= \frac{\|g_k\|^2}{-d_{k-1}^T g_{k-1} (1 - \rho_{k-1})} \end{aligned}$$

■

Lemme 4.2.2 Supposons que l'hypothèse 4.1 est satisfaite et que x_k est donnée par (4.1), (4.2) et (4.18), alors

$$\sum_{d_k \neq 0} (g_k^T d_k)^2 / \|d_k\|^2 < \infty \quad (4.30)$$

Preuve. D'après le théorème de la valeur moyenne, on a

$$f(x_{k+1}) - f(x_k) = \bar{g}^T (x_{k+1} - x_k), \quad (4.31)$$

où $\bar{g} = \nabla f(\bar{x})$ pour certains $\bar{x} \in [x_k, x_{k+1}]$, maintenant d'après l'inégalité de Cauchy-Schwartz, (4.1), (4.18), et l'hypothèse 4.1, nous obtenons

$$\begin{aligned} \bar{g}^T (x_{k+1} - x_k) &= g_k^T (x_{k+1} - x_k) + (\bar{g} - g_k)^T (x_{k+1} - x_k) \\ &\leq g_k^T (x_{k+1} - x_k) + \|\bar{g} - g_k\| \|x_{k+1} - x_k\| \\ &\leq g_k^T (x_{k+1} - x_k) + \mu \|x_{k+1} - x_k\|^2 \\ &= \alpha_k g_k^T d_k + \mu \alpha_k^2 \|d_k\|^2 \\ &= \alpha_k g_k^T d_k - \mu \alpha_k \delta g_k^T d_k \|d_k\|^2 / \|d_k\|_{Q_k}^2 \\ &= \alpha_k g_k^T d_k (1 - \mu \delta \|d_k\|^2 / \|d_k\|_{Q_k}^2) \\ &\leq -\delta (1 - \mu \delta / \nu_{\min}) (g_k^T d_k)^2 / \|d_k\|_{Q_k}^2. \end{aligned} \quad (4.32)$$

C'est-à-dire :

$$f(x_{k+1}) - f(x_k) \leq -\delta (1 - \mu \delta / \nu_{\min}) (g_k^T d_k)^2 / \|d_k\|_{Q_k}^2, \quad (4.33)$$

**CHAPITRE 4. UNE FAMILLE DE DEUX PARAMÈTRES DU
GRADIENT CONJUGUÉ NON LINÉAIRE**

ce qui implique $f(x_{k+1}) \leq f(x_k)$ il s'ensuit par l'hypothèse 4.1 que $\lim_{k \rightarrow \infty} f(x_k)$ existe. Ainsi d'après (4.17) et (4.33) nous obtenons :

$$\frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2} \leq \nu_{\max} \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|_{Q_k}^2} \leq \frac{\nu_{\max}}{\delta(1 - \mu\delta/\nu_{\min})} [f(x_k) - f(x_{k+1})], \quad (4.34)$$

ceci termine la preuve ■

Lemme 4.2.3 *Supposons que l'hypothèse 4.1 est satisfaite et que x_k donnée par (4.1), (4.2) et (4.18), alors*

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| \neq 0 \text{ implique } \sum_{d_k \neq 0} \|g_k\|^4 / \|d_k\|^2 < \infty \quad (4.35)$$

Preuve. [44] Si $\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| \neq 0$, alors il existe $\gamma > 0$ tel que $\|g_k\| \geq \gamma$ pour tout k .

Soit

$$\lambda_k = |g_k^T d_k| / \|d_k\|. \quad (4.36)$$

Alors d'après le lemme 4.2.2 on a

$$\lambda_k \leq \gamma/4. \quad (4.37)$$

Pour tout k grand, d'après le lemme 4.2.1 et le corollaire 4.2.1 on a

$$\begin{aligned} |g_k^T d_{k-1}| &= |\rho_{k-1} g_{k-1}^T d_{k-1}| \\ &\leq (1 + \delta\mu/\nu_{\min}) |g_{k-1}^T d_{k-1}| \\ &< 2 |g_{k-1}^T d_{k-1}|. \end{aligned} \quad (4.38)$$

