

<u>MINIMISATION OU MAXIMISATION NUMÉRIQUE :</u>	<u>2</u>
INTRODUCTION :	2
<u>RACINE D'UNE FONCTION:</u>	<u>3</u>
MÉTHODE DE NEWTON POUR TROUVER UNE RACINE D'UNE FONCTION $F(X)$:	3
EXEMPLE:	3
MÉTHODE DE LA BISSECTRICE:	4
MÉTHODE DE LA SÉCANTE ET DE LA FAUSSE POSITION:	4
<u>MINIMISATION UNI-DIMENSIONNELLE.....</u>	<u>5</u>
RECHERCHE SUR GRILLE	5
RECHERCHE PAR SECTION DU NOMBRE D'OR ET FIBONACCI.....	5
APPROXIMATION QUADRATIQUE ET EXTRAPOLATION	6
MÉTHODE ESSAI-ERREUR	7
<u>MINIMISATION MULTI-DIMENSIONNELLE</u>	<u>7</u>
RECHERCHE SUR GRILLE ET ALÉATOIRE.....	7
RECHERCHE PAR VARIATION D'UN SEUL PARAMÈTRE.....	8
MÉTHODE DE ROSENBROCK.....	8
MÉTHODE DU SIMPLEXE (POLYGONE):	9
MÉTHODES DE GRADIENTS - PLUS GRANDE PENTE (« STEEPEST DESCENT »)	10
NEWTON-RAPHSON.....	11
FORMES QUADRATIQUES DÉFINIES POSITIVES	12
MÉTHODE DES DIRECTIONS CONJUGUÉES	14
GRADIENTS CONJUGUÉS	16
MINIMISEURS À MÉTRIQUE VARIABLE (VMM).....	17
THÉORIE.....	18
MÉTHODE DE DAVIDON-FLETCHER-POWELL	19
FORMULE DE RANG 1 :	20
APPROCHE UNIFIÉE DE FLETCHER POUR LES MÉTHODES À MÉTRIQUE VARIABLE :	21
RECHERCHE LINÉAIRE APPROCHÉE :	23
TECHNIQUES SPÉCIALISÉES.....	23
MINIMISATION CHI-CARRÉ.....	23
LIKELIHOOD MAXIMISATION	24
MINIMA LOCAUX ET GLOBAUX :	25
LE PROBLÈME DES MINIMA MULTIPLES :	25
L'ALGORITHME DE GELFAND	25
MÉTHODE DE GOLDSTEIN-PRICE.....	26
<u>AJUSTEMENT DE COURBE THÉORIQUE SUR DES POINTS EXPÉRIMENTAUX.</u>	<u>27</u>

Minimisation ou maximisation numérique :

[la partie minimisation est reprise en grande partie de « Function minimization » de F. James, CERN, Geneva, Proceedings of the 1972 CERN Computing and Data Processing School, Petisau, Austria, 10-24 September, 1972]

Introduction :

La recherche du minimum ou du maximum d'une fonction trouve des applications dans tous les domaines.

Pour obtenir le minimum global d'une fonction, il serait nécessaire de parcourir tout l'espace des variables indépendantes, ce qui est généralement impossible vu la grandeur de l'espace et le nombre de variables. De manière générale, toutes les méthodes de minimisation ne permettent de trouver que des minimums locaux. En outre, la surface d'une fonction à grand nombre de variables peut être très accidentée, ce qui limite les méthodes locales de recherche de minimum (exemple: minimisation d'énergie en modélisation moléculaire: les structures trouvées par minimisation d'énergie sont donc toujours relativement proches de la structure de départ).

Toute fonction ayant un minimum peut être assez bien approchée par une parabole près du minimum (développement limité). En effet, on peut exprimer la fonction f en x_0 en série de Taylor :

$$f(x_0 + \partial x) = f(x_0) + \partial x \frac{df}{dx}(x_0) + \frac{\partial x^2}{2} \frac{d^2 f}{dx^2}(x_0) + \frac{\partial x^3}{3!} \frac{d^3 f}{dx^3}(x_0) + \dots$$

Si le minimum est x_0 , alors le 2ème terme $\frac{df}{dx}(x_0) = 0$, donc le terme dominant est le terme en

∂x^2 : en effet, ∂x est petit, donc ∂x^2 est encore plus petit, et les puissances suivantes encore plus.

Donc on peut négliger les termes en puissances supérieures à 2 devant ∂x^2 . On a finalement :

$$f(x_0 + \partial x) \cong f(x_0) + \frac{\partial x^2}{2} \frac{d^2 f}{dx^2}(x_0)$$

et on peut donc considérer que la fonction f est une fonction quadratique de δx (parabole) près du minimum, de la forme

$$f(x_0 + \partial x) \cong A + B \partial x^2, \text{ avec } A \text{ et } B \text{ constantes.}$$

Note 1 : quand la fonction f est une fonction à plusieurs variables (c'est à dire que x est un vecteur), on a de même l'annulation de toutes les dérivées partielles $\frac{\partial f}{\partial x_i}$ à un minimum de la

fonction (mais d'autres points qu'un maximum ou un minimum existent où les dérivées partielles s'annulent, exemple des points selles).

Note 2 : la dérivée première est la tangente à la courbe, la dérivée seconde donne la courbure (nulle aux points d'inflexions). Les méthodes de minimisation utilisant les dérivées de la fonction sont dites "de gradients", c'est à dire que la recherche du minimum en un point est faite dans la

direction opposée au gradient ($-\frac{df}{dx}$) de la fonction par rapport aux coordonnées, c-à-d. dans le sens de la plus grande pente.

Note 3 : pour une telle forme quadratique, on note que x_0 est un minimum si et seulement si B est positif. En effet, B est la moitié de la dérivée seconde, donc si B est positif, on a une courbure positive. Si B est négatif, x_0 serait un maximum.

Dans le cas où x est un vecteur, B est une matrice, et elle doit être définie-positive pour avoir un minimum en x_0 . En algèbre linéaire, la notion de matrice définie positive est analogue à celle de nombre réel strictement positif (B est définie positive si pour tout vecteur x , on a $x^t M x > 0$, ou bien si toutes ses valeurs propres sont positives, ou bien si $x.y = x^t M y$ est un produit scalaire sur \mathbb{R}^n (les 3 définitions étant équivalentes))

Racine d'une fonction:

La recherche du minimum d'une fonction peut se ramener à la recherche d'une racine de la dérivée de cette fonction (puisque la dérivée s'annule au minimum ou au maximum).

Note 1: géométriquement, la dérivée est la pente de la tangente à la courbe, et la dérivée seconde est la courbure (inverse du rayon du cercle inscrit), la dérivée seconde s'annule au point d'inflexion (rayon du cercle inscrit est infini = $1/(\text{dérivée seconde})$).

Note 2: généralement, on ne pourra aller numériquement qu'à la racine "locale", c'est à dire la plus proche.

Méthode de Newton pour trouver une racine d'une fonction $f(x)$:

On désire partir d'une approximation grossière de la racine, x_1 , et converger vers la "vraie" racine par pas successifs. Donc on veut faire un pas Δx pour aller en x_2 , racine de $f(x)$ (i.e. $f(x_2)=0$), c'est à dire que $x_2 = x_1 + \Delta x$.

On a donc $f(x_1 + \Delta x) = f(x_2) = 0$, or on sait (développement de Taylor) qu'on peut approximer :

$$f(x_1 + \Delta x) = f(x_1) + \Delta x \frac{df}{dx}(x_1) = f(x_2) = 0$$

On obtient donc :

$$f(x_1) + \Delta x \frac{df}{dx}(x_1) = 0$$

et par suite, le pas à faire à partir de x_1 pour tomber sur x_2 est :

$$\Delta x = -\frac{f(x_1)}{\frac{df}{dx}(x_1)} = -\frac{f(x_1)}{f'(x_1)}$$

Note: on a la même chose dans un espace à plusieurs dimensions avec les dérivées partielles dans chaque direction

Exemple:

Trouver la racine de l'équation $x^2 = 2$ par approximations successives à partir de 3.

$$f(x) = x^2 - 2 \text{ et } f'(x) = 2x$$

$$\Delta x_1 = -7/6 = -1,167, \text{ donc } x_2 = 3 - 1,167 = 1,833$$

$$\Delta x_2 = -1,361/3,66 = 0,372, \text{ donc } x_3 = 1,833 - 0,372 = 1,461$$

$$\Delta x_3 = -0,135/2,922 = 0,0462, \text{ donc } x_4 = 0,92 - 0,455 = 1,4147$$

(etc... la racine de 2 est 1,4142135624...)

Méthode de la bissectrice:

Si on sait qu'il y a une racine dans un intervalle donné par 2 points, on peut utiliser cette méthode.

Algorithme: prendre un point au milieu des 2 points, remplacer celui des 2 points initiaux qui est de même signe que le nouveau point. Itérer.

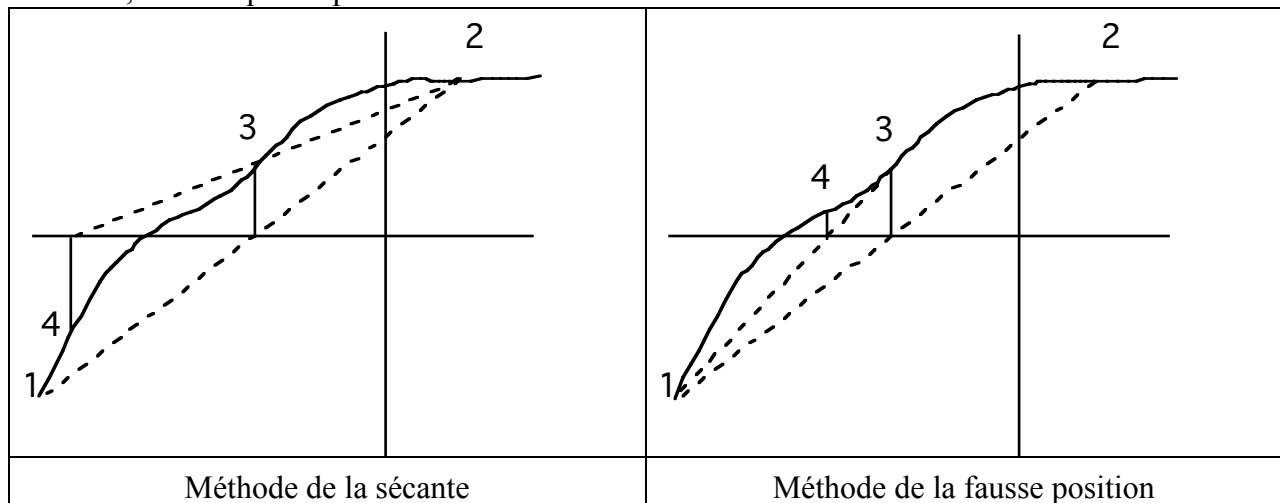
Si on sait qu'il y a une racine dans un intervalle ϵ_0 , le nombre d'itérations requises pour avoir la solution avec une précision ϵ est $n = \log_2(\epsilon_0/\epsilon)$ où ϵ_0 est l'intervalle initial.

