# Annexe A

# Algorithmes d'optimisation pour un critère de moindre carrés

Optimisation d'un critère et en particulier un critère de moindre carrés (MC) se trouve au cœur d'un grand nombre de problèmes. L'objet de cette annexe est de fournir une présentation des différents algorithmes d'optimisation que l'on peut utiliser pour cette tâche, surtout dans les cas d'un système non linéaire. Le cas linéaire s'en déduit, bien entendu, comme un cas particulier.

## A.1 Introduction

Considérons tout d'abord le cas général de la minimisation d'un critère $J(\boldsymbol{x})$, c'est à dire le calcul de

$$\widehat{\boldsymbol{x}} = \arg\min_{\boldsymbol{x}} \{J(\boldsymbol{x})\}$$

Lorsque le critère est unimodal, on peut alors utiliser les algorithmes d'optimisation classique du type gradient pour calculer la solution. Notant par :

$$\boldsymbol{g} = \nabla J(\boldsymbol{x}) = \left[\frac{\partial J}{\partial x_1}, \cdots, \frac{\partial J}{\partial x_n}\right]^t \quad \text{le gradient du } J, \quad \boldsymbol{g}^k = \nabla J\left(\boldsymbol{x}^k\right)$$

et par

$$\boldsymbol{H} = \nabla^2 J(\boldsymbol{x}) = \left\{\frac{\partial^2 J}{\partial x_i \partial x_j}\right\} \quad \text{la matrice Hessienne du } J, \quad \boldsymbol{H}^k = \nabla^2 J\left(\boldsymbol{x}^k\right)$$

sa matrice Hessienne, la majorité des méthodes d'optimisation locale calcule la solution d'une manière itérative suivante :

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{x}^{(k+1)} &= \boldsymbol{x}^{(k)} - \alpha^{(k)} \boldsymbol{D}^{(k)} \nabla J\left(\boldsymbol{x}^k\right) \\
&= \boldsymbol{x}^{(k)} - \alpha^{(k)} \boldsymbol{D}^{(k)} \boldsymbol{g}^k \\
&= \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha^{(k)} \boldsymbol{d}^{(k)}
\end{aligned}$$

Suivant les différents choix pour $\alpha^{(k)}$ et $\boldsymbol{D}^{(k)}$ on peut distinguer les algorithmes suivants :

1. **Méthodes de premier ordre ou de gradient**

   - gradient à pas fixe : $\boldsymbol{D}^{(k)} = \boldsymbol{I}$, $\alpha^{(k)} = \alpha$ et $\boldsymbol{d}^{(k)} = -\boldsymbol{g}^{(k)}$
   - gradient à pas variable : $\boldsymbol{D}^{(k)} = \boldsymbol{I}$ et

     $$\alpha^{(k)} = -\frac{\boldsymbol{g}^{(k)^t} \boldsymbol{g}^{(k)}}{\boldsymbol{g}^{(k)^t} \boldsymbol{H}^k \boldsymbol{g}^{(k)}} = \frac{\|\boldsymbol{g}^k\|^2}{\|\boldsymbol{g}^k\|_H^2}$$

   - gradient conjugué :

     $$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha^{(k)} \boldsymbol{d}^{(k)} \quad \alpha^{(k)} = -\frac{\boldsymbol{d}^{(k)^t} \boldsymbol{g}^{(k)}}{\boldsymbol{d}^{(k)^t} \boldsymbol{H}^k \boldsymbol{d}^{(k)}}$$

     $$\boldsymbol{d}^{(k+1)} = \boldsymbol{d}^{(k)} + \beta^{(k)} \boldsymbol{g}^{(k)} \quad \beta^{(k)} = -\frac{\boldsymbol{g}^{(k)^t} \boldsymbol{g}^{(k)}}{\boldsymbol{g}^{(k-1)^t} \boldsymbol{g}^{(k-1)}}$$

