VII - Optimisation

Définition 1 - Fonctions à plusieurs variables

Soit $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ une fonction de classe $\mathscr{C}^2$. On note

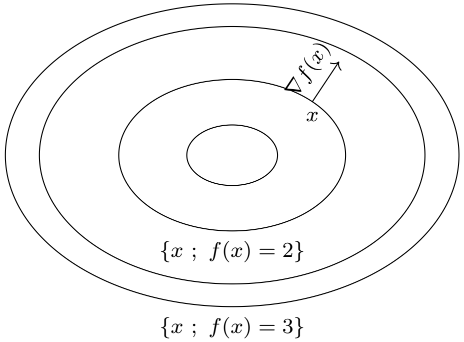
* le gradient de f :

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} \partial_1 f(x) \\ \vdots \\ \partial_n f(x) \end{pmatrix},$$

* la hessienne de f :

$$H(f)(x) = \begin{pmatrix} \partial^2_{1,1} f(x) & \cdots & \partial^2_{1,n} f(x) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \partial^2_{n,1} f(x) & \cdots & \partial^2_{n,n} f(x). \end{pmatrix}$$

Géométriquement, le gradient d'une fonction de plusieurs variables est le vecteur orthogonal à ses lignes de niveau.



I - Formes bilinéaires

Définition 2 - Formes bilinéaires

Soit H une matrice carrée et symétrique.

* La matrice H est définie positive si

$$\forall\ h \neq \overrightarrow{0},\ h^T H h > 0.$$

* La matrice H est définie négative si

$$\forall\ h \neq \overrightarrow{0},\ h^T H h < 0.$$

La stratégie générale pour montrer qu'une matrice est définie positive (resp. définie négative) est d'effectuer une réduction de Gauss.

I.1 - Le cas de la dimension 2

Lorsque $n = 2$, on introduit les notations de Monge :

$$H = \begin{pmatrix} r & s \\ s & t \end{pmatrix}$$

Proposition 1 - Notations de Monge

* Si $rt - s^2 > 0$. Alors $r \neq 0$.
  * Si $r > 0$, la matrice H est définie positive.
  * Si $r < 0$, la matrice H est définie négative.
* Si $rt - s^2 < 0$, la matrice H possède deux valeurs propres non nulles de signes opposés.

Remarque 1

La condition $r > 0$ (resp. $r < 0$) peut être remplacée par $r+t > 0$ (resp. $r + t < 0$). Cependant, comme on le montre par la suite, le seul signe de r permet de conclure.

Comme H est symétrique réelle, elle est diagonalisable dans une base orthonormée et il existe $P \in O_2(\mathbb{R})$ et λ_1, λ_2 réels tels que

$$H = P^T \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} P.$$

Ainsi, en notant $y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = Ph$, alors

$$h^T Hh = (Ph)^T \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} (Ph) = \lambda_1 y_1^2 + \lambda_2 y_2^2.$$

* Si $\lambda_1 > 0$ et $\lambda_2 > 0$, alors H est définie positive,
* Si $\lambda_1 < 0$ et $\lambda_2 < 0$, alors H est définie négative.

Comme le déterminant est un invariant de similitude,

$$\lambda_1 \lambda_2 = rt - s^2.$$

* Si $rt - s^2 > 0$, alors λ_1 et λ_2 sont de même signe.
* Si $rt - s^2 < 0$, alors λ_1 et λ_2 sont de signes opposés.

Dans le premier cas (on a alors $r \neq 0$), pour obtenir le signe commun de λ_1 et λ_2, on peut remarquer au choix que :

* la trace est un invariant de similitude, donc

$$r + t = \lambda_1 + \lambda_2,$$

  soit le signe de λ_1 est identique à celui de $\lambda_1 + \lambda_2$ qui est lui même identique à celui de $r + t$.
* un simple calcul montre que

$$h^T Hh = r \left(h_1 - \frac{s}{r} h_2 \right)^2 + \frac{rt - s^2}{r} h_2^2$$

  donc λ_1 et λ_2 sont du signe de r.

I.2 - Critère de Sylvester

Les notations de Monge ne fonctionnent que pour les matrices de taille 2. La réduction de Gauss fonctionne toujours mais les calculs sont parfois laborieux. Le critère de Sylvester permet de caractériser la signature des formes quadratiques en calculant uniquement les mineurs principaux diagonaux.