Si l'intervalle contient plusieurs racines, la méthode en trouvera une.

problème des cas pathologiques (exemple: $\sin(1/x)$).

Méthode de la sécante et de la fausse position:

Pour les fonctions "smooth". Dans ces méthodes, on assume que la fonction est approximativement linéaire dans la région examinée. L'estimation suivante de la racine est le point où la ligne approximant la courbe (i.e. joignant les 2 points) coupe l'axe. Après chaque itération, l'un des points précédant est abandonné en faveur de la dernière estimation de la racine.



La seule différence entre ces 2 méthodes est que la sécante retient la dernière estimation, alors que la méthode de la fausse position retient l'estimation antérieure pour laquelle la valeur de la fonction est de signe opposé à la valeur de la fonction au meilleur point (le plus proche de la racine), de manière à ce que les 2 estimations encadrent toujours la racine.

Minimisation uni-dimensionnelle

Recherche sur grille

La plus élémentaire recherche est de diviser l'espace de recherche, et d'évaluer la fonction à chaque point de la grille. Si la division entre les points est de Δx , l'un des points est forcément à $\Delta x/2$ du vrai minimum, bien que ce point puisse ne pas être celui où la fonction prenne une valeur minimum sur l'ensemble des points choisis. On peut diminuer la grille autour du minimum. Le plus grand grief porté à cette méthode est son inefficacité : l'algorithme n'utilise pas ce qu'il a appris sur la fonction. Cette méthode devient impraticable avec des fonctions multi-dimensionnelles.

Recherche par section du nombre d'or et Fibonacci

Pour optimiser la recherche sur grille, on veut minimiser le nombre d'évaluation de la fonction en maintenant une réduction constante des pas d'un facteur t à chaque étape. Une seule évaluation ne donne pas d'information sur la localisation possible d'un minimum, mais si on restreint la recherche à celle d'un minimum local dans un intervalle donné, deux points suffisent.

Si $f(x_1) < f(x_2)$, alors il existe au moins un minimum local dans l'intervalle $0 < x < x_2$. Dans cet intervalle, il y a aussi le point x_1 , donc une nouvelle réduction d'intervalle est possible avec une seule nouvelle évaluation de la fonction, et la procédure peut continuer ainsi avec une seule évaluation par étape.

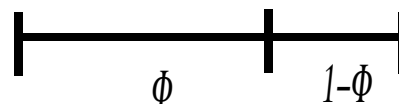
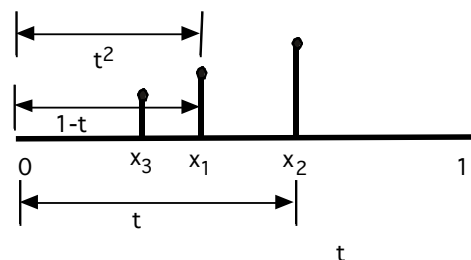
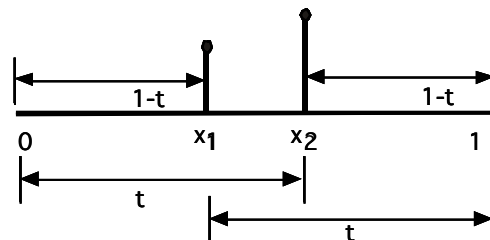
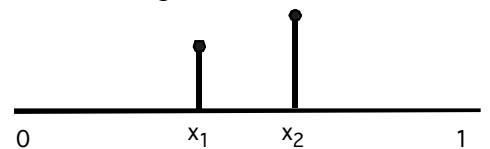
Comment peut-on continuer indéfiniment avec une réduction constante des intervalles successifs, et quelle peut être cette réduction ?

Les distances sont indiquées ci contre et imposées par la symétrie. Qu'on choisisse x_1 ou x_2 , on réduit l'intervalle de t .

Le nouvel intervalle après l'évaluation de x_3 doit être $0 < x < x_2$ et sa longueur t^2 . Donc $t^2 = 1 - t$, la solution de cette équation est le nombre d'or, $t = 0.616...$

Note : le nombre d'or est traditionnellement défini tel que sur la figure ci contre, le rapport du grand segment au tout (ici 1) est égal à celui du petit segment au grand segment. C'est à dire :

$\Phi/1 = (1-\Phi)/\Phi$, d'où $\Phi^2 = 1-\Phi$.



Si le nombre de pas à faire est fixé, il est possible d'améliorer cette technique en utilisant une recherche par Fibonacci (recherche optimale dans le sens « minimax », cf ci dessous). Si le nombre de pas n'est pas connu par avance, la recherche par section d'or est optimale.

Ces techniques sont optimales au sens « minimax », c'est à dire qu'elles minimisent le nombre maximum d'évaluation à faire pour obtenir une précision donnée (en théorie des jeux, le minimax, c'est la meilleure stratégie contre un opposant intelligent qui cherche à vous faire perdre). Elles sont efficaces pour les fonctions pathologiques, mais en général, on s'attend à ce que d'autres méthodes soient plus efficaces.

Approximation quadratique et extrapolation

Une approche plus prometteuse consiste à étudier le comportement de la fonction et à espérer que les déviations de la fonction de ce comportement ne sont pas trop grandes. De l'analyse de la série de Taylor (cf au dessus), il est raisonnable de supposer que la fonction est presque quadratique. Puisqu'une parabole est déterminée par 3 points, cette méthode demande l'évaluation de la fonction à 3 points, x_1 , x_2 et x_3 . Elle prédit ensuite le minimum x_4 de la parabole passant par ces 3 points, par la relation suivante :

$$x_4 = \frac{\frac{(x_2+x_3)f(x_1)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)} + \frac{(x_1+x_3)f(x_2)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)} + \frac{(x_1+x_2)f(x_3)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)}}{2\left(\frac{f(x_1)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)} + \frac{f(x_2)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)} + \frac{f(x_3)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)}\right)}$$

La fonction est évaluée à x_4 , ce nouveau point remplaçant un des 3 autres, puis un autre point est prédit, encore par interpolation quadratique en utilisant le nouvel ensemble de 3 points. La méthode finit quand la fonction prédite à un nouveau point est suffisamment proche de la vraie valeur (avec une tolérance donnée).

Cet algorithme se comporte généralement bien, mais souffre parfois d'instabilités qui peuvent être sérieuses :

- 1°) à n'importe quel pas, les 3 points peuvent déterminer une parabole avec un maximum plutôt qu'un minimum, et la méthode diverge alors
- 2°) si les 3 points sont sur une ligne, l'algorithme fait un pas énorme, ce qui peut conduire à des difficultés numériques aussi bien qu'à une divergence
- 3°) après chaque pas, il y a un choix à faire sur lesquels 2 des 3 précédents points retenir pour le prochain pas. Il est généralement plus facile et logique de retenir les 3 plus récents points, mais cela peut conduire aussi à des instabilités de rejeter les meilleurs points.
- 4°) même sans les difficultés précédents, la méthode peut osciller autour d'un minimum à la place de converger vers lui.

Tous les problèmes peuvent être réglés en incluant des vérifications et des « gardes » dans l'algorithme, mais les remèdes conduisent toujours à abandonner, au moins temporairement l'étape d'interpolation quadratique. Cette méthode est souvent utilisée comme dernière étape dans des algorithmes dépendant principalement d'autres méthodes, puisque les fonctions physiques sont généralement paraboliques à la proximité d'un minimum.

Quand les dérivées de la fonction sont disponibles, on peut à la place d'utiliser les 3 points pour déterminer la parabole, utiliser 2 points et la dérivée première, ou bien la valeur de la fonction et

les 2 premières dérivées à un point. Ces variations sont en fait plus instables que la méthode basique puisqu'elles utilisent moins de points.

Méthode essai-erreur

[H.H. Rosenbrock, « An automatic method for finding the greatest or least value of a function », Comput. J., 3, 175 (1960).]

Un point initial est choisi, x_0 , et une taille de pas d est aussi choisie. La fonction est évaluée à x_0 et x_0+d . Le premier pas est un succès si $f(x_0+d) < f(x_0)$, sinon c'est un échec. Si c'est un échec, d est remplacé par $-\beta d$, où β est un facteur de contraction (inférieur à 1), et le test est répété. Si c'est un succès, d est remplacé par αd , où α est un facteur d'expansion (supérieur à 1), et le test est répété. Le processus est répété jusqu'à ce que la fonction ne change que de moins d'une valeur donnée (précision). Les valeurs numériques utilisées pour l'expansion et la contraction sont $\alpha=3.0$ et $\beta=0.4.0$.

Une particularité intéressante de cette méthode est qu'un minimum local est toujours encadré dès qu'un succès est suivi d'un échec. Quand cela arrive, le point du milieu des 3 derniers points est toujours plus bas que les 2 autres, ainsi on est dans une position favorable pour essayer une interpolation quadratique. C'est peut être la méthode la plus efficace à utiliser dans le cas d'une fonction uni-dimensionnelle générale.

Minimisation multi-dimensionnelle

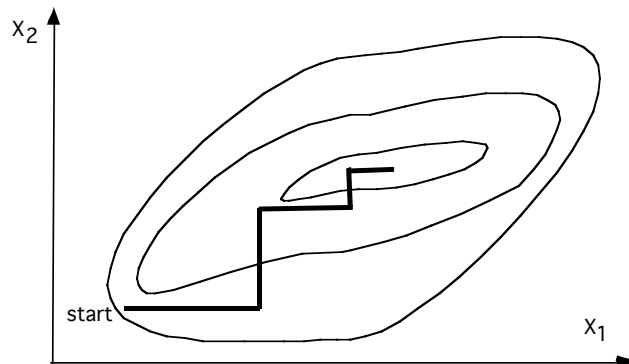
Recherche sur grille et aléatoire

Pour illustrer l'accroissement de complexité pour des espaces multidimensionnels, la recherche sur grille peut fournir un exemple. En effet, pour localiser un minimum à 1% de l'espace d'une variable (fonction unidimensionnelle), la recherche sur grille demande 100 évaluations ; si la fonction est 10-dimensionnelle, le nombre d'évaluation requis est de 10^{20} . Donc, cette méthode est inapplicable au delà de 2 dimensions.