2. **Méthodes de second ordre**

   - Méthode de Newton : $\boldsymbol{D}^{(k)} = \left[\boldsymbol{H}^{(k)}\right]^{-1}$

     $$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} - \alpha^{(k)} \left[\boldsymbol{H}^{(k)}\right]^{-1} \boldsymbol{g}^{(k)}$$

   - Méthode de Newton approchée : $\boldsymbol{D}^{(k)} = \operatorname{diag}\left\{d_1^{(k)}, \cdots, d_n^{(k)}\right\}$ avec

     $$d_i^{(k)} = \boldsymbol{D}_{ii} = \left(\frac{\partial^2 J}{\partial {x_i}^2}\right)^{-1}$$

     les éléments diagonaux de la matrice Hessienne.

– Méthodes de Newton modifiées :

$$\boldsymbol{D}^{(k)} = \boldsymbol{D}^{(0)} = \left[\boldsymbol{H}^{(0)}\right]^{-1} = \boldsymbol{D}$$

ou

$$\boldsymbol{D}^{(k)} = \boldsymbol{D}^{(0)} = \operatorname{diag}\left\{d_1^{(0)}, \cdots, d_n^{(0)}\right\} \quad \text{avec} \quad d_i^{(0)} = \left(\frac{\partial^2 J}{\partial {x_i}^2}(\boldsymbol{x})^{(0)}\right)^{-1}$$

## A.2 Cas des critères moindres carrés

Considérons maintenant le cas des critères de la forme

$$J(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})\|^2 = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{M} |f_i(\boldsymbol{x})|^2$$

On a alors

$$\frac{\partial J(\boldsymbol{x})}{\partial x_n} = \sum_{i=1}^{M} \frac{\partial f_i}{\partial x_n} f_i$$

et

$$\frac{\partial^2 J(\boldsymbol{x})}{\partial x_n \partial x_m} = \sum_{i=1}^{M} \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_n \partial x_m} f_i + \frac{\partial f_i}{\partial x_n}\frac{\partial f_i}{\partial x_m}$$

Si on note par

$$\boldsymbol{F} = \left[\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial \boldsymbol{x}}\right] = \left[\nabla f_1 \vdots \cdots \vdots \nabla f_M\right] = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_M}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & & & \frac{\partial f_M}{\partial x_2} \\ \vdots & & & \\ & & & \frac{\partial f_M}{\partial x_{N-1}} \\ \frac{\partial f_1}{\partial x_N} & \frac{\partial f_2}{\partial x_N} & & \frac{\partial f_M}{\partial x_N} \end{pmatrix}$$

on a

$$\nabla^2 J(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{F}^t\boldsymbol{F} + \sum_{i=1}^{M} \frac{\partial^2 g_i}{\partial x_n \partial x_m} g_i$$

et on peut alors distinguer les algorithmes suivants :

– Méthode de Newton : $\boldsymbol{D}^{(k)} = \left[\nabla^2 J(\boldsymbol{x}^{(k)})\right]^{-1}$

– Méthode de Gauss-Newton : $\boldsymbol{D}^{(k)} = (\boldsymbol{F}^t\boldsymbol{F})^{-1}$

– Méthodes de Levenberg-Marquart :

$$\boldsymbol{D}^{(k)} = (\boldsymbol{F}^t\boldsymbol{F} + \lambda^{(k)}\boldsymbol{I})^{-1}$$

avec $\lambda^{(k)}$ une suite décroissante de nombres positifs.
– pour $\lambda$ grand : gradient
– pour $\lambda$ petit : Newton