En considérant (4.2), on a

$$g_k = \beta_k d_{k-1} - d_k. \quad (4.39)$$

En multipliant g_k de deux cotés de (4.39), nous obtenons

$$\|g_k\|^2 = \beta_k g_k^T d_{k-1} - g_k^T d_k. \quad (4.40)$$

**CHAPITRE 4. UNE FAMILLE DE DEUX PARAMÈTRES DU
GRADIENT CONJUGUÉ NON LINÉAIRE**

D'après (4.40) et (4.38), il s'ensuit que :

$$\begin{aligned}
 \frac{\|g_k\|^2}{\|d_k\|} &= \frac{\beta_k g_k^T d_{k-1} - g_k^T d_k}{\|d_k\|} \\
 &\leq \frac{|\beta_k| |g_k^T d_{k-1}| + |g_k^T d_k|}{\|d_k\|} \\
 &\leq 2\lambda_{k-1} \frac{\|\beta_k d_{k-1}\|}{\|d_k\|} + \lambda_k \\
 &= \lambda_k + 2\lambda_{k-1} \frac{\|d_k + g_k\|}{\|d_k\|} \\
 &\leq \lambda_k + 2\lambda_{k-1} + 2\lambda_{k-1} \frac{\|g_k\|^2}{\|d_k\| \|g_k\|} \\
 &\leq \lambda_k + 2\lambda_{k-1} + 2\lambda_{k-1} \frac{\|g_k\|^2}{\gamma \|d_k\|} \\
 &\leq \lambda_k + 2\lambda_{k-1} + 2\left(\frac{\gamma}{4}\right) \frac{\|g_k\|^2}{\gamma \|d_k\|} \\
 &= \lambda_k + 2\lambda_{k-1} + \frac{\|g_k\|^2}{2\|d_k\|}. \tag{4.41}
 \end{aligned}$$

La relation ci dessus peut être réécrite comme suit :

$$\frac{\|g_k\|^2}{\|d_k\|} \leq 2\lambda_k + 4\lambda_{k-1} \leq 4(\lambda_k + \lambda_{k-1}). \tag{4.42}$$

Donc, on a :

$$\frac{\|g_k\|^4}{\|d_k\|^2} \leq 16(\lambda_k + \lambda_{k-1})^2 \leq 32(\lambda_k^2 + \lambda_{k-1}^2). \tag{4.43}$$

D'après le lemme 4.2.2, nous connaissons que $\sum \lambda_k^2 < \infty$, donc nous obtenons de (4.43)

$$\sum_{d_k \neq 0} \frac{\|g_k\|^4}{\|d_k\|^2} < \infty.$$

■

4.3 Convergence globale de la famille de deux paramètres du gradient conjugué non linéaire

Dans cette section nous discutons les propriétés de convergence d'une famille de deux paramètres du gradient conjugué, où β_k est donnée par

$$\beta_k = \frac{g_k^T y_{k-1}}{(1 - \mu - \omega) \|g_{k-1}\|^2 + \mu d_{k-1}^T y_{k-1} - \omega d_{k-1}^T g_{k-1}} \quad (4.44)$$

$\mu \in [0, 1]$ et $\omega \in [0, 1 - \mu]$ à savoir c'est une sous famille de (4.10) avec $\lambda_k = 1$ et $\mu_k = \mu$ et $\omega_k = \omega$.

Remarque 4.3.1 *Le dénominateur de (4.44) ne doit pas s'annuler afin de garantir que $g_{k-1}^T d_{k-1} \leq 0$ pour tout k [9]. Car si le dénominateur de β_k est nul à savoir*

$$\begin{aligned} 0 &= (1 - \mu - \omega) \|g_{k-1}\|^2 + \mu d_{k-1}^T y_{k-1} - \omega d_{k-1}^T g_{k-1} \\ &= (1 - \mu - \omega) \|g_{k-1}\|^2 + (\mu \rho_{k-1} - \mu - \omega) g_{k-1}^T d_{k-1}, \end{aligned} \quad (4.45)$$

alors, indépendamment des valeurs de μ et de ω , il doit vérifier que $g_{k-1}^T d_{k-1} = 0$ ceci implique que $\alpha_{k-1} = 0$ et donc $x_k = x_{k-1}$ et $y_{k-1} = 0$, par conséquent, le numérateur de (4.44) est nul. Dans ce cas, nous avons simplement $\beta_k = 0$.