Une règle générale est que l'extension des méthodes unidimensionnelles de minimisation (ou d'intégration) ne sont pas efficaces pour une fonction multidimensionnelle. L'expérience avec l'intégration suggère qu'une recherche de type Monte Carlo est plus efficace qu'une recherche sur grille. La méthode Monte Carlo consiste à choisir des points aléatoirement selon une distribution (généralement uniforme ou normale (gausienne)).

Recherche par variation d'un seul paramètre

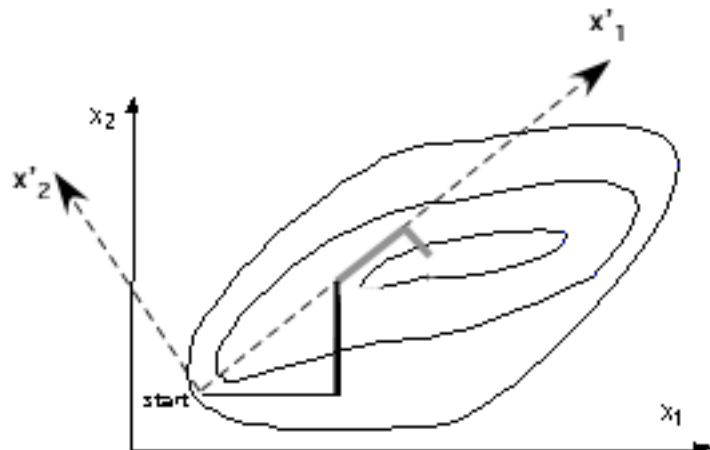
Puisque la condition pour avoir un minimum (avec n variables x_i) est l'annulation de toutes les dérivées partielles $\partial f / \partial x_i$, il est naturel d'essayer d'annuler chacune des dérivées séparément, l'une après l'autre. C'est la vieille méthode de variation du paramètre unique, qui recherche un minimum par rapport à une variable à la fois, en utilisant l'une des techniques vues dans le cas unidimensionnel.



Bien sûr, une fois un minimum trouvé sur x_2 , il est probable qu'on ne sera plus au minimum en x_1 , et on devra recommencer le processus, mais il est en général convergent. Si la fonction est une vallée étroite et allongée, la méthode est lente. Un tel comportement est en général inacceptable quand il y a beaucoup de dimensions. Deux améliorations ont été apportées par Hooke et Jeeves (R. Hooke et T.A. Jeeves, « Direct search solution of numerical and statistical problems », J. Assoc. Comput. Mach. 8, 212 (1961)) et Rosenbrock (H.H. Rosenbrock, « An automatic method for finding the greatest or least value of a function », Comput. J., 3, 175 (1960)).

Méthode de Rosenbrock

Cette méthode commence par des minimisations utilisant les variations des paramètres uniques comme ci dessus. Quand un cycle complet a été fait sur tous les paramètres, un nouvel ensemble d'axes orthogonaux est défini en prenant comme premier axe le vecteur reliant le point de départ à celui d'arrivée. Cet axe pointe dans la direction des améliorations précédentes et on espère que ce sera une bonne direction pour les futures recherches.



Dans le cas de la vallée étroite vue ci dessus, il devrait pointer plus ou moins dans la direction de la vallée et éviter le comportement en zig zag. Le prochain cycle de minimisation par variation de paramètre unique est accompli en utilisant des multiples des axes nouvellement définis comme variables. Cette méthode se comporte généralement bien, elle est stable et capable de suivre des vallées étroites, mais l'efficacité diminue quand le nombre de variables augmente, probablement car le nouvel axe est basé sur des points trop éloignés pour qu'il pointe le long d'une « hyper-vallée ».

Méthode du simplexe (polygone):

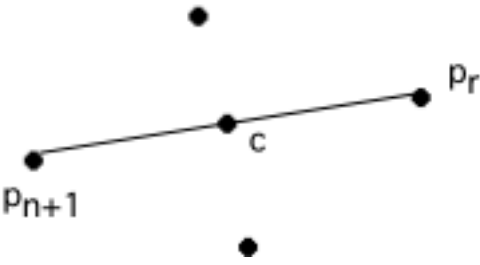
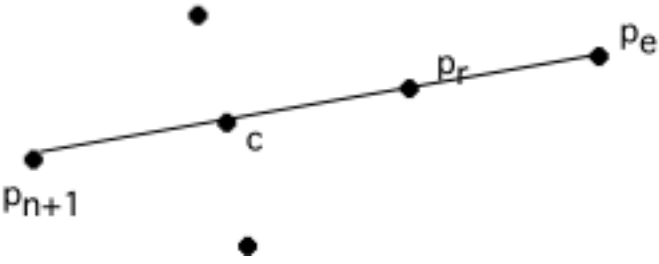
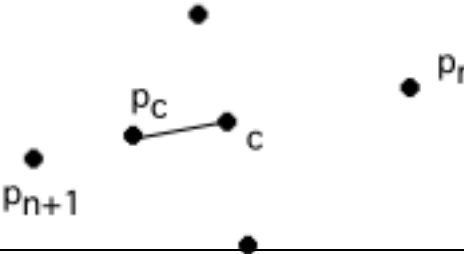
Dans un espace à n dimensions, à chaque pas, $n+1$ points retenus, p_1, \dots, p_{n+1} ordonnés selon $f(p_{n+1}) \geq f(p_n) \dots \geq f(p_1)$. Ces points peuvent être vus comme les sommets d'un polygone.

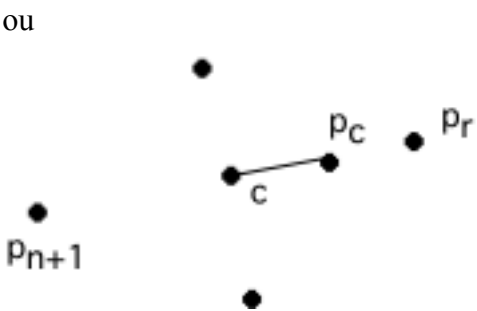
L'idée est d'encadrer un « volume d'espace » et de « rétrécir » autour d'un minimum trouvé (qui ne se trouve pas forcément dans le volume initial...). On essaie de projeter le plus mauvais point du polygone de l'autre côté (« réflexion ») du « plan » que constitue pour lui les n autres points, et éventuellement d'appliquer une expansion de ce côté. Ces réflexions sont faites de manière à essayer de conserver le volume du simplexe (i.e. de maintenir sa dégénérescence). On peut aussi avoir des contractions du volume le long de l'axe du plus mauvais point, ou bien même des contractions selon toutes les dimensions vers le point le plus « bas » (le meilleur).

Donc, à chaque itération, on produit un nouveau polygone en générant un nouveau point pour remplacer le point le plus "mauvais" (note : on cherche à minimiser ici). On calcule le centroïde c des n meilleurs points sur les $n+1$ points, dont les coordonnées c_i sont :

$$c_i = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n p_{j_i}$$

On prend $p_r = c + \alpha (c - p_{n+1})$ où α est le coefficient de réflexion, et on considère $f(p_r)$:

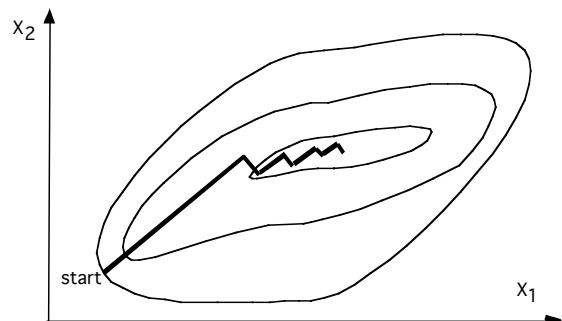
<p>réflexion</p> <p>- si $f(p_1) < f(p_r) < f(p_n)$, c'est à dire que p_r est un point situé parmi les autres, on remplace p_{n+1} (le plus "mauvais") par p_r</p>	
<p>expansion</p> <p>- si $f(p_r) < f(p_1)$, p_r est le meilleur point, on considère que la direction est une bonne direction et on essaie d'allonger le polygone dans cette direction en étirant, $p_e = c + \beta (p_r - c)$ où β est le coefficient d'expansion, si $f(p_e) < f(p_r)$, on garde p_e qui remplace p_{n+1}, sinon p_{n+1} est remplacé par p_r.</p>	
<p>contraction</p> <p>- si $f(p_r) > f(p_n)$, on considère que le polygone est trop large et devrait être contracté : si $f(p_r) \geq f(p_{n+1})$, $p_c = c + \gamma (p_{n+1} - c)$ ou si $f(p_r) < f(p_{n+1})$, $p_c = c + \gamma (p_r - c)$, et si $f(p_c) < \min(f(p_r), f(p_{n+1}))$, p_c</p>	

remplace p_{n+1} .	ou
	

Méthodes de gradients - plus grande pente (« steepest descent »)

Quand on connaît les premières dérivées, il est naturel de suivre la direction inverse du gradient pour chercher un minimum, puisque c'est dans cette direction que la fonction décroît le plus (cette technique a été utilisée par Cauchy au 19^{ème} siècle).

La méthode de plus grande pente consiste en une série de minimisations unidimensionnelles, chacune suivant la direction de la plus grande pente au point où la minimisation commence. Bien sûr, la direction du gradient n'est pas constante, donc on s'attend à de multiples itérations pour trouver le minimum, mais on montre que la méthode est convergente pour une fonction quadratique.



Note : la direction de plus grande pente est évidemment une combinaison des variables. On remarque une propriété des directions successives de recherche : si chaque minimisation par recherche linéaire est exacte, les directions successives sont orthogonales, ce qui n'est pas optimal pour une recherche efficace.

Dans cette méthode, on part de x_0 (vecteur initial).

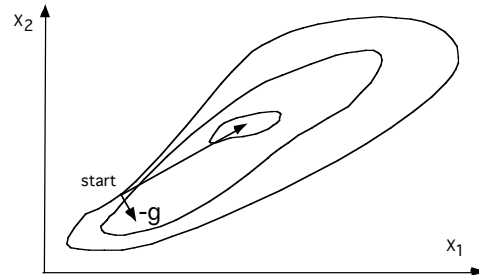
on calcule le vecteur gradient $g_i = \frac{df(x_i)}{dx}$ au point x_i ,

on effectue la recherche linéaire du scalaire t rendant f minimum dans la direction $-g_i$ ("linear search"), soit : $x_{i+1} = x_i - t_i g_i$

et on réitère en recalculant le gradient en ce point. On remarque que la nouvelle direction de descente est perpendiculaire à la précédente.