– Méthodes de Quasi-Newton :

$$\boldsymbol{D}^{(k+1)} = \boldsymbol{D}^{(k)} + \frac{\boldsymbol{p}^{(k)}\boldsymbol{p}^{t^{(k)}}}{\boldsymbol{p}^{t^{(k)}}\boldsymbol{Q}^{(k)}} - \frac{\boldsymbol{D}^{(k)}\boldsymbol{Q}^{(k)}\boldsymbol{Q}^{t^{(k)}}\boldsymbol{D}^{(k)}}{\boldsymbol{Q}^{t^{(k)}}\boldsymbol{D}^{(k)}\boldsymbol{Q}^{(k)}} + \eta^{(k)}\tau^{(k)}\boldsymbol{v}^{(k)}\boldsymbol{v}^{t^{(k)}}$$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{p}^{(k)} &= \boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)} \\
\boldsymbol{Q}^{(k)} &= \nabla J(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) - \nabla J(\boldsymbol{x}^{(k)}) \\
\boldsymbol{v}^{(k)} &= \frac{\boldsymbol{p}^{(k)}}{\boldsymbol{p}^{t^{(k)}}\boldsymbol{Q}^{(k)}} - \frac{\boldsymbol{D}^{(k)}\boldsymbol{Q}^{(k)}}{\tau^{(k)}} \\
\tau^{(k)} &= \boldsymbol{Q}^{t^{(k)}}\boldsymbol{D}^{(k)}\boldsymbol{Q}^{(k)}
\end{aligned}$$

  – Méthode de Davidon-Fletcher-Powel (DFP) : $\eta^{(k)} = 0$
  – Méthode de Broyden-Fletcher-Golfand-Shayno (BGFGS) : $\eta^{(k)} = 1$

## A.3 Cas des problèmes inverses avec un bruit additif

Considérons maintenant le modèle :

$$y_i = h_i(\boldsymbol{x}) + b_i, \quad , i = 1, \ldots, M$$

ou sous sa forme vectorielle :

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{b},$$

où $\boldsymbol{y}$ sont les données et $\boldsymbol{x}$ les inconnues.

Le critère des moindres carrés s'écrit :

$$J(\boldsymbol{x}) = \|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x})\|^2 = [\boldsymbol{y} - \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x})]^t[\boldsymbol{y} - \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x})] = \sum_{i=1}^{M} (y_i - h_i(\boldsymbol{x}))^2$$

Lorsque le système est non linéaire, ce critère n'est pas quadratique et, en général, peut être multimodal. Cependant l'usage des méthodes du type gradient est courant pour calculer une solution correspondant à un minimum local de ce critère. L'objet de cette annexe est de fournir une description succincte de ces méthodes.

Notons le gradient du critère par :

$$\nabla J(\boldsymbol{x}) = \left[\frac{\partial J}{\partial x_j}\right] = \left[\frac{\partial J}{\partial x_1}, \cdots, \frac{\partial J}{\partial x_N}\right]^t$$

et la matrice Hessien du critère par :

$$\nabla^2 J(\boldsymbol{x}) = \left[\frac{\partial^2 J}{\partial x_k \partial x_l}\right] = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 J}{\partial {x_1}^2} & \frac{\partial^2 J}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 J}{\partial x_1 \partial x_N} \\ \frac{\partial^2 J}{\partial x_2 \partial x_1} & & & \\ \vdots & & & \\ & & & \frac{\partial^2 J}{\partial x_{N-1} \partial x_N} \\ \frac{\partial^2 J}{\partial x_N \partial x_1} & & \frac{\partial^2 J}{\partial x_N \partial x_{N-1}} & \frac{\partial^2 J}{\partial {x_N}^2} \end{pmatrix}$$

Notons aussi :

$$\nabla h_i(\boldsymbol{x}) = \left[\frac{\partial h_i}{\partial x_j}\right] = \left[\frac{\partial h_i}{\partial x_1}, \cdots, \frac{\partial h_i}{\partial x_N}\right]^t,$$

$$\nabla^2 h_i = \left[\frac{\partial^2 h_i}{\partial x_k \partial x_l}\right] = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 h_i}{\partial {x_1}^2} & \frac{\partial^2 h_i}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 h_i}{\partial x_1 \partial x_N} \\ \frac{\partial^2 h_i}{\partial x_2 \partial x_1} & & & \\ \vdots & & & \\ & & & \frac{\partial^2 h_i}{\partial x_{N-1} \partial x_N} \\ \frac{\partial^2 h_i}{\partial x_N \partial x_1} & & \frac{\partial^2 h_i}{\partial x_N \partial x_{N-1}} & \frac{\partial^2 h_i}{\partial {x_N}^2} \end{pmatrix}$$