Lemme 4.3.1 *Sous l'hypothèse 4.2, la méthode définie par (4.1), (4.2), (4.18) et (4.44) engendre une suite $\{x_k\}$ tel que $f(x_{k+1}) \leq f(x_k)$.*

Preuve. D'après (4.33), nous avons

$$f(x_{k+1}) - f(x_k) \leq -\delta(1 - \mu\delta/\nu_{\min})(g_k^T d_k)^2 / \|d_k\|_{Q_k}^2 \leq 0, \quad (4.46)$$

ce qui implique $f(x_{k+1}) \leq f(x_k)$. ■

Lemme 4.3.2 *Sous l'hypothèse 4.2 et $\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| \neq 0$ on a $\beta_k \rightarrow 0$, quand $k \rightarrow \infty$ où β_k est définie par (4.44).*

**CHAPITRE 4. UNE FAMILLE DE DEUX PARAMÈTRES DU
GRADIENT CONJUGUÉ NON LINÉAIRE**

Preuve. Supposons que $\|g_k\| \geq \gamma$ pour tout k , d'après le lemme 4.2.2 on a

$$\begin{aligned}
 \sum_k \|x_{k+1} - x_k\|^2 &= \sum_k \|\alpha_k d_k\|^2 \\
 &= \sum_{d_k \neq 0} \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|_{Q_k}^4} \|d_k\|^2 \\
 &\leq \frac{1}{v_{\min}^2} \sum_{d_k \neq 0} \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2} \\
 &< \infty,
 \end{aligned} \tag{4.47}$$

donc $\|x_{k+1} - x_k\|^2 \rightarrow 0$ et $y_{k-1} = g_k - g_{k-1} \rightarrow 0$.

Nous considérons deux cas. Tout d'abord, si les deux μ et ω sont nuls, alors

$$\begin{aligned}
 \beta_k &= \frac{g_k^T y_{k-1}}{(1 - \mu - \omega) \|g_{k-1}\|^2 + \mu d_{k-1}^T y_{k-1} - \omega d_{k-1}^T g_{k-1}} \\
 &= \frac{g_k^T y_{k-1}}{\|g_{k-1}\|^2} \rightarrow 0,
 \end{aligned} \tag{4.48}$$

donc le lemme est vrai. Deuxièmement, si au moins un de μ et ω n'est pas nul, nous affirons que pour k est grand

$$g_k^T d_k \leq -\frac{1}{2}\gamma^2. \tag{4.49}$$

En effet, nous avons $g_{k-1}^T d_{k-1} \leq 0$ d'après la remarque ci-dessus. Si $g_{k-1}^T d_{k-1} = 0$, on a $g_k^T d_k = -\|g_k\|^2$ ainsi (4.49) est vrai. Si $g_{k-1}^T d_{k-1} < 0$ alors d'après le lemme 4.2.1

$$\begin{aligned}
 g_k^T d_k &= g_k^T (-g_k + \beta_k d_{k-1}) \\
 &= -\|g_k\|^2 + \frac{\rho_{k-1} g_k^T y_{k-1}}{(1 - \mu - \omega) \|g_{k-1}\|^2 + (\mu \rho_{k-1} - \mu - \omega) d_{k-1}^T g_{k-1}} g_{k-1}^T d_{k-1} \\
 &\leq -\gamma^2 + \frac{|\rho_{k-1} g_k^T y_{k-1}|}{|\mu \rho_{k-1} - \mu - \omega|},
 \end{aligned} \tag{4.50}$$

ainsi k assez grand, (4.49) est également vrai.

**CHAPITRE 4. UNE FAMILLE DE DEUX PARAMÈTRES DU
GRADIENT CONJUGUÉ NON LINÉAIRE**

D'après (4.44) et (4.49), nous avons

$$\begin{aligned} |g_k^T y_{k-1}| &= |\beta_k| \left| (1 - \mu - \omega) \|g_{k-1}\|^2 + (\mu\rho_{k-1} - \mu - \omega) d_{k-1}^T g_{k-1} \right| \\ &\geq |\beta_k| \left[(1 - \mu - \omega) \gamma^2 + (\mu(1 - \rho_{k-1}) + \omega) \gamma^2 / 2 \right]. \end{aligned}$$

D'après (4.25), nous avons

$$|g_k^T y_{k-1}| \geq |\beta_k| \left[(1 - \mu - \omega) \gamma^2 + (\mu\delta\lambda/v_{\max} + \omega) \gamma^2 / 2 \right], \quad (4.51)$$

donc nous avons aussi $\beta_k \rightarrow 0$ dans le deuxième cas ■

Théorème 4.3.1 *Sous l'hypothèse 4.2, la méthode définie par (4.1), (4.2), (4.18) et (4.44) engendre une suite $\{x_k\}$ tel que $\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0$.*