Proposition 2 - Critère de Sylvester

* La matrice H est définie positive si tous ses mineurs principaux diagonaux sont strictement positifs.
* La matrice H est définie négative si les mineurs principaux diagonaux sont successivement de signes $- + - + \cdots$

II - Convexité

Pour obtenir une propriété de convexité, on peut utiliser le résultat suivant :

Proposition 3 - Convexité - Caractérisation $\mathscr{C}^2$

* Si, pour tout $x \in \mathbb{R}^n$, $H(f)(x)$ est définie positive, alors f est convexe.
* Si, pour tout $x \in \mathbb{R}^n$, $H(f)(x)$ est définie négative, alors f est concave.

Dans le cas de la dimension 2, on peut utiliser les notations de Monge.

Proposition 4 - Convexité - Extremums

* Tout minimum local d'une fonction convexe est un minimum global.
* Tout maximum local d'une fonction convexe est un maximum global.

III - Optimisation sans contrainte

On cherche à déterminer les valeurs de x pour lesquelles f atteint un extremum. D'après le développement limité à l'ordre 2,

$$f(x+h) = f(x) + \langle \nabla f(x), h\rangle + \frac{1}{2}h^T H(f)(x)h + \|h\|^2 \varepsilon(h).$$

III.1 - Conditions de premier ordre

Si f admet un extremum en $x_\star$, alors pour tout $k \in [\![1,n]\!]$, $x_k \mapsto f(x_{1,*},\dots,x_{k-1,*},x_k,x_{k+1,*},\dots,x_{n,*})$ admet aussi un extremum. Ainsi, d'après les propriétés des extremums pour les fonctions à une variable,

$$\partial_k f(x_*) = 0.$$

Donc,

Proposition 5 - C.P.O. - Extremums libres

Si f atteint un extremum en x_*, alors $\nabla f(x_*) = \overrightarrow{0}$.

III.2 - Condition pour un extremum local

On suppose que x_* satisfait les conditions du premier ordre. Le développement limité à l'ordre 2 s'écrit :

$$f(x_*+h) - f(x_*) = \frac{1}{2}h^T H(f)(x_*)h + \|h\|^2 \varepsilon(h).$$

Ainsi, pour h assez petit, f est du signe de $h^T H(f)(x_*)h$.

Proposition 6 - C.S.O. - Extremums libres

* Si, $H(f)(x)$ est définie positive, alors f admet un minimum local en x_*.
* Si, $H(f)(x)$ est définie négative, alors f admet un maximum local en x_*.
* S'il existe h_1 et h_2 tels que

$$h_1^T H(f)(x_*)h_1 > 0 \text{ et } h_2^T H(f)(x_*)h_2 < 0$$

alors f n'admet pas d'extremum en x_*.

Dans le cas de la dimension 2, on peut utiliser les notations de Monge. En général, on peut utiliser la réduction de Gauss ou le critère de Sylvester.

III.3 - Condition pour un extremum global

On suppose que x_* satisfait les conditions du premier ordre.

Proposition 7 - Convexité - Extremums libres

* Si la fonction f est convexe, alors f admet un minimum global en x_*.
* Si la fonction f est concave, alors f admet un maximum global en x_*.

Le résultat suivant est hors programme mais mérite d'être cité.

Proposition 8 - Théorème des bornes

Si la fonction f est continue sur un ensemble fermé borné non vide, alors f est bornée et atteint ses bornes.

Remarque 2

Pour montrer qu'un maximum (resp. minimum) local n'est pas un maximum (resp. minimum) global, il suffit de trouver une direction telle que $\lim\limits_{\|x\|\to+\infty} f(x) = +\infty$ (resp. $\lim\limits_{\|x\|\to+\infty} f(x) = -\infty$).

IV - Optimisation avec contraintes

Soit $g_1,\dots,g_p$ des fonctions définies sur $\mathbb{R}^n$.
On cherche à déterminer les valeurs de x qui satisfont $g_1(x) = \cdots = g_n(x) = 0$ pour lesquelles f atteint un extremum.

Définition 3 - Jacobienne & Lagrangien

* La Jacobienne de $g_1, \dots, g_p$ est la matrice définie par

$$J(g_1, \dots, g_p)(x) = \begin{pmatrix} \partial_1 g_1(x) & \cdots & \partial_n g_1(x) \\ \vdots & & \vdots \\ \partial_1 g_p(x) & \cdots & \partial_n g_p(x) \end{pmatrix} \in \mathscr{M}_{p,n}(\mathbb{R}).$$