et

$$\boldsymbol{H} = \left[\frac{\partial \boldsymbol{h}}{\partial \boldsymbol{x}}\right] = \left[\nabla h_1 \vdots \cdots \vdots \nabla h_M\right] = \begin{pmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial x_1} & \frac{\partial h_2}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial h_M}{\partial x_1} \\ \frac{\partial h_1}{\partial x_2} & & & \frac{\partial h_M}{\partial x_2} \\ \vdots & & & \\ & & & \frac{\partial h_M}{\partial x_{N-1}} \\ \frac{\partial h_1}{\partial x_N} & \frac{\partial h_2}{\partial x_N} & & \frac{\partial h_M}{\partial x_N} \end{pmatrix}$$

On a alors

$$
\begin{aligned}
\nabla J(\boldsymbol{x}) &= -2\left[\frac{\partial \boldsymbol{h}}{\partial \boldsymbol{x}}\right]^t [\boldsymbol{y}-\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x})] \\
&= -2\,[\boldsymbol{H}(\boldsymbol{x})]^t\,[\boldsymbol{y}-\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x})] \\
\nabla^2 J(\boldsymbol{x}) &= 2\left[\frac{\partial \boldsymbol{h}}{\partial \boldsymbol{x}}\right]^t \left[\frac{\partial \boldsymbol{h}}{\partial \boldsymbol{x}}\right] + 2\left[\sum_i [y_i - h_i(\boldsymbol{x})]\,\nabla^2 h_i(\boldsymbol{x})\right] \\
&= 2\,[\boldsymbol{H}(\boldsymbol{x})]^t\,[\boldsymbol{H}(\boldsymbol{x})] + 2\left[\sum_i [y_i - h_i(\boldsymbol{x})]\,\nabla^2 h_i(\boldsymbol{x})\right]
\end{aligned}
$$

Notons que pour un système linéaire on a

$$
y_i = h_i(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{N} h_{ij} x_j \quad \Longrightarrow \quad \boldsymbol{y} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b},
$$

avec

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{A} &= \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1N} \\ h_{21} & \cdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & & & \vdots \\ h_{M1} & \cdots & \cdots & h_{MN} \end{pmatrix} \\
J(\boldsymbol{x}) &= \|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|^2 = [\boldsymbol{y}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}]^t[\boldsymbol{y}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}] \\
\boldsymbol{H} &= \boldsymbol{A} \\
\nabla^2 h_i &= \left[\frac{\partial^2 h_i}{\partial \boldsymbol{x}^2}\right] = 0 \\
\nabla J &= -2\boldsymbol{A}^t[\boldsymbol{y}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}] \\
\nabla^2 J &= 2\boldsymbol{A}^t\boldsymbol{A}
\end{aligned}
$$

car $\frac{\partial^2 h_i}{\partial x_k \partial x_l} = 0, \forall k, l$.

Développement à l'ordre deux, en série de Taylor de $J(\boldsymbol{x})$ autour d'un point $\boldsymbol{x}^*$ donne

$$
J(\boldsymbol{x}) = J(\boldsymbol{x}^*) + [\nabla J(\boldsymbol{x}^*)]^t\,[\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*] + \frac{1}{2}[\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*]^t \left[\nabla^2 J(\boldsymbol{x}^*)\right] [\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*]
$$

Conditions d'existence d'une solution :

$$
\begin{cases}
\nabla J(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0} \\
\nabla^2 J(\boldsymbol{x}^*) \geq 0 \quad \text{(C.N. dnn)} \\
\nabla^2 J(\boldsymbol{x}^*) > 0 \quad \text{(C.S. dp)}
\end{cases}
$$

La première condition d'existence d'une solution donne lieu au système d'équations non linéaires :

$$
\nabla J(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0} \quad \Longrightarrow \quad [\boldsymbol{H}(\boldsymbol{x}^*)]^t\,[\boldsymbol{y}-\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*)] = \mathbf{0}
$$