Preuve. Supposons au contraire que $\|g_k\| \geq \gamma$ d'après la bornitude de l'ensemble de niveau lemme 4.3.1 que les deux $\{x_k\}$ et $\{g_k\}$ sont

bornées, puisque $\liminf \|g_k\| \neq 0$, d'après le lemme 4.3.2 nous avons $\beta_k \rightarrow 0$ puisque :

$$\|d_k\| \leq \|g_k\| + |\beta_k| \|d_{k-1}\|, \quad (4.52)$$

nous concluons que le $\{\|d_k\|\}$ est uniformément bornée donc, on a

$$\begin{aligned} |g_k^T d_k| &= |g_k^T (-g_k + \beta_k d_{k-1})| \\ &\geq \|g_k\|^2 / 2, \end{aligned} \quad (4.53)$$

pour k suffisamment grand, alors il existe $\epsilon > 0$ pour que

$$\frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2 \|g_k\|^2} \geq \frac{1}{4} \frac{\|g_k\|^2}{\|d_k\|^2} \geq \epsilon, \quad (4.54)$$

pour k suffisamment grand, puisque $\|d_k\|$ est bornée par dessus, ce qui implique

$$\sum_{d_k \neq 0} \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2} = \infty, \quad (4.55)$$

ceci contredit le lemme 4.2.2. ■

4.4 Expériences numériques et discussions

Dans cette section, nous présentons le travail de Chen et Sun ([4]) sur l'expériences numériques de méthodes (4.4) – (4.9).

Test de logiciels d'optimisation nécessite un ensemble de base de sous-programmes qui définissent les fonctions de test et les points de départ [35]

1. Systèmes d'équations non linéaires. Etant donné $f_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, pour $i = 1, \dots, n$, résoudre

$$f_i(x) = 0, \quad 1 \leq i \leq n, \quad x \in \mathbb{R}^n$$

2. Moindres carrés non linéaires. Etant donné $f_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, pour $i = 1, \dots, m$, avec $m \geq n$, résoudre

$$\min \left\{ \sum_{i=1}^m f_i^2(x), x \in \mathbb{R}^n \right\} \quad (4.56)$$

3. Minimisation sans contrainte. Etant donné $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, résoudre

$$\min \{f(x), x \in \mathbb{R}^n\}.$$

Pour définir les 8 fonctions de test, nous avons adopté le format suivant.
Nom de la fonction.

- a) Dimensions
- b) Définition de fonction
- c) Le point initial
- d) Minimum de la fonction (4.56)

1) *Rosenbrock*

- a) $n = 2, \quad m = 2$
- b) $f_1(x) = 10(x_2 - x_1^2)$
 $f_2(x) = 1 - x_1$
- c) $x_0 = (-1.2, 1)$
- d) $f = 0$ à $(1, 1)$

2) *Freudenstein et Roth*

**CHAPITRE 4. UNE FAMILLE DE DEUX PARAMÈTRES DU
GRADIENT CONJUGUÉ NON LINÉAIRE**

- a) $n = 2, \quad m = 2$
- b) $f_1(x) = -13 + x_1 + ((5 - x_2)x_2 - 2)x_2$
 $f_2(x) = -29 + x_1 + ((x_2 + 1)x_2 - 14)x_2$
- c) $x_0 = (0.5, -2)$
- d) $f = 0$ à $(5, 4)$

3) *Powell*

- a) $n = 2, \quad m = 2$
- b) $f_1(x) = 10^4 x_1 x_2 - 1$
 $f_2(x) = \exp[-x_1] + \exp[-x_2] - 1.0001$
- c) $x_0 = (0, 1)$
- d) $f = 0$ à $(1.098 \dots 10^{-5}, 9.106 \dots)$

4) *Brown*

- a) $n = 2, \quad m = 3$
- b) $f_1(x) = x_1 - 10^6$
 $f_2(x) = x_2 - 2.10^{-6}$
 $f_3(x) = x_1 x_2 - 2$
- c) $x_0 = (1, 1)$
- d) $f = 0$ à $(10^6, 2.10^{-6})$

5) *Beale*

- a) $n = 2, \quad m = 3$
- b) $f_i(x) = y_i - x_1(1 - x_2^i),$
où $y_1 = 1.5, \quad y_2 = 2.25, \quad y_3 = 2.625$
- c) $x_0 = (1, 1)$
- d) $f = 0$ à $(3, 0.5)$

6) *Jennrich et Sampson*

- a) $n = 2, \quad m \geq n$
- b) $f_i(x) = 2 + 2i - (\exp[ix_1] + \exp[ix_2])$
- c) $x_0 = (0.3, 0.4)$
- d) $f = 124.362 \dots$ à $x_1 = x_2 = 0.2578 \dots$ pour $m = 10$