* Le Lagrangien est la fonction définie par

$$\mathscr{L}(f)(x, \lambda) = f(x) - \sum_{i=1}^{p} \lambda_i g_i(x).$$

* La hessienne réduite du Lagrangien est la hessienne du Lagrangien par rapport à ses seules variables x :

$$\overline{H}(\mathscr{L})(x, \lambda) = \left(\frac{\partial^2 \mathscr{L}(f)}{\partial x_i \partial x_j}(x, \lambda) \right)_{1 \leqslant i,j \leqslant n} \in \mathscr{M}_n(\mathbb{R}).$$

* La hessienne bordée est la matrice définie par blocs par

$$H\mathscr{L}(x, \lambda) = \begin{bmatrix} 0 & -J(g_1, \dots, g_p)(x, \lambda)^T \\ -J(g_1, \dots, g_p)(x, \lambda) & \overline{H}(\mathscr{L})(x, \lambda) \end{bmatrix} \in \mathscr{M}_{n+p}(\mathbb{R}).$$

Remarque 3

La hessienne bordée doit son nom à la hessienne réduite qui a été bordée par les dérviées premières des contraintes. On constate qu'il s'agit de la hessienne du Lagrangien où on a réordonné les variables : en premier les λ, ensuite les x.

IV.1 - Qualification des contraintes

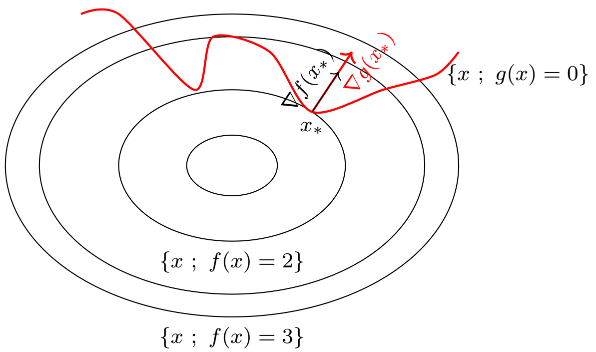
Définition 4 - Qualification des contraintes

Les contraintes sont qualifiées au point x si

$$\mathrm{Rg}\,(J(g_1, \dots, g_p)(x)) = p.$$

IV.2 - Conditions du premier ordre

Dans le cas d'une seule contrainte $p = 1$. Intuitivement, lorsqu'un extremum sous contraintes est atteint en un point x_*, la courbe représentant g est tangente à une ligne de niveau de f. Ainsi, dès que le gradient de g est non nul, il existe un réel λ_* tel que $\nabla f(x_*) = \lambda_* \nabla g(x_*)$.



Proposition 9 - C.P.O. - Extremums liés

Plus généralement, si la fonction f admet sous contraintes un extremum en x_* et que les contraintes sont qualifiées en x_*, alors il existe un unique $\lambda_* = (\lambda_{1,*}, \dots, \lambda_{p,*}) \in \mathbb{R}^p$ tel que

$$\nabla \mathscr{L}(x_*, \lambda_*) = \overrightarrow{0}.$$

La condition s'écrit également

$$\nabla \mathscr{L}(x_*, \lambda_*) = \overrightarrow{0} \Leftrightarrow \begin{cases} \forall\ i \in [\![1, n]\!],\ \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial x_i}(x_*, \lambda_*) & = 0 \\ \forall\ i \in [\![1, p]\!],\ \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \lambda_i}(x_*, \lambda_*) & = 0 \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} \forall\, i \in [\![1,n]\!],\ \frac{\partial f}{\partial x_i}(x_*) & = \sum\limits_{j=1}^{p} \lambda_{j,*} \frac{\partial g_j}{\partial x_i}(x_*) \\ \forall\, i \in [\![1,p]\!],\ g_i(x_*) & = 0 \end{cases}$$

IV.3 - Conditions du second ordre sur la hessienne réduite pour un extremum local

On suppose que (x_*, λ_*) satisfait les conditions du premier ordre.
On remarque alors que le développement limité à l'ordre 2 s'écrit

$$\mathscr{L}(x_* + h, \lambda_*) - \mathscr{L}(x_*, \lambda_*) = \frac{1}{2} h^T \overline{H}(\mathscr{L})(x_*, \lambda_*) h + \|h\|^2 \varepsilon(h)$$
$$f(x_* + h) - f(x_*) = \frac{1}{2} h^T \overline{H}(\mathscr{L})(x_*, \lambda_*) h + \|h\|^2 \varepsilon(h).$$