On peut arrêter les itérations arbitrairement dès que l'on atteint une valeur du gradient suffisamment petite ("vallée" de la fonction), que le nombre de cycles est jugé assez grand, que les paramètres varient trop faiblement ou... que le temps alloué pour le calcul est dépassé !

Il est en fait facile de trouver des fonctions non pathologiques où la direction vers le minimum est perpendiculaire au gradient !



Newton-Raphson

Puisqu'une fonction quadratique est entièrement déterminée par sa valeur, ses dérivées premières et ses dérivées secondes, elle peut être minimisée en un seul pas avec cette information. La méthode de Newton-Raphson permet de trouver le minimum d'une fonction en l'approchant par son développement de Taylor au deuxième degré (approximation quadratique).

Ici, on évalue alors non seulement le gradient, mais aussi la dérivée seconde (ou Hessien) de la fonction, $H(x) = \frac{d^2 f(x)}{dx^2}$, par rapport aux coordonnées. Si on part de x_0 , on a (développement de Taylor) :

$$f(x) = f(x_0) + g^T(x - x_0) + \frac{1}{2}(x - x_0)^T H(x - x_0) + \dots$$

Avec $g = \nabla f$ (g est le gradient de coordonnées $\frac{\partial f}{\partial x_{0_i}}$), $[H]_{ij} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_{0_i} \partial x_{0_j}}$ (H est le Hessien) (avec le gradient et le Hessien calculé au point x_0). La fonction s'écrit alors :

Si la fonction est effectivement quadratique, on a :

$$f(x) = f(x_0) + g^T(x - x_0) + \frac{1}{2}(x - x_0)^T H(x - x_0)$$

et la dérivée:

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x) = g + H(x - x_0) = -\nabla f(x) \text{ est nulle au minimum, } x_{\min}, \text{ donc}$$

$$f'(x_{\min}) = g + H(x_{\min} - x_0) = 0 \Rightarrow x_{\min} - x_0 = -H^{-1}g \Rightarrow x_{\min} = x_0 - H^{-1}g$$

donc

$-H^{-1}g$ est le pas Δx à faire à partir de x_0 pour arriver au minimum en un coup.

Note : H^{-1} est aussi appelé la matrice des covariances.

Dans le cas général d'une fonction non quadratique, on peut réitérer le calcul suivant

- calcul du gradient g_i et du Hessien $H(x_i)$ au point x_i ,

- évaluation du pas à faire $\Delta x_i = -H(x_i)^{-1} g_i$,

- nouveau point $x_{i+1} = x_i + \Delta x_i$,
- itération jusqu'au point d'arrêt (voir plus haut).

Cette méthode est l'équivalent multidimensionnel de la méthode d'interpolation quadratique vue au dessus, et elle est sujette aux mêmes difficultés. Mais voici ses points intéressants :

- 1°) le pas n'est plus arbitraire, il est fixé précisément par la méthode
- 2°) les directions ne sont plus nécessairement selon le vecteur gradient mais prennent en compte les corrélations des paramètres (vallées étroites ou crêtes) via les termes « mixtes » de la dérivée seconde.

Cette méthode est théoriquement plus rapide que celle du gradient mais le calcul du Hessien demande une capacité de stockage de $N(N-1)/2$ termes et le temps nécessaire à la résolution du système d'équation (inversion de H) varie en N^3 (N : nombre de variables à minimiser).

En pratique, la méthode se montre instable (pour les mêmes raisons que la méthode d'interpolation quadratique unidimensionnelle). Elle diverge notamment si la matrice H n'est pas définie-positive (voir ci dessous le paragraphe « Formes quadratiques définies positives »). Dans sa forme présentée ici, elle ne peut être appliquée que lorsque le minimum est proche ou quand on sait que la fonction est quadratique positive (pour l'exemple d'une telle fonction, l'exemple des moindres carrés, plus loin).

Mais c'est une méthode puissante, et il est important de l'étudier en détail puisque tous les algorithmes puissants sont basés sur des pas « quasi-Newton » (cf ci dessous).

On peut l'améliorer en chargeant la diagonale du Hessien si celui ci n'est pas défini positif ou en effectuant une recherche linéaire (algorithme de Marquardt). Comme dans le cas des méthodes de plus grande pente, on peut utiliser Δx non comme "pas" à faire, mais comme direction de recherche (méthodes dites de quasi-Newton) [Aby & Dempster, 1974] soit :

$$\Delta x_i = -H(x_i)^{-1} g_i.$$

Formes quadratiques définies positives

Une forme quadratique générale est

$$F(x) = a + gx + \frac{1}{2}Hx^2$$

où $g = \partial f / \partial x$ à $x=0$ (g est le gradient), et $H = \partial^2 F / \partial x^2$ à $x = 0$ aussi (H est la dérivée seconde ou le Hessien). Cette fonction a un minimum si et seulement si $H \geq 0$ (si $H=0$, le minimum est à l'infini, car la dérivée seconde étant nulle, la fonction est plate... Si H est négatif, alors on se trouve sur une parabole de courbure négative, donc sans minimum).

Le minimum, si il existe est à $x = -g/H$.

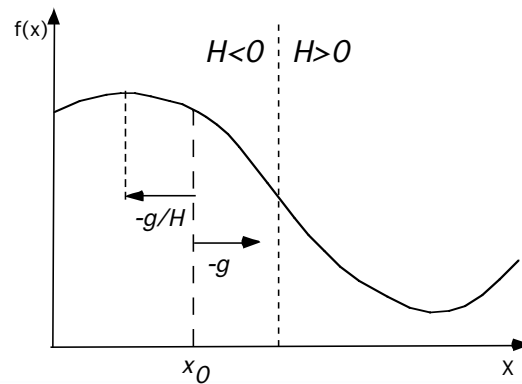
En effet, au minimum, la dérivée de F est nulle, donc

$$F'(x) = g + Hx = 0 \Rightarrow x = -\frac{g}{H}$$

Quand on utilise une forme quadratique pour approximer une fonction générale non linéaire, il est donc logique de prendre un pas de $x = -\frac{g}{H}$ pour trouver une approximation du minimum.

Mais cette approximation n'est valable que si $H > 0$, sinon on saute à un maximum ou à l'infini.

Si $H < 0$, un remède est de prendre un pas de $x = -g$, c'est à dire de mettre arbitrairement H à 1, de manière à ce que le pas soit au moins dans la bonne direction (celui de l'inverse du gradient où croît la fonction), même si ce pas a maintenant une longueur arbitraire. L'examen de la figure ci contre montre que c'est la seule chose que l'on puisse faire sans information supplémentaire.



Ces arguments s'étendent à une fonction multidimensionnelle où le gradient g est un vecteur (de composantes $\partial F / \partial x_i$) et H devient la matrice des dérivées secondes (dont les éléments sont les $\partial^2 F / \partial x_i \partial x_j$). Dans ce cas, le pas de Newton devient $x = -H^{-1}g$ et n'a de sens que si H n'est définie-positive, car c'est à cette condition que la forme quadratique $F(\vec{x}) = a + \vec{g}^T \vec{x} + \frac{1}{2} \vec{x}^T H \vec{x}$ possède un minimum. Il n'y a malheureusement pas de moyen simple de dire si une matrice est définie-positive en inspectant ses composants, mais on peut donner quelques unes des propriétés de telles matrices.

Deux conditions nécessaires (mais pas suffisantes) pour qu'une matrice carrée et symétrique soit définie-positive sont :

1°) les éléments diagonaux sont positifs (cela suffit pour une matrice 1x1)

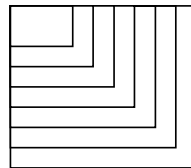
2°) les éléments hors diagonaux doivent obéir à $H_{ij}^2 < H_{ii}H_{jj}$

(les propriétés 1 et 2 sont suffisantes pour une matrice 2x2)

Bien que 1° et 2° soient facile à tester, elles ne sont en général pas suffisantes. Voilà quelques conditions nécessaires et suffisantes :

3°) toutes les valeurs propres sont positives (calcul en général difficile et approximatif)

4°) Les déterminants de toutes les sous matrices à gauche et en haut sont positifs. C'est probablement la méthode la plus simple.



5°) Le scalaire $e^T H e$ est positif pour tous les vecteurs e . C'est la définition usuelle pour une matrice définie-positive, et cela explique pourquoi une matrice définie-positive donne une forme quadratique avec un minimum : la fonction croît dans toutes les directions.

6°) L'inverse H^{-1} est définie-positive.

Supposons maintenant qu'une matrice H calculée lors d'une itération ne soit pas définie-positive. Par analogie avec le cas unidimensionnel, on peut prendre simplement $H = I$, la matrice unitaire, et

le pas de Newton devient un pas de « plus grande pente » d'une longueur arbitraire, ce qui n'est pas une mauvaise idée (et c'est souvent fait). Mais on peut faire mieux en essayant de créer une matrice définie positive qui est aussi proche que possible de H . Ce qu'il faut faire dépend de ce qui ne va pas avec H .

1°) si les éléments diagonaux de H sont positifs, on peut simplement mettre les éléments hors diagonaux à 0. La matrice résultante sera meilleur que la matrice unitaire, puisqu'au moins elle donnera un pas de longueur non arbitraire.

2°) si le problème est seulement que un ou plusieurs éléments hors diagonaux ne vérifient pas $H_{ij}^2 < H_{ii}H_{jj}$, on peut ne mettre à zéro que ces éléments là.

3°) On peut utiliser la matrice $(H + \lambda I)^{-1}$ au lieu de H^{-1} , avec λ plus grand que la plus grande valeur propre de H . Cela demande beaucoup de calcul et n'est pas très commode, mais c'est intéressant puisque cela revient à prendre un pas intermédiaire entre un pas de Newton et un pas de plus grande pente (pour des grandes valeurs de λ le pas devient court et en direction du gradient).

4°) si un ou plusieurs éléments sont négatifs, la non positivité qui en découle peut être prise en tant qu'avantage puisqu'elle indique une direction (ou des directions) dans lesquelles l'inverse du gradient est « croissant ». Cela suggère une direction spécialement fructueuse pour une variation unidimensionnelle, qui ne mènera pas seulement à une décroissance significative de la fonction mais aussi devrait conduire rapidement à une région où le Hessien serait défini-positif.