**CHAPITRE 4. UNE FAMILLE DE DEUX PARAMÈTRES DU
GRADIENT CONJUGUÉ NON LINÉAIRE**

7) *Helical valley*

a) $n = 3, \quad m = 3$

b) $f_1(x) = 10[x_3 - 10\theta(x_1, x_2)]$

$$f_2(x) = 10 \left[(x_1^2 + x_2^2)^{1/2} - 1 \right]$$

$f_3(x) = x_3$ pour

$$\theta(x_1, x_2) = \begin{cases} \frac{1}{2\pi} \arctan\left(\frac{x_2}{x_1}\right), & \text{si } x_1 > 0 \\ \frac{1}{2\pi} \arctan\left(\frac{x_2}{x_1}\right) + 0.5, & \text{si } x_1 < 0 \end{cases}$$

c) $x_0 = (-1, 0, 0)$

d) $f = 0$ à $(1, 0, 0)$

8) *Wood*

a) $n = 4, \quad m = 6$

b) $f_1(x) = 10(x_2 - x_1^2)$

$$f_2(x) = 1 - x_1$$

$$f_3(x) = (90)^{1/2}(x_4 - x_3^2)$$

$$f_4(x) = 1 - x_3$$

$$f_5(x) = (10)^{1/2}(x_2 + x_4 - 2)$$

$$f_6(x) = (10)^{-1/2}(x_2 - x_4)$$

c) $x_0 = (-3, -1, -3, -1)$

d) $f = 0$ à $(1, 1, 1, 1)$.

Les mêmes paramètres et critères de convergence dans [5], un critère d'arrêt de l'algorithme est fixé à $\epsilon = 10^{-6}$.

Les résultats numériques de méthodes GC avec/sans recherche linéaire sont illustrés dans le tableau (1).

Les résultats pour chaque problème par chaque méthode sont présentés sous la forme :

NF/NG
BFGS/DFP.

Où NF/NG désigne le nombre des évaluations de fonction/gradient dans ces méthodes avec la recherche linéaire, tandis que BFGS/DFP désigne le nombre d'évaluations de fonction dans ces méthodes sans recherche linéaire.

**CHAPITRE 4. UNE FAMILLE DE DEUX PARAMÈTRES DU
GRADIENT CONJUGUÉ NON LINÉAIRE**

Le tableau (1)

Les résultats numériques de méthodes GC

Probleme	FR	CD	DY	PRP	HS	LS
1	358/133	263/102	258/91	224/93	167/69	353/133
	59/203	219/132	501/202	73/184	136/67	76/99
2	816/434	FAIL	225/147	442/311	638/475	449/336
	839/1103	1433/2248	4388/1796	199/270	221/420	616/805
3	7/5	7/5	7/5	7/5	7/5	7/5
	9/16	10/14	14/8	8/8	6/6	7/7
4	FAIL	FAIL	FAIL	FAIL	FAIL	FAIL
	5/5	5/5	FAIL/12	6/6	FAIL/21	6/6
5	8742/2884	7245/2546	19/13	39/29	50/40	45/36
	FAIL	696/FAIL	FAIL	209/FAIL	FAIL	179/FAIL
6	16/7	16/7	16/7	15/9	16/7	15/9
	32/32	32/32	FAIL/1660	32/32	50/53	32/32
7	4311/1456	3250/1125	8158/2736	FAIL	FAIL	FAIL
	4032/FAIL	FAIL	FAIL	FAIL	FAIL	FAIL
8	583/240	756/311	475/179	104/59	114/60	120/66
	1215/FAIL	FAIL	FAIL	71/772	602/904	70/74

Il ya quelques différences entre les méthodes du gradient conjugué. Tout d'abord, δ dépend des paramètres inconnus v_{\min} et μ , si la valeur de δ est trop grande dans le test, les méthodes GC non-linéaire peut parfois engendre un x_{k+1} tel que $f(x_k) \leq f(x_{k+1})$.

En théorie, cela ne peut pas se produire si δ est suffisamment petit, voir le lemme 4.2.1.