Ainsi, le signe de la hessienne réduite du Lagrangien permet de détecter les extremums.
En outre, l'extremum étant calculé sous contraintes,

$$\forall\, i \in [\![1,p]\!],\ g_i(x_* + h) = g_i(x_*) = 0.$$

En utilisant le développement limité à l'ordre 1 de g_i,

$$g_i(x_* + h) = g_i(x_*) + \langle \nabla g_i(x_*), h \rangle + \|h\|\, \varepsilon(h)$$
$$\langle \nabla g_i(x_*), h \rangle + \|h\|\, \varepsilon(h) = 0,$$

soit $\sum\limits_{j=1}^{n} h_j \frac{\partial g_i}{\partial x_j}(x_*) = 0$. Cette propriété étant vraie pour tout $i \in [\![1,p]\!]$,

$$h \in \operatorname{Ker} J(g_1, \ldots, g_p)(x_*).$$

On obtient ainsi la condition suffisante suivante :

Proposition 10 - C.S.O. - Extremums liés

* Si $\overline{H}(\mathscr{L})(x_*, \lambda_*)$ est définie positive sur le noyau de $J(g_1, \ldots, g_p)(x_*)$, i.e.

$$\forall\, h \in \operatorname{Ker} J(g_1, \ldots, g_p)(x_*) \neq \overrightarrow{0},\ h^T \overline{H}(\mathscr{L})(x_*, \lambda_*) h > 0,$$

alors f admet un minimum local sous contraintes en x_*.

* Si $\overline{H}(\mathscr{L})(x_*, \lambda_*)$ est définie négative sur le noyau de $J(g_1, \ldots, g_p)(x_*)$, i.e.

$$\forall\, h \in \operatorname{Ker} J(g_1, \ldots, g_p)(x_*) \neq \overrightarrow{0},\ h^T \overline{H}(\mathscr{L})(x_*, \lambda_*) h < 0,$$

alors f admet un maximum local sous contraintes en x_*.
* S'il existe $h_1,\ h_2 \in \operatorname{Ker} J(g_1, \ldots, g_p)(x_*) \neq \overrightarrow{0}$ tels que

$$h_1^T \overline{H}(\mathscr{L})(x_*, \lambda_*) h_1 < 0 \text{ et } h_2^T \overline{H}(\mathscr{L})(x_*, \lambda_*) h_2 > 0$$

alors f n'admet pas d'extremum local sous contraintes en x_*.

IV.4 - Conditions du second ordre sur la hessienne bordée pour un extremum local

Soit (x_*, λ_*) satisfaisant les conditions du premier ordre. On peut éviter le calcul du noyau de la Jacobienne en utilisant la hessienne bordée. On note H_i la matrice extraite de $H\mathscr{L}(x_*,\ \lambda_*)$ en ne gardant que les i premières lignes et les i premières colonnes.

Proposition 11 - C.S.O. avec Hessienne bordée - Extremums liés

* Si $(-1)^p \det(H_j) > 0$ pour tout $j \in [\![2p+1, n+p]\!]$, alors f atteint sous contraintes un minimum local en x_*.
* Si $(-1)^{j-p} \det(H_j) > 0$ pour tout $j \in [\![2p+1, n+p]\!]$, alors f atteint sous contraintes un maximum local en x_*.
* Si $(-1)^p \det(H_j) \neq 0$ pour tout $j \in [\![2p+1, n+p]\!]$ et ne satisfait pas une des conditions précédentes, alors f n'atteint pas d'extremum en x_*.

On propose une justification de cette propriété dans la Partie 7.5.

IV.5 - Conditions du second ordre pour un extremum global

Soit (x_*, λ_*) un point satisfaisant les conditions du premier ordre. On remarque que

$$\mathscr{L}(x_* + h, \lambda_*) - \mathscr{L}(x_*, \lambda_*) = f(x_* + h) - f(x_*)$$

car x_* et $x_* + h$ satisfont les contraintes.
Ainsi, en considérant la fonction $\varphi : x \mapsto \mathscr{L}(x, \lambda_*)$, le point x_* est un point critique de φ. De plus, la hessienne de φ est égale à la hessienne réduite du Lagrangien. Ainsi, la convexité de φ s'obtient en étudiant $\overline{H}(\mathscr{L})$.
Ainsi, si φ est convexe (resp. concave), elle atteint un minimum (resp. maximum) global en x_*. Il en va alors de même pour f.

Proposition 12 - Convexité - Extremums libres

- Si le Lagrangien réduit à ses variables x est concave, alors f atteint un maximum global en x_*.
- Si le Lagrangien réduit à ses variables x est convexe, alors f atteint un minimum global en x_*.

Remarque 4

Si les contraintes sont linéaires, alors $\overline{H}(\mathscr{L}) = H(f)$. La convexité (resp. concavité) de f implique alors la convexité (resp. concavité) du Lagrangien.