Ces remarques mènent aux méthodes de quasi-Newton. L'inconvénient principal de ces méthodes est l'évaluation répétée et l'inversion de la matrice des dérivées secondes (voir les considérations au dessus sur le stockage et le temps de calcul).

Méthode des directions conjuguées

Deux directions d_i et d_j sont dit conjuguées par rapport à une matrice définie-positive H si $d_i^T H d_j = 0$. Si H était la matrice unitaire, les vecteurs conjugués seraient orthogonaux. On peut voir la « conjugaison » comme une généralisation de l'orthogonalité. Un ensemble de n vecteurs conjugués décrit un espace n -dimensionnel, et chaque point de l'espace peut être exprimé comme une combinaison linéaire des n vecteurs conjugués. Ces directions conjuguées sont par construction orthogonales à l'ensemble des différences des gradients aux itérations successives.

Bien que la matrice H ne définisse pas un ensemble unique de vecteurs conjugués, un tel ensemble peut toujours être construit par une procédure similaire à la méthode d'orthogonalisation de Gram-Schmidt. Si on part par exemple d'un vecteur d_1 , alors le vecteur d_2

construit tel que $d_2 = H d_1 - \frac{d_1^T H H d_1}{d_1^T H d_1} d_1$ est un vecteur conjugué de d_1 puisque le produit $d_1^T H d_2$

s'annule comme on peut le vérifier :

$$d_1^T H d_2 = d_1^T H \left(H d_1 - \frac{d_1^T H H d_1}{d_1^T H d_1} d_1 \right) = d_1^T H H d_1 - \frac{d_1^T H H d_1}{d_1^T H d_1} d_1^T H d_1 = 0$$

Le processus peut être continué de la même manière pour construire un vecteur d_3 qui sera conjugué avec d_1 et d_2 .

Un théorème de Fletcher et Reeves montre qu'une séquence de minimisation linéaire dans chacune des n directions conjuguées minimisera une fonction quadratique générale de n variables. Cela peut être vu assez facilement. Soit la fonction quadratique suivante :

$$f(x) = f(0) + g^T x + \frac{1}{2} x^T H x$$

et les n directions Δx_i sont conjuguée par rapport à H :

$$d_i^T H d_j = 0$$

Les vecteurs x et g peuvent être exprimés comme des combinaisons linéaires :

$$x = \sum_i y_i d_i \text{ et } g = \sum_i c_i d_i$$

donc la forme quadratique générale devient :

$$f(x) = f(0) + \left(\sum_i c_i d_i^T\right) \left(\sum_j y_j d_j\right) + \frac{1}{2} \left(\sum_i y_i d_i^T\right) H \left(\sum_j y_j d_j\right)$$

Si le dernier terme est regroupé comme une double somme, les termes avec $i \neq j$ s'annulent à cause de la conjugaison, donc l'expression peut être simplifiée comme suit :

$$f(x) = f(0) + \sum_i \sum_j c_i d_i^T d_j y_j + \frac{1}{2} \sum_j y_j^2 d_j^T H d_j = f(0) + \sum_j (b_j y_j + b'_j y_j^2)$$

où

$$b_j = \sum_i c_i d_i^T d_j \text{ et } b'_j = d_j^T H d_j \text{ sont des constantes. En exprimant la forme quadratique en terme du}$$

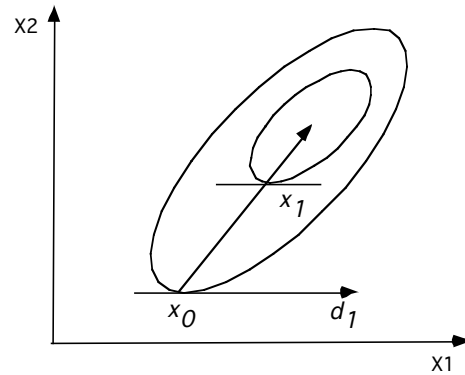
vecteur y plutôt que x , on l'a séparé en une somme de fonctions quadratiques indépendantes. Une minimisation selon y_i (une minimisation linéaire dans la direction d_i) sera indépendante des minimisations le long des directions conjuguées, ce qui montre la validité du théorème.

Ce théorème nous montre ce qui « clochait » avec la méthode de variation d'un seul paramètre : on doit utiliser des directions conjuguées plutôt qu'orthogonales.

Cependant, vu qu'il faut évaluer le Hessien, en pratique, cela ne nous aide pas vu qu'on pourrait utiliser la méthode de Newton, et on n'aurait pas besoin d'utiliser n minimisation linéaire.

L'utilité des directions conjuguées vient du fait qu'il y a des moyens de déterminer ces directions implicitement sans évaluer le Hessien H . Bien sûr, quand toutes les n directions conjuguées sont déterminées, par n'importe quelle méthode, une information équivalente au Hessien est calculée. Cependant, en même temps, une minimisation importante peut déjà avoir été effectuée.

If x_0 et x_1 sont des points minimum dans 2 sous-espaces parallèles, alors la direction $x_1 - x_0$ est conjuguée à n'importe quel vecteur des 2 sous-espaces. On le voit dans la figure ci contre. Puisque x_0 est un minimum dans la direction d_1 , le gradient de f à x_0 doit être orthogonal à d_1 : $d_1^T (g + Hx_0) = 0$ où g est le gradient à $x=0$. De manière similaire, à x_1 : $d_1^T (g + Hx_1) = 0$. En soustrayant les 2 équations, le premiers termes s'annulent et on a : $d_1^T H(x_1 - x_0) = 0$, ce qui montre que $x_1 - x_0$ est conjuguée à d_1 .



Malheureusement, étendre cet algorithme à 3 dimensions demande trois minimisations supplémentaires de manière à ce que la 3^{ème} direction soit conjuguée aux deux premières, et donc la convergence pour une forme générale quadratique en n variables est obtenue seulement après n itérations impliquant en tout $n(n+1)/2$ minimisations linéaires. Puisqu'il s'agit justement du nombre d'éléments indépendants du Hessien, il semble qu'on ferait mieux, pour les fonctions quadratiques, de calculer cette matrice H directement et d'éviter ces recherches linéaires. D'un autre côté, pour les fonctions non-quadratiques, la méthode des directions conjuguées devrait être beaucoup plus stable puisqu'elle procède en recherches linéaires dans des directions indépendantes et donc garantit une convergence en un temps fini une fois qu'une région quadratique a été trouvée.

Un désavantage de l'algorithme est que pour chaque itération, n minimisations sont faites dans la direction d_1 alors qu'une seule est faite dans la direction d_n (ceci est largement évité dans une variante due à Powell [Powell M.J.D, Comput. J., 7, 149 (1964)]).

Gradients conjugués

Quand les premières dérivées sont calculées, une méthode plus élégante peut être utilisée, celle des « gradients conjugués ». Dans les méthodes de gradients conjugués [Hestenes & Stiefel, 1952] (méthode de Fletcher-Reeves [Fletcher & Reeves, 1964]), les directions de recherche successives sont mutuellement conjuguées par rapport au Hessien. Deux directions Δx_i et Δx_j sont dites conjuguées par rapport à une matrice H définie positive si $\Delta x_i^T H(x) \Delta x_j = 0$.

Supposons que la fonction et son gradient soient évalués à 2 points, x_0 et x_1 , donnant les différences suivantes : $\Delta x = x_1 - x_0$ et $\Delta g = g_1 - g_0$.

Si la fonction était quadratique, avec un Hessien H , on aurait $x_{min} = x_0 - g_0/H = x_1 - g_1/H$ (voir plus haut), donc $x_0 - x_1 = g_0/H - g_1/H = (g_0 - g_1)/H$ et par suite $\Delta g = H\Delta x$.

N'importe quel vecteur d_1 orthogonal à Δg serait alors conjugué à Δx :

$$d_1^T \Delta g = d_1^T H \Delta x = 0.$$

Ceci suggère immédiatement une méthode pour obtenir les directions conjuguées sans connaître H , en se basant sur le changement du gradient le long d'une direction précédente.

Dans la méthode des gradients conjugués, les minimisations unidimensionnelles successives sont accomplies le long des directions conjuguées, chaque direction étant utilisée une seule fois par itération. La première direction est $d_0 = -g_0$, la plus grande pente à x_0 . Si le minimum selon cette direction est à x_1 où le gradient est g_1 , alors la prochaine direction de recherche d_1 , qu'on veut conjuguée à d_0 , doit être une combinaison linéaire des seuls vecteurs que nous ayons sous la main, c'est à dire :

$$d_1 = -g_1 + b d_0 \quad (1)$$

La condition de conjugaison est :

$$d_1^T H d_0 = d_1^T H (x_1 - x_0) = 0$$

qui en remplaçant d_1 selon (1) donne :

$$(-g_1^T + b d_0^T) H (x_1 - x_0) = 0$$

et en remplaçant dans le second terme $H(x_1 - x_0)$ par $(g_1 - g_0)$ donne :

$$(-g_1^T + b d_0^T)(g_1 - g_0) = 0$$

d'où :

$$-g_1^T g_1 + g_1^T g_0 + b d_0^T g_1 - b d_0^T g_0 = 0 \text{ et vu que } d_0 = -g_0:$$

$$-g_1^T g_1 + g_1^T g_0 - b g_0^T g_1 + b g_0^T g_0 = 0$$

et puisque x_1 est un minimum dans la direction $d_0 = -g_0$, la direction g_0 est orthogonale au gradient en x_1 , et donc $g_1^T g_0 = g_0^T g_1 = 0$, donc

$$(-g_1^T g_1) + b(g_0^T g_0) = 0$$

On a donc $b = \frac{g_1^T g_1}{g_0^T g_0}$ et la nouvelle direction conjuguée est $d_1 = -g_1 + \frac{g_1^T g_1}{g_0^T g_0} d_0$

Ce processus peut être itéré pour générer les n directions, chacune conjuguée à toutes les autres. Donc la même formule simple convient pour tous les directions conjuguées successives :

$$\Delta x_{i+1} = -g_{i+1} + \frac{g_{i+1}^T g_{i+1}}{g_i^T g_i} \Delta x_i$$

Les directions successives sont donc obtenues en conservant seulement les gradients pour deux itérations d'où une économie de stockage par rapport au Hessien.

Ces méthodes convergent mieux que les méthodes de plus grande pente et ne nécessitent pas le calcul du Hessien

(note: le minimiseur MINM d'AMBER, programme de minimisation d'énergie moléculaire est un minimiseur à gradients conjugués).