**Méthode de Gauss :**
Développement à l'ordre 1 de $\boldsymbol{y}$ donne :

$$
\boldsymbol{y} = \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*) + \left[\frac{\partial \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*)}{\partial \boldsymbol{x}}\right]^t [\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*] + \boldsymbol{b} = \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*) + \boldsymbol{H}^t[\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*] + \boldsymbol{b}
$$

$$\nabla J(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0} \quad \Longrightarrow \quad \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^* + [\boldsymbol{H}^t\boldsymbol{H}]^{-1}\boldsymbol{H}^t[\boldsymbol{y} - \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*)]$$

Algorithme :

$$\boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{x}^{(k-1)} + \alpha[\boldsymbol{H}^t\boldsymbol{H}]^{-1}\boldsymbol{H}^t[\boldsymbol{y} - \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^{(k)})]$$

**Méthode de Newton–Raphson :**
Développement à l'ordre 2 de $\boldsymbol{y}$ donne :

$$\nabla J(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0} \Longrightarrow \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^* - \left[\nabla^2 J(\boldsymbol{x}^*)\right]^{-1}[\nabla J(\boldsymbol{x}^*)]$$

Algorithme :

$$\boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{x}^{(k-1)} + \alpha\left[\boldsymbol{H}^t\boldsymbol{H} + \sum_i [y_i - h_i(\boldsymbol{x}^{(k)})]\frac{\partial^2 h_i}{\partial \boldsymbol{x}^2}(\boldsymbol{x}^{(k)})\right]^{-1}\boldsymbol{H}^t[\boldsymbol{y} - \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^{(k)})]$$

## A.4 Comparaison entre les méthodes

Notons

$$\boldsymbol{H}_k = \left[\boldsymbol{H}(\boldsymbol{x}^{(k)})\right], \quad \text{et} \quad \boldsymbol{M}_k = \left[\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}^{(k)})\right].$$

On a alors dans les deux cas :

$$\boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{x}^{(k-1)} + \alpha\boldsymbol{M}_k^{-1}\boldsymbol{H}_k^t[\boldsymbol{y} - \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^{(k)})]$$

– Méthode de Newton–Raphson :

$$\boldsymbol{M}_k = \left[\boldsymbol{H}_k^t\boldsymbol{H}_k + \sum_i [y_i - h_i(\boldsymbol{x}^{(k)})]\nabla^2 h_i(\boldsymbol{x}^{(k)})\right]$$

– Méthode de Gauss :

$$\boldsymbol{M}_k = [\boldsymbol{H}_k^t\boldsymbol{H}_k]$$

– Méthode du gradient conjugué :

$$\boldsymbol{M}_k = [\boldsymbol{H}_k^t\boldsymbol{H}_k], \quad \boldsymbol{H}_k = \left[\frac{\partial \boldsymbol{h}}{\partial \boldsymbol{x}}(\boldsymbol{x}^{(k)})\right] \quad \text{est supposée Toeplitz}$$

– Méthode du gradient :

$$\boldsymbol{M}_k = \boldsymbol{I}$$

Dans le cas d'un système linéaire on a

$$\boldsymbol{H}_k = \boldsymbol{H} = \boldsymbol{A}, \quad \boldsymbol{M}_k = \boldsymbol{M} = \boldsymbol{H}^t\boldsymbol{H}.$$

Ceci vaut dire qu'il y a l'équivalence entre la méthode de Newton–Raphson et la méthode de Gauss.

Si le système linéaire et invariant par translation on a

$$\boldsymbol{H}_k = \boldsymbol{H} = \boldsymbol{A} \quad \text{(Toeplitz)}, \quad \boldsymbol{M}_k = \boldsymbol{M} = \boldsymbol{H}^t\boldsymbol{H} \quad \text{(Toeplitz symetrique)}$$

Ceci vaut dire qu'il y a l'équivalence entre la méthode de Newton–Raphson, la méthode de Gauss et la méthode du gradient conjugué.