Une fois une direction remontée est observée dans la pratique, nous réduisons de moitié et redémarrons la méthode. Ainsi, après un nombre d'étapes fini la méthode va générer des directions de descente et finalement on obtient la convergence. Par ailleurs, les expériences numériques de la méthode non-linéaire avec $Q_k = I$ montrent le mauvais comportement de convergence [4]. Ainsi Chen et Sun ont considéré certaines mises à jour quasi-Newton pour Q_k . Comme cette famille permet de nombreux types de formules de mise à

CHAPITRE 4. UNE FAMILLE DE DEUX PARAMÈTRES DU GRADIENT CONJUGUÉ NON LINÉAIRE

jour de Q_k , ils ont testé les deux formules de mise à jour quasi-Newton, BFGS et DFP avec la compétence de Powell pour traiter le cas de $y_k^T d_k < 0$, voir [50], avec BFGS/DFP mise à jour pour Q_k (les évaluations de gradient sont les mêmes dans cette famille puisque à chaque itération, une seule fonction d'évaluation et un seul gradient d'évaluation sont nécessaires). FAIL indique que la méthode échoue à la convergence au sein de 5000 itérations ou il a des sorties numériques débordées. En règle générale, il ne prend pas plus de 5 secondes (le temps mural) pour chaque type(4.4) – (4.9) des méthodes de GC avec recherche linéaire ou recherche non-linéaire pour compléter l'ensemble des 8 problèmes tests.

Nous remarquons qu'il ya des cas de défaillance d'un peu plus dans le régime non-linéaire, mais la différence est insignifiante. Notez que les principales différences entre les méthodes quasi-Newtoniennes et les méthodes de GC non-linéaire dans la mise à jour Q_k est que seul le scalaire $d_k^T Q_k d_k$ est utilisé pour calculer la taille de pas dans le second. Ainsi, une amélioration possible est de construire une itération intérieure pour approximer le scalaire $d_k^T Q_k d_k$ au lieu de mettre à jour Q_k directement. Cela peut faire gagner du temps supplémentaire et de la mémoire. Une autre approche, comme nous a indiqué une référence, est en utilisant la formule quasi-Newtonienne à mémoire limitée BFGS pour mettre à jour Q_k . Un document récent de Dai [7] montre que la méthode Polak-Ribiere-Polyak converge, même si le pas de discrétisation $\alpha_k = 1/(4\mu)$ est complètement constant, ce qui fournit une nouvelle et intéressante direction dans la recherche théorique (Tableau (1)).

4.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons proposé une famille des méthodes de deux paramètres de gradient conjugué non-linéaire et étudié les propriétés de convergence globale de cette méthode dans lesquelles la procédure de recherche linéaire de Wolfe forte (4.11) – (4.13) est remplacée par une formule fixe de longueur de pas (4.18).

Avec le lemme 4.3.1, nous avons montré que la famille de deux paramètres peut assurer la direction de descente à chaque itération. Alors avec des conditions appropriées nous avons établi des résultats généraux de convergence, à savoir, le lemme 4.3.2 et le théorème 4.3.1 pour la famille de deux paramètres du gradient conjugué non-linéaire.

Les résultats de calcul montrent généralement que les méthodes non linéaires dépendent du choix de Q_k . Le choix le plus évident est $Q_k \equiv I$ (la matrice unité) lequel est toujours défavorable. La dernière de quasi-Newton de Q_k est plus acceptable et ne nécessite aucune évaluation de gradient dans chaque itération.

En résumé, les résultats de calcul montrent que les méthodes sans recherche linéaire peuvent être aussi efficaces que ceux avec la recherche linéaire. Les résultats obtenus ont, sans nul doute, stimuler une étude plus approfondie sur la théorie et des mises en œuvre sur les méthodes de GC non-linéaire.

Un problème ouvert et sa conjecture

Grâce aux études préalables, on choisit le scalaire β_k de la même façon (de trois paramètres) mais $\lambda_k = \lambda$, $\mu_k = 1$, $\omega_k = \omega$ le scalaire β_k sera défini par :

$$\beta_k = \frac{(1 - \lambda) \|g_k\|^2 + \lambda g_k^T y_{k-1}}{-\omega \|g_{k-1}\|^2 + d_{k-1}^T y_{k-1} - \omega d_{k-1}^T g_{k-1}},$$

et on étudie la convergence globale de cette méthode de deux paramètres.