Minimiseurs à métrique variable (VMM)

Ces méthodes tirent leurs noms du fait qu'on peut considérer la direction $-H^{-1}g$ (Newton-Raphson) comme incorporant une correction du second ordre du système de coordonnées. En effet, en multipliant $-g$ par H^{-1} (ou V, matrice de covariance), on corrige la métrique de l'espace à N dimension (x est de dimension N) de manière à ce que le gradient négatif $-g$ soit converti en l'incrément Δx . Ainsi, le terme "à métrique variable" qualifie les méthodes qui utilisent un incrément de la forme :

$$\Delta x_i = - \mathbf{t}_i V_i g$$

et mettent à jour la transformation du tenseur de "correction de la métrique" V_i à chaque itération. V_i doit converger vers H^{-1} (inverse du Hessian). Ces méthodes sont donc des méthodes quasi-Newton.

Théorie

Par analogie avec les méthodes de géométrie différentielle et de la relativité générale, il est pratique de considérer que les propriétés de la fonction $f(x)$ sont en fait des propriétés de l'espace des variables x . On a fait un usage rudimentaire de cette idée quand on a généralisé les coordonnées orthogonales en un nouveau système défini par des axes pointant dans des directions conjuguées. On veut maintenant aller plus loin et être capable d'exprimer les propriétés de la fonction f géométriquement comme des propriétés de l'espace non-euclidien de ses variables x .

L'invariant fondamental dans un espace non euclidien est l'élément de distance au carré :

$$ds^2 = dx^T A dx$$

où dx est une coordonnée différentielle de déplacement et A est la matrice tenseur de covariance qui détermine toutes les propriétés de l'espace considéré. Quand A est la matrice unitaire, la formule pour ds^2 exprime juste le théorème de Pythagore pour un espace Euclidien n -dimensionnel. Quand les éléments hors diagonaux ne sont pas nuls et que les éléments peuvent varier comme des fonctions de x , un espace non euclidien généralisé est généré.

Il est facile de vérifier que, sous des transformations des coordonnées, la matrice des dérivées secondes H (le Hessian) se comporte comme un tenseur de covariance, et nous l'identifions comme le tenseur métrique de notre espace. L'inverse $V = H^{-1}$ est un tenseur contravariant et devient le tenseur contravariant (pour une discussion des tenseurs covariant et contravariant, voir Landau et Lifshitz, « The classical theory of fields », Addison-Wesley, 1951). Ceci nous permet immédiatement de construire deux scalaires (invariants sous les transformations de coordonnées) :

1°) $ds^2 = dx^T H dx$ est le carré de la distance généralisée entre le point x et le point $x+dx$. Quand f est une fonction X^2 qui est minimisée pour déterminer les meilleurs paramètres x , alors la signification physique de la distance généralisée ds est juste le nombre d'« écart type » séparant $x+dx$ de x . Ainsi, l'utilisation du tenseur métrique H permet d'étalonner la distance dx de manière à ce qu'elle devienne une quantité physique (ou statistique) pertinente et invariante au lieu d'être exprimée en unité arbitraire (ou d'un mélange d'unités arbitraires !).

2°) $\rho = g^T V g$ est 2 fois la différence entre la valeur de la fonction au point où V et le gradient g sont calculés et le minimum de la forme quadratique de Hessian $H = V^{-1}$. Ainsi $\rho/2$ est la distance (verticale) attendue au minimum si f était quadratique. Ceci nous fournit un critère de convergence important et indépendant de l'échelle pour n'importe quelle méthode donnant une approximation de V et g . quand la fonction f est quadratique, H est partout constant et, dans le sens souligné ci dessus, c'est équivalent à travailler dans un espace à métrique constante. Pour les fonctions réelles non linéaires, on s'attend à ce que les termes d'ordre plus élevés soient petits mais non négligeables, donc on peut penser à travailler dans un espace avec un tenseur métrique

variant lentement. Les méthodes basées sur cette approche sont connues sous le nom de méthode à métrique variable. Elles diffèrent de la méthode Newton-Raphson par le fait que H n'est pas réévalué à chaque itération, mais qu'une bonne approximation de H est celle des itérations précédentes. Cette correction est connue sous le nom de « formule de mise à jour de la matrice » qui diffère en général d'une méthode à l'autre.

Les méthodes à métrique variables procèdent généralement suivant les étapes suivantes :

1°) un point initial, x_0 , est donné. Le gradient g_0 à ce point est calculé et une approximation de H^{-1} , disons V_0 est construite. Le V_0 de départ ne peut être que la matrice unitaire, ou bien l'inverse de la vraie matrice des dérivées secondes.

2°) un pas est fait jusqu'à $x_1 = x_0 - V_0 g_0$, qui sera le minimum si f est quadratique et si V_0 est la vraie matrice de covariance. Puisque x_1 n'est pas le minimum en général, il est usuel de faire une recherche linéaire le long de cette direction, pour trouver le α qui minimise $f(x_0 - \alpha V_0 g_0)$. Le nouveau point est donc x_1 et le gradient calculé à x_1 est g_1 .

3°) la matrice V est corrigée en utilisant une formule de mise à jour de la forme :

$$V_1 = V_0 + m(V_0, x_1, x_0, g_0, g_1)$$

puis g_0 est remplacé par g_1 , x_0 par x_1 et V_0 par V_1 et les étapes 2° et 3° sont répétées jusqu'à ce qu'un critère de convergence soit satisfait.

Les différentes méthodes diffèrent principalement dans le choix de la fonction de mise à jour m (voir ci après), et de l'importance de la nécessité des minimisations linéaires. Des variantes moins importantes concernent l'approximation de départ, V_0 , et les grades fous contre des pas irréalistes et contre la non positivité comme pour les techniques basées sur Newton.

On a donc ici non le Hessien (lourd à calculer) mais une estimation de celui-ci (en fait de son inverse H^{-1}) continûment tenue à jour à partir de l'information tirée des variations successives Δg du gradient g . La matrice V_0 de départ est en général la matrice identité, donc le premier incrément est fait dans la direction de plus grande pente.

Méthode de Davidon-Fletcher-Powell

La première, et la plus utilisée, des méthodes à métriques variables est celle dite de Davidon-Fletcher-Powell, développée en 1959 par Davidon puis publiée et simplifiée par Fletcher et Powell [Fletcher & Powell, 1963]. La formule :

$$V_1 = V_0 + \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \gamma} - \frac{V_0 \gamma \gamma^T V_0}{\gamma^T V_0 \gamma}$$

où les changements en position et en gradient du dernier pas sont :

$$\delta = x_1 - x_0 \text{ et } \gamma = g_1 - g_0$$

et V_0 est la précédente estimation de la matrice de covariance. Cette formule est appelée de rang 2 puisque la correction $V_1 - V_0$ est une matrice de rang 2 dans l'espace de δ et $V_0 \gamma$, comme on peut le voir en regardant la formule.

Une condition fondamentale d'une formule de mise à jour est que la nouvelle matrice doit satisfaire la relation : $V_1 \gamma = \delta$, puisque $\gamma = H\delta$ pour une forme quadratique de Hessien H . On voit que la formule de Davidon satisfait cette condition :

$$V_1 \gamma = (V_0 + \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \gamma} - \frac{V_0 \gamma \gamma^T V_0}{\gamma^T V_0 \gamma}) \gamma = V_0 \gamma + \frac{\delta \delta^T \gamma}{\delta^T \gamma} - \frac{V_0 \gamma \gamma^T V_0 \gamma}{\gamma^T V_0 \gamma} = V_0 \gamma + \delta - V_0 \gamma = \delta$$

Une caractéristique malheureuse de l'algorithme de Davidon est le besoin de faire à chaque itération une minimisation linéaire dans la direction donnée par un pas de Newton, $-Vg$. Cette recherche linéaire est cependant nécessaire pour assurer une convergence pour des fonctions générales. Fletcher et Powell montrent que si l'approximation de départ est définie positive, alors V restera définie positive après toutes les mises à jour, mais ils utilisent le fait que chaque itération est une minimisation linéaire, c'est à dire que :

$$g_1^T V_0 g_0 = 0$$

On peut montrer que cette méthode est convergente quadratiquement, au plus n itérations (n recherches linéaires et n calculs de gradient) étant requises pour une forme quadratique n -dimensionnelle.

Formule de rang 1 :

Dans un effort pour éviter la recherche linéaire requise par la méthode de Davidon, plusieurs chercheurs ont développé indépendamment une formule intéressante de rang 1. Davidon a été le premier à publier un algorithme basé sur la formule et Powell a récapitulé les propriétés de cette formule et des algorithmes qui s'appuient dessus.

La formule de mise à jour de rang 1 est :

$$V_1 = V_0 + \frac{(\delta - V_0 \gamma)(\delta - V_0 \gamma)^T}{\gamma^T (\delta - V_0 \gamma)}$$

On peut montrer que c'est la seule formule de rang 2 (ou moins) pour laquelle on a non seulement $V_1 \gamma = \delta$ mais aussi $V_1 \gamma = \delta$.

Où δ et γ sont les changements de pas et de gradient à n'importe quelle des itérations précédentes. Ceci est connu sous le nom de « propriété héréditaire », puisqu'on peut dire que V_1 hérite de la propriété fondamentale $V_1 \gamma = \delta$ par rapport à toutes les itérations précédentes. La propriété héréditaire assure qu'après n itérations, V_1 sera la vraie matrice de covariance si f est quadratique, quelque soient les pas qui ont été pris, et donc que, si des pas de Newton sont accomplis, la convergence pour une fonction quadratique est assurée après n itérations, sans besoin de recherche linéaire.

De plus, la formule de rang 1 est symétrique, dans le sens où l'expression pour V_1^{-1} en termes de V_0^{-1} est la même que pour V_1 en termes de V_0 , étant donné que γ et δ sont intervertis. La signification de cette propriété de symétrie sera discutée dans la prochaine section.

Mais, vu que rien n'est parfait, l'élégance et la beauté mathématique de la formule de rang 1 cache un grand nombre de difficultés numériques et pratiques qui peuvent la rendre particulièrement instable quand on l'applique à une fonction générale. En particulier, si le vecteur

γ devient orthogonal au vecteur $(\delta - V_0\gamma)$, le dénominateur tend vers zéro dans la formule de mise à jour, et une correction sans limite est possible. Puisque ces vecteurs peuvent être orthogonaux, même pour une fonction quadratique, le problème d'instabilité numérique est sérieux.