V - Hessienne bordée et Mineurs principaux diagonaux

Soit $J = \begin{bmatrix} J_1 & J_2 \end{bmatrix} \in \mathscr{M}_{p,n}(\mathbb{R})$ et $\overline{H} = \begin{bmatrix} H_{1,1} & H_{1,2} \\ H_{1,2}^T & H_{2,2} \end{bmatrix} \in \mathscr{M}_{n+p}(\mathbb{R})$ une matrice symétrique carrée, où J_1, $H_{1,1} \in \mathscr{M}_p(\mathbb{R})$.
On suppose que $\text{Rg}(J) = p < n$, $\det(J_1) \neq 0$ et on pose

$$H = \begin{bmatrix} 0 & J^T \\ J & \overline{H} \end{bmatrix} \in \mathscr{M}_{n+p}(\mathbb{R}).$$

Proposition 13

- H est définie positive sur $\text{Ker}(J)$ si et seulement si $(-1)^p \det(H_j) > 0$ pour tout $j \in [\![2p+1, p+n]\!]$.
- H est définie négative sur $\text{Ker}(J)$ si et seulement si $(-1)^{p-j} \det(H_j) > 0$ pour tout $j \in [\![2p+1, p+n]\!]$.

Ce résultat repose sur un changement de base de la forme quadratique ainsi que sur la caractérisation des formes définies avec les mineurs diagonaux principaux.

- Soit $\begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_p \end{pmatrix} \in \text{Ker}\, J$. Alors,

$$J_1 \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_p \end{pmatrix} + J_2 \begin{pmatrix} x_{p+1} \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_p \end{pmatrix} = \underbrace{-J_1^{-1} J_2}_{K} \begin{pmatrix} x_{p+1} \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}.$$

- Comme $\text{Rg}(J) = p$ et l'endomorphisme canoniquement associé à J appartient à $\mathscr{M}_{n,p}(\mathbb{K})$, d'après le théorème du rang, $\dim \text{Ker}\, J = n - p$. De plus, on remarque que $\begin{bmatrix} K \\ I_{n-p} \end{bmatrix}$ est la matrice d'une base de $\text{Ker}\, J$.
- D'après les formules de changement de base pour les formes quadratiques, la matrice de la restriction de $\overline{H}$ à $\text{Ker}\, J$ est donc

$$\begin{aligned} E &= \begin{bmatrix} K^T I_{n-p} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} H_{1,1} & H_{1,2} \\ H_{1,2}^T & H_{2,2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K \\ I_{n-p} \end{bmatrix} \\ &= K^T H_{1,1} K + K^T H_{1,2} + H_{1,2}^T K + A_{2,2}. \end{aligned}$$

- Par ailleurs, en effectuant un changement de base sur H, et en utilisant les définitions de E et de K, on obtient

$$\begin{bmatrix} I_p & 0 & 0 \\ 0 & I_p & 0 \\ 0 & K^T & I_{n-p} \end{bmatrix} H \begin{bmatrix} I_p & 0 & 0 \\ 0 & I_p & K \\ 0 & 0 & I_{n-p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & J_1 & 0 \\ J_1^T & H_{1,1} & C_1 \\ 0 & C_1^T & E \end{bmatrix}.$$

En utilisant un raisonnement similaire, on remarque que H_j est, à un changement de base près, $\begin{bmatrix} 0 & J_1 & 0 \\ J_1^T & H_{1,1} & C_{1,j} \\ 0 & C_{1,j}^T & E_{j-2p} \end{bmatrix}$.

* Enfin, en utilisant les propriétés des déterminants,

$$\begin{aligned} \det(H_j) &= (-1)^p \det \begin{bmatrix} J_1^T & H_{1,1} & C_{1,j} \\ 0 & J_1 & 0 \\ 0 & C_{1,j}^T & E_{j-2p} \end{bmatrix} \\ &= (-1)^p \det(J_1^T) \begin{bmatrix} J_1 & 0 \\ C_{1,j}^T & E_{j-2p} \end{bmatrix} \\ &= (-1)^p \det(J_1)^2 \det(E_{j-2p}). \end{aligned}$$

* En utilisant le critère de Sylvester, E est définie positive si et seulement si $\det(E_{j-2p}) > 0$ pour tout $j \geqslant 2p+1$ donc si $(-1)^p \det(H_j) > 0$ pour tout $j \geqslant 2p+1$.
  On obtient la caractérisation attendue si E est définie négative.