Bibliographie

- [1] M. Al-Baali, Descent property and global convergence of the Fletcher-Reeves method with inexact line search, *IMA J. Numer. Anal.* 5 (1985), pp. 121-124.
- [2] M.S.Bazaraa, H.D.Sherali et C.M.Shett, *Nonlinear Programming, Theory and Algorithms*, Wiley-Interscience,(1993).
- [3] A.Buckley, Extending the relationship between the conjugate gradient and BFGS algorithms. *Math.Program.* 15(1978), 343–348 .
- [4] X.Chen, J.Sun, Global convergence of a two-parametre family of conjugate gradient methods without line search, *Journal of Computational and Applied Mathematics* 146 (2002) 37-45.
- [5] Y. H. Dai, Analysis of nonlinear conjugate gradient method, Ph.D. thesis, Institute of Computational Mathematics and Scientific/ Engineering Computing, Chinese Academy of Sciences, 1997.
- [6] Y. H. Dai, Some new properties of a nonlinear conjugate gradient method, Research report ICM-98-010, Institute of Computational Mathematics and Scientific/Engineering Computing, Chinese Academy of Sciences, 1998.
- [7] Y.H. Dai, Convergence of Polak–Ribière–Polyak conjugate gradient method with constant stepsizes, Manuscript, Institute of Computational Mathematics and Scientific/Engineering Computing, Chinese Academy of Sciences, 2001.
- [8] Y.H. Dai, Convergence properties of the BFGS algorithm, *SIAM J. optim.* 13, No. 3 (2002), pp. 693-701.
- [9] Y.H. Dai, Y. Yuan, Convergence of the FR method under a generalized Wolfe line search, *Numer. Math. J. Chinese Univ.* 6 (1996) 552–562.
- [10] Y.H. Dai, Y. Yuan, A nonlinear conjugate gradient method with a strong global convergence property, *SIAM J. Optim.* 10,No 1 (1999) 177–182.

-
- [11] Y.H. Dai, Y. Yuan, A three-parameter family of nonlinear conjugate gradient methods, Report ICM-98-040, ICMSEC, Chinese Academy of Sciences, 1998, Math. Comput., to appear .
 - [12] Y. Dai, J. Han, G. Liu, D. Sun, Y.X. Yuan, and H. Yin, Convergence properties of nonlinear conjugate gradient methods, Research report ICM-98-024, Institute of Computational Mathematics and Scientific/Engineering Computing, Chinese Academy of Sciences, 1998 (accepted by SIAM J. Optimization).
 - [13] Y. H. Dai and Y. Yuan, A nonlinear conjugate gradient method with nice global convergence properties, Research report ICM-95-038, Institute of Computational Mathematics and Scientific/Engineering Computing, Chinese Academy of Sciences, 1995 (accepted by SIAM J. Optimization).
 - [14] Y. H. Dai and Y. Yuan, Convergence properties of the Fletcher-Reeves method, IMA J. Numer. Anal. Vol. 16 No. 2 (1996), 155-164.
 - [15] Y. H. Dai and Y. Yuan, Convergence properties of the conjugate descent method, Advances in Mathematics, 6 (1996) , pp.552-562.
 - [16] Y. H. Dai and Y. Yuan, Some properties of a new conjugate gradient method, in : Advances in Nonlinear Programming, ed. Kluwer, Boston, (1998), pp. 251-262.
 - [17] Y. H. Dai and Y. Yuan, Convergence properties of Beale-Powell restart method, Sciences in China (series A), Vol. 28, No. 5, pp. 424-432.
 - [18] Y. H. Dai and Y. Yuan, A class of globally convergent conjugate gradient methods, Research report ICM-98-030, Institute of Computational Mathematics and Scientific/Engineering Computing, Chinese Academy of Sciences, 1998. (submitted to IMA J. Numer. Anal.)
 - [19] Y. H. Dai and Y. Yuan, Extension of a class of conjugate gradient methods, Research report ICM-98-049, Institute of Computational Mathematics and Scientific/Engineering Computing, Chinese Academy of Sciences, 1998. (submitted to BIT)
 - [20] Y.H. Dai, J.Y. Han, G.H. Liu, D.F. Sun, H.X. Yin and Y.X. Yuan, Convergence properties of nonlinear conjugate gradient methods, SIAM J. Optim., 10 (1999) 345-358.
 - [21] J. W. Daniel, The conjugate gradient method for linear and nonlinear operator equations, SIAM J. Numer. Anal, 4 (1967), 10-26.