De plus, les matrices V_I ne convergent pas vraiment vers la matrice de covariance dans le sens usuel du terme convergence. Bien qu'il soit vrai que V_I sera égal à la vraie matrice de covariance au n-ième pas pour une fonction quadratique (nonobstant les difficultés numériques), les matrices intermédiaires V peuvent varier beaucoup de pas en pas, de telle sorte qu'à une itération particulière V_I pourra être une particulièrement mauvaise approximation. Ceci est dangereux si la fonction n'est pas quadratique, puisque les grandes corrections dans les dernières itérations ne compenseront généralement pas les fluctuations des premiers pas. De même, il n'est pas garanti que les matrices intermédiaires resteront définies positives, donc ne sera pas garanti non plus une réduction de f à chaque pas, même pour une fonction quadratique.

Toutes ces difficultés peuvent évidemment être corrigées en programmant suffisamment de garde-fous dans l'algorithme, mais cela ne peut être fait qu'au détriment de l'efficacité et quelquefois en abandonnant temporairement la formule de mise à jour elle-même, ce qui perd de l'intérêt. Des approches différentes sont possibles selon qu'on considère comme important de maintenir la positivité comme dans l'algorithme de Davidon [Davidon, Comput. J. 10, 406 (1968)] ou de ne pas abandonner la formule exacte de rang 1 comme dans la méthode de Powell [Powell, M.J.D., « Rank one methods for unconstrained optimization » in « Integer and non-linear programming », J. Abadie Editor, Amsterdam, 1970].

Approche unifiée de Fletcher pour les méthodes à métrique variable :

L'existence de deux formules de mise à jour différentes, avec des propriétés très différentes ont généré un grand intérêt dans les années 1967-1971, puisque cela montrait que les VMM étaient prometteuses et qu'elles avaient laissé beaucoup de questions sans réponse, comme :

1°) Comment se peut-il que les formules de rang 1 et de rang 2 ont de telles différences de propriétés ? Quelle est la relation entre les deux ?

2°) Y a-t-il un moyen de combiner les meilleures propriétés des 2 formules ?

3°) Y a-t-il d'autres bonnes formules ? Est-il possible de définir une classe de formules « admissibles » ?

Un article de Fletcher présente une approche unifiée [Fletcher R., Comput. J., 13, 317 (1970)].

Rappelons nous que l'équation de rang 1 est symétrique, mais ainsi que nous allons le voir, la formule de rang 2 ne l'est pas. L'asymétrie suggère un moyen de construire une troisième formule en prenant l'image miroir de la formule de rang 2. L'idée de base est que la nouvelle formule devrait satisfaire la relation fondamentale : $V_I\gamma = \delta$ et ainsi son inverse devrait vérifier $\gamma = V_I^{-1}\delta$

On peut évidemment écrire une formule pour V_I^{-1} qui correspond à la formule de rang 2 pour V_I :

$$V_1^{-1} = \left(I - \frac{\gamma\delta^T}{\delta^T\gamma}\right)V_0^{-1}\left(I - \frac{\delta\gamma^T}{\delta^T\gamma}\right) + \frac{\gamma\gamma^T}{\delta^T\gamma}$$

Cette matrice V_I^{-1} peut être maintenant vue comme une application de γ vers δ puisque $\gamma = V_I^{-1} \delta$. Si nous intervertissons γ et δ dans la formule, cela donnera une application de δ vers γ , et ainsi cela produira une nouvelle formule où $V_I \gamma = \delta$. La nouvelle formule duale est simplement :

$$V_1 = (I - \frac{\delta \gamma^T}{\delta^T \gamma}) V_0 (I - \frac{\gamma \delta^T}{\delta^T \gamma}) + \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \gamma}$$

Si nous essayons ce « truc » avec la formule de rang 1, on aura la même formule de rang 1, puisqu'elle est symétrique dans ce sens, c'est à dire duale d'elle même. Mais avec la formule de rang 2, le processus d'inversion et d'interversion mène à une nouvelle formule, également de rang 2, qui est aussi une formule valide de mise à jour, au sens où elle donne lieu à un algorithme de VMM de convergence quadratique.

Allons plus loin et considérons la classe des formules qui incluent à la fois des formules de rang 1 et de rang 2 comme cas spéciaux. Introduisons la notation $V_I = T(V_0)$ pour la formule de rang 2, et $V_I = D(V_0)$ pour la formule duale, et considérons la classes de expressions de mise à jour : $V_* = (I - \Phi)T + \Phi(D)$ où Φ est un paramètre qui détermine la formule exacte (Broyen [Broyden C.G., Math. Comput., 21, 368 (1967)], tout en utilisant une notation différente, a aussi considéré la même classe de formules).

Il vient que la formule de rang 1 est aussi dans cette classe avec :

$$\Phi(\text{rang1}) = \frac{\delta \gamma^T}{\delta^T \gamma - \gamma^T V_0 \gamma}$$

Ayant maintenant construit une vaste classe de formule de mise à jour, il serait intéressant de considérer leurs propriétés comme une fonction du paramètre générateur Φ . Peut être la plus importante propriété, et la seule qu'on considérera ici, est celle de la convergence monotone de V vers la vraie matrice de covariance pour une fonction quadratique (« Propriété 1 » dans l'article de Fletcher). L'utilisation d'une formule de mise à jour avec cette propriété garanti une amélioration dans l'approximation V à chaque itération (pour une fonction quadratique).

N'importe quelle formule V_* avec Φ dans l'intervalle $[0,1]$ possède la propriété de convergence monotone. Une telle formule est dite appartenir à la classe convexe des formules. Pour n'importe quel V_* avec Φ en dehors de l'intervalle $[0,1]$, il existe une fonction quadratique pour laquelle V diverge de la vraie matrice de covariance.

De ce que nous avons déjà vu sur la formule de rang 1, il n'est pas surprenant de trouver qu'elle n'appartient pas à la classe convexe. Puisque $\delta \gamma^T > 0$ pour n'importe quel pas qui est une amélioration, et puisque $\gamma^T V_0 \gamma > 0$ si V_0 est définie positive, on voit immédiatement de l'inspection de l'équation pour $\Phi(\text{rang1})$ qu'il doit être ou inférieur à 0 ou supérieur à 1.

Ces considérations ont amené Fletcher à proposer un nouvel algorithme qui est probablement le plus élégant et le plus puissant des algorithmes VMM. A la base, il utilise la formule générale V_* avec la valeur de Φ choisie suivant le schéma suivant : s

Si $\Phi(\text{rang1}) < 0$, mettre $\Phi = 0$, ce qui correspond à la formule de rang 2 usuelle.

Si $\Phi(\text{rang1}) > 0$, mettre $\Phi = 1$, ce qui correspond à la formule duale.

Ainsi, chacun utilise toujours une formule de la classe convexe, et choisit celle qui est la « plus proche » de la formule de rang 1. Il semble que la recherche linéaire peut alors être éliminée et simplement remplacée par un pas de Newton, à moins que la fonction soit hautement non quadratique. Cette dernière condition peut facilement être détectée en comparant l'amélioration réelle avec celle attendue à chaque itération.

Recherche linéaire approchée :

A ce niveau, il était sous entendu que la recherche linéaire du t_i devait être exacte. En fait, un grand progrès en vitesse d'exécution a été fait quand on s'est aperçu qu'une recherche linéaire approximative suffisait. Les formules doivent être légèrement modifiées. Le point x_t :

$$x_t = x_i + t \Delta x_i$$

est accepté pour la valeur t si :

$$f(x_t) < f(x_i) + r_1 t g_i \Delta x_i$$

$$g_t \Delta x_i > r_2 g_i \Delta x_i$$

Les paramètres r_1 et r_2 peuvent être ajustés. $r_1 = 0,999$ et $r_2 = 0,00001$ semblent être un bon choix.

Techniques spécialisées

Minimisation chi-carré

Une des applications les plus communes en sciences est l'ajustement par moindres carrés, où la fonction à minimiser est la somme des carrés des déviations entre valeurs mesurées et prédites (selon un modèle) :

$$F(x) = \sum_{k=1}^K f_k^2(x) = \sum_{k=1}^K \left(\frac{Y_k - T_k(x)}{\sigma_k} \right)^2$$

où Y_k et σ_k sont les valeurs mesurées et les erreurs, et $T_k(x)$ sont les valeurs prédites par le modèle. Minimiser f mène à la meilleure estimation des n paramètres x , basée sur les K mesures Y avec des erreurs aléatoires σ , où K doit être plus grand ou égal à n , et est généralement beaucoup plus grand que n .

Considérons la matrice des dérivées secondes pour $F(x)$, exprimée en termes des $f_k(x)$ individuels :

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} \sum_k f_k^2 = \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_k 2 f_k \frac{\partial f_k}{\partial x_j} = \sum_k 2 \frac{\partial f_k}{\partial x_i} \frac{\partial f_k}{\partial x_j} + 2 f_k \frac{\partial^2 f_k}{\partial x_i \partial x_j}$$

Dans l'expression de droite, il est usuel de faire l'approximation que la seconde somme, impliquant des dérivées secondes, est petite comparée avec le premier terme impliquant des produits de dérivées premières. C'est appelé la linéarisation [note : c'est le modèle $T(x)$ qui est linéarisé, pas la fonction $F(x)$]. Dans le cas important des moindres carrés linéaires, la deuxième

somme est exactement zéro, et donc $F(x)$ est quadratique, et le problème se résout à l'inversion de la matrice $\frac{\partial^2 F}{\partial x_i \partial x_j}$ (c'est à dire prendre le pas de Newton). Dans le cas le plus général des

moindres carrés non linéaires, la linéarisation s'effectue en prenant :

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_i \partial x_j} \approx \sum_k 2 \frac{\partial f_k}{\partial x_i} \frac{\partial f_k}{\partial x_j}$$

Cette formule a l'avantage d'être facile à calculer et, de plus, la matrice est toujours définie positive (sous des conditions faibles comme l'existence des dérivées, et pourvu qu'elle ne soit pas singulière). En fait, dans beaucoup de cas, l'utilisation de cette approximation pour calculer les pas de Newton est plus efficace que l'utilisation de la matrice exacte des dérivées secondes à cause de la positivité. Bien sûr, il faut se souvenir que la matrice de covariance obtenue en inversant cette matrice ne converge pas sur la vraie matrice de covariance même si la minimisation basée sur cette matrice peut converger sur le vrai minimum.