-
- [22] T. Diallo, Travail pratique de master, Sujet : Etude et illustration de méthodes itératives d'optimisation non linéaire, Responsable : Benjamin Leroy-Beaubert, Ecole polytechnique Fédérale de Lausanne.(2006)
- [23] R. Fletcher, Practical Methods of Optimization vol. 1- Unconstrained optimization, John Wiley & Sons (New York), 1987.
- [24] R. Fletcher and C. Reeves, Function minimization by conjugate gradients, *Comput. J.* 7 (1964), pp. 149-154.
- [25] J. C. Gilbert, Eléments d'optimisation différentiable : Théorie et algorithmes, notes de cours, École Nationale Supérieure de Techniques Avancées, Paris (2007).
- [26] J. C. Gilbert and J. Nocedal, Global convergence properties of conjugate gradient methods for optimization, *SIAM. J. Optimization.* Vol. 2 No. 1 (1992), pp. 21-42.
- [27] L. Grippo and S. Lucidi, A globally convergent version of the Polak-Ribière conjugate gradient method, *Math. Prog.* 78 (1997), pp. 375-391.
- [28] M. R. Hestenes and E. L. Stiefel, Methods of conjugate gradients for solving linear systems, *J. Res. Nat. Bur. Standards Sect. 5*, 49 (1952), 409-436.
- [29] Y. F. Hu and C. Storey, Global convergence result for conjugate gradient methods, *JOTA* : Vol. 71 No. 2 (1991) 399-405.
- [30] D. Kauth, Optimisation numerique methodes du gradient conjugue linéaire (Chapitre 5.1), Université de Fribourg, le 5 novembre (2009).
- [31] K. M. Khoda, Y. Liu, and C. Storey, Generalized Polak-RiWe Algorithm, *Journal of Optimization Theory and Applications*, Vol. 75, No. 2 (1992), 345-354.
- [32] Y. Liu and C. Storey, Efficient generalized conjugate gradient algorithms, Part 1 - Theory, *Journal of Optimization Theory and Applications*, Vol. 69 (1991), 129-137.
- [33] G. Liu, J. Han and H. Yin, Global convergence of the Fletcher-Reeves algorithm with inexact line search, *Appl. Math. J. Chinese Univ. Ser. B.* 10 (1995) 75-82.
- [34] M. Minoux, Programmation mathématique, théorie et algorithmes, tome 1, Dunod, (1983).
- [35] J.J.Moré, B.S.Garbow and K.E. Hillstrom, Testing unconstrained optimization software, *ACM Transactions on Mathematical Software* 7 (1981) 17-41.

-
- [36] S. Mottelet, Optimisation non-linéaire, Université de Technologie de Compiègne, RO04/TI07 Printemps (2003).
- [37] L. Nazareth, Conjugate-gradient methods, to appear in : Encyclopedia of Optimization (C.Floudas and P. Pardalos, eds.), Kluwer Academic Publishers, Boston, USA and Dordrecht, The Netherlands (1999).
- [38] B. Polak and G. Ribière, Note sur la convergence de directions conjuguées, Rev. ev. Francaise Informat Recherche Operationelle, 3e Année 16 (1969), pp. 35-43.
- [39] M.J.D. Powell, Convergence properties of algorithms for nonlinear optimization, SIAM rev, 28 (1986), pp. 487-500.
- [40] M. J. D. Powell, Nonconvex minimization calculations and the conjugate gradient method, in : Lecture Notes in Mathematics vol. 1066, Springer-Verlag (Berlin) (1984), pp. 121-141.
- [41] M. J. D. Powell, Restart procedures of the conjugate gradient method, Math. Program. 2 (1977), pp. 241-254.
- [42] B.T. Polyak, The conjugate gradient method in extreme problems, U.S.S.R. Comput. Math. and Math. Phys. 9 (1969) 94–112.
- [43] H.D. Qi, J.Y. Han and G.H.Liu, A modified Hestenses-Stiefel conjugate gradient algorithm, Chinese Annals of Mathematics 17A : 3(1996),277-284. (in Chinese).
- [44] M.Raydan, The Barzilai and Borwein gradient method for the large scale unconstrained minimization problem, SIAM J, Optim 7, 26–33 (1997).
- [45] D.F.Shanno, Conjugate gradient methods with inexact searches.Math, Oper, Res 3(1978), 244–256.
- [46] J. Sun, J. Zhang, Global convergence of conjugate gradient methods without line search, Ann. Oper. Res. 103 (2001) 161–173.
- [47] D. Touati-Ahmed and C. Storey, Efficient hybrid conjugate gradient techniques, JOTA, 64 (1990), pp. 379-397.
- [48] C. Y. Wang and Y.Z. Zhang, Global convergence properties of s-related conjugate gradient methods, Report, Qufu Normal University,1996.
- [49] P. Wolfe, Convergence conditions for ascent methods, SIAM Review, 11 (1969) 226-235.
- [50] Y. Yuan, Numerical methods for nonlinear programming, Shanghai Scientific & Technical Publishers, Shanghai, 1993 (in Chinese).

- [51] G. Zoutendijk, Nonlinear programming, computational methods, in : Integer and Nonlinear Programming, J. Abadie, ed., North-Holland (1970) 37-86.