Likelihood maximisation

Une importante alternative à la méthode des moindres carrés dans l'ajustement de données à une fonction théorique est la méthode du maximum likelihood (maximum de vraisemblance). Dans ce cas, la fonction à minimiser est de la forme :

$$F(x) = - \sum_k \ln f_k(x)$$

donc une somme de logarithmes. Ici encore, une approximation de la matrice des dérivées secondes peut être trouvée qui implique seulement les produits des premières dérivées :

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_i \partial x_j} = - \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} \sum_k \ln f_k = - \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_k \frac{1}{f_k} \frac{\partial f_k}{\partial x_j} = - \sum_k \frac{1}{f_k^2} \frac{\partial f_k}{\partial x_i} \frac{\partial f_k}{\partial x_j} - \sum_k \frac{1}{f_k} \frac{\partial^2 f_k}{\partial x_i \partial x_j}$$

Comme pour les moindres carrés, on peut négliger la seconde somme (des dérivées secondes). Dans le cas d'une fonction de vraisemblance, les dérivées secondes de f ne sont jamais exactement zéro sur un intervalle fini (un maximum de vraisemblance exactement linéaire n'existe pas, essentiellement parce que la fonction de vraisemblance doit être normalisée, de manière à ce que son intégrale sur l'espace des mesures soit indépendante des paramètres x). Cependant l'approximation :

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_i \partial x_j} \approx \sum_k \frac{1}{f_k^2} \frac{\partial f_k}{\partial x_i} \frac{\partial f_k}{\partial x_j}$$

a les mêmes avantages que dans le cas des moindres carrés non linéaires, notamment la vitesse de calcul et la positivité assurée.

Minima locaux et globaux :

Le problème des minima multiples :

Toutes les méthodes présentées ci dessus ont pour but de trouver un minimum local, sans s'occuper de savoir si d'autres minima locaux existent, ou si le minimum trouvé est le minimum global de la fonction. Si la fonction a plusieurs minima, il n'y a même pas de garantie qu'elles trouvent le minimum le plus proche du point de départ, sans parler du minimum global. Quatre possibilités quant à ce qu'on recherche :

- 1- il est suffisant de connaître un quelconque minimum local
- 2- seul le minimum global est intéressant
- 3- seul un minimum est d'intérêt (i.e. la solution « physique »), mais ce n'est pas forcément le minimum global.
- 4- tous les minima locaux, incluant le minimum global, doivent être catalogués

La première possibilité est rare, mais facile puisque n'importe quelle routine de minimisation fera l'affaire.

La possibilité 2 est plus commune, particulièrement dans l'optimisation des systèmes où le coût doit être le plus petit possible. Quelques solutions existent pour trouver des minima globaux (voir description de 2 méthodes plus loin). Toutes ces solutions souffrent de l'absence d'une règle d'arrêt : même si le minimum global est trouvé, il n'y a aucun moyen de le reconnaître, à moins de savoir que la fonction est bornée et qu'elle a atteint sa borne inférieure.

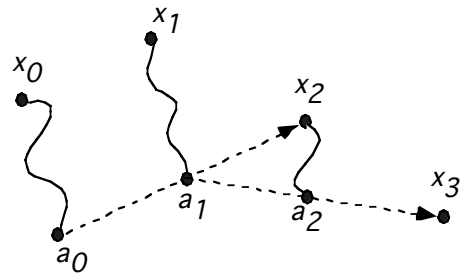
La possibilité 3 survient souvent dans la recherche scientifique ou des approximations de certains paramètres sont connues et qu'on cherche une solution pas trop lointaine de ces valeurs. La technique usuelle pour être sûr de rester dans la « bonne vallée » est de fixer les paramètres approximativement connus à leurs valeurs estimées, et de minimiser par rapport aux autres variables, puis en partant de ce point minimum de minimiser sur tout l'espace des variables.

La possibilité 4 est la plus difficile de toute et n'a pas de solution, à part celle prohibitive d'utiliser beaucoup de points également espacés sur une grille n-dimensionnelle.

L'algorithme de Gelfand

Probablement l'un des méthodes *ad hoc* les plus fructueuse est celle de Gelfand [Gelfand I.M. and Tsetlin M.L., Soviet Phys. Dokl., 6, 192 (1961)]. Elle est non locale parce qu'elle fournit un moyen naturel que la fonction croisse aussi bien qu'elle décroisse à n'importe quel pas, tout en tendant généralement à diminuer la valeur de la fonction.

Partant d'un point x_0 , une minimisation locale commence (par exemple, selon le gradient) jusqu'à ce que les différences entre les pas devienne petite (au point a_0). Puis, en revenant au point de départ, un « long » pas aléatoire est fait au point x_1 , et une autre minimisation est entreprise qui atteint le point a_1 . Puis, le « pas du précipice » est pris sur une ligne de a_0 à a_1 (après a_1) jusqu'à x_2 . Puis, une autre minimisation est effectuée à partir de x_2 donnant a_2 . Un autre « pas du précipice » est fait sur la ligne de a_1 à a_2 menant à x_3 , et la recherche continue ainsi.



Le choix de la longueur du « pas du précipice » est important pour déterminer si la méthode va « rouler » par dessus des petites crêtes, mais buter sur une « haute montagne ». Le choix de la longueur est fait expérimentalement (par essais) et constitue une caractéristique importante de la méthode. De plus, il n'y a pas de règle d'arrêt (problème de toutes les méthodes globales).

Méthode de Goldstein-Price

[Goldstein A.A and Price J.F. Math. Comput., 25, 569 (1971)]

Goldstein et Price ont proposé une méthode élégante et simple pour recherche les autres minima après qu'un minimum ait été trouvé. Cette méthode est basée sur la considération des propriétés analytiques (en série de Taylor) de la fonction. La fonction est représentée par une série de Taylor au minimum local x_l , où les premières dérivées s'annulent :

$$f(x) = f(x_l) + \frac{1}{2}(x - x_l)^T H(x - x_l) + h.t....$$

Maintenant, les termes de haut degré (h.t.), impliquant les dérivées tierce et de plus hauts degrés, sont importants puisque ce sont ces termes qui donneront lieu aux autres minima locaux. En fait, on cherche un moyen de transformer la fonction de manière à ce que seulement ces termes de haut degrés restent. Une telle fonction transformée est f_l :

$$f_l(x_l, x) = \frac{2(f(x) - f(x_l))}{(x - x_l)^T H(x - x_l)} = 1 + h.t....$$

Par le biais de cette transformation, on a « enlevé » le minimum à x_l , et le chemin est « nettoyé » pour chercher d'autres minima générés par les termes de haut degré de l'expansion de Taylor autour de x_l . La méthode consiste donc à chercher un minimum local de f_l . Il est nécessaire de connaître la matrice H des dérivées secondes à x_l . Puisque la forme quadratique $(x - x_l)^T H(x - x_l)$ est toujours positive pour H défini positif, la fonction f_l deviendra négative dès qu'une amélioration sur x_l sera trouvée. Puis en partant de ce nouveau point, la fonction originale f peut être minimisée pour donner un nouveau minimum de f , meilleur que x_l .

Si la valeur minimum trouvée pour f_l est positive, alors cela peut correspondre à un nouveau minimum pour f , mais pas à une amélioration par rapport à x_l . Dans ce cas, la procédure peut être

poursuivie à partir de ce nouveau point, en construisant une nouvelle fonction f_2 à partir de f_1 tout comme f_1 a été construite à partir de f .

Comme pour toutes les méthodes « globales », il n'y a pas de règle d'arrêt. La méthode semble marcher en pratique, bien qu'on ne connaisse pas les conditions sous lesquelles elle est garantie marcher.

Ajustement de courbe théorique sur des points expérimentaux.

Soient (x_i, y_i) les points expérimentaux, une fonction $f_{(p1, p2, p3, \dots)}$, modèle théorique général avec paramètres $p1, p2, p3, \dots$. On cherche à minimiser l'écart entre les y_i et les $f_{(p1, p2, p3, \dots)}(x_i)$, plus exactement le carré de cet écart (puisque la différence algébrique ne mesure pas vraiment la différence car elle est signée).

$$sce(p1, p2, p3, \dots) = \sum_{i=1}^n (f_{(p1, p2, p3, \dots)}(x_i) - y_i)^2$$

Vu qu'on cherche le minimum de la fonction $sce(p1, p2, p3, \dots)$ qui est une fonction des paramètres p_i de f (et non pas fonction des x_i, y_i), on cherche le point (a, b, c, \dots) où la dérivée de $sce(p1, p2, p3, \dots)$ s'annule (où les dérivées partielles de la fonction sce par rapport aux paramètres s'annulent) :

$$\frac{\partial sce(p1, p2, p3, \dots)}{\partial p_j} = \frac{\partial \sum_{i=1}^n (f_{(p1, p2, p3, \dots)}(x_i) - y_i)^2}{\partial p_j} = 0$$

Exemple :

Si $f(x) = ax + b$

On obtient pour les 2 dérivées partielles de sce par rapport aux paramètres a et b :

$$1^\circ) \frac{\partial sce}{\partial a} = \sum_{i=1}^n 2x(ax + b - y) = 0$$

$$2^\circ) \frac{\partial sce}{\partial b} = \sum_{i=1}^n 2(ax + b - y) = 0$$

d'où

$$1^\circ \text{ donne } 3^\circ) \sum_{i=1}^n (ax^2 + bx - yx) = 0$$

$$2^\circ \text{ donne } 4^\circ) a \sum_{i=1}^n x + nb - \sum_{i=1}^n y = 0$$

$$4^\circ \text{ donne } 5^\circ) b = \frac{(\sum_{i=1}^n y - a \sum_{i=1}^n x)}{n}$$

$$5^{\circ} \text{ remplace dans } 3^{\circ}) \sum_{i=1}^n ax^2 + \frac{(\sum_{i=1}^n y - a \sum_{i=1}^n x)}{n} \sum_{i=1}^n x - \sum_{i=1}^n xy = 0$$

$$\text{d'où } 6^{\circ}) a \sum_{i=1}^n x^2 + \frac{\sum_{i=1}^n x \sum_{i=1}^n y}{n} - \frac{a \sum_{i=1}^n x \sum_{i=1}^n x}{n} - \sum_{i=1}^n xy = 0$$

$$\text{et donc : } a = \frac{\sum_{i=1}^n x_i y_i - \frac{\sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i}{n}}{\sum_{i=1}^n x_i^2 - \frac{\sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n x_i}{n}} = \frac{n \sum_{i=1}^n x_i y_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - (\sum_{i=1}^n x_i)^2}$$

Ce qui est la formule standard de la régression linéaire pour le calcul de la pente a .