JEAN ABADIE

GABRIEL GUERRERO

**Méthode du GRG, méthode de Newton globale et
application à la programmation mathématique**

*Revue française d'automatique, d'informatique et de recherche
opérationnelle. Recherche opérationnelle*, tome 18, n° 4 (1984),
p. 319-351.

http://www.numdam.org/item?id=RO_1984__18_4_319_0

© AFCET, 1984, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la revue « Revue française d'automatique, d'informatique et de recherche opérationnelle. Recherche opérationnelle » implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (<http://www.numdam.org/legal.php>). Toute utilisation commerciale ou impression systématique est constitutive d'une infraction pénale. Toute copie ou impression de ce fichier doit contenir la présente mention de copyright.

NUMDAM

Article numérisé dans le cadre du programme
Numérisation de documents anciens mathématiques
<http://www.numdam.org/>

MÉTHODE DU GRG, MÉTHODE DE NEWTON GLOBALE ET APPLICATION A LA PROGRAMMATION MATHÉMATIQUE (*)

par Jean ABADIE ⁽¹⁾ et Gabriel GUERRERO ⁽¹⁾

Résumé. — *Le but de cet article est d'étudier la résolution des systèmes d'équations non linéaires :*

$$f(x)=0, \quad f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n,$$

par la Méthode de Newton Globale. On applique l'algorithme du GRG (gradient réduit généralisé) pour « suivre » la trajectoire donnée par la Méthode de Newton Globale. Application est faite à la programmation mathématique avec contraintes d'inégalité et d'égalité.

Mots clés : Systèmes d'équations non linéaires, programmation non linéaire, Méthode de Newton-Raphson, Méthode de Newton Globale, Méthode d'Homotopie ou de Continuation, Méthode du GRG.

Abstract. — *This paper deals with the solution of a system of nonlinear equations:*

$$f(x)=0, \quad f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n,$$

via the Global Newton Method, which generates a path "followed" by applying the General Reduced Gradient (GRG) Method. The algorithm is then applied to inequalities or equalities constrained mathematical programming problems.

Keywords: Systems of Nonlinear Equations, Nonlinear Programming, Newton Method, Global Newton Method, Homotopy or Continuation Method, GRG Method.

INTRODUCTION

Le but de cet article est d'étudier la résolution des systèmes d'équations non linéaires :

$$f(x)=0, \quad f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n,$$

par la Méthode de Newton Globale. On applique l'algorithme du gradient réduit généralisé (l'algorithme du GRG, J. Abadie, 1978) pour « suivre » la trajectoire donnée par la Méthode de Newton Globale. L'algorithme ainsi

(*) Reçu septembre 1983.

(¹) Institut de Programmation, Université de Paris-VI, 4, place Jussieu, 75230 Paris Cedex 05.

obtenu est ensuite étendu aux problèmes de programmation avec contraintes d'inégalité et d'égalité.

Soit à résoudre l'équation :

$$f(x) = 0,$$

où f est une application de $\mathbb{R}^n$ dans $\mathbb{R}$, et soit $x^0 \in \mathbb{R}^n$. Sous certaines conditions, on peut définir une fonction numérique $\lambda(t)$ et une trajectoire $(x(t), \lambda(t)) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$ telle que l'on ait sur cette trajectoire :

$$f(x(t)) - \lambda(t) f(x^0) = 0,$$

avec, pour $t=0$, les conditions initiales :

$$x(0) = x^0, \quad \lambda(0) = 1.$$

L'idée générale est de suivre cette trajectoire dans $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$, à partir de $t=0$ jusqu'à obtenir une valeur t^* telle que $\lambda(t^*) = 0$. Il est clair qu'alors $x^* = x(t^*)$ vérifie $f(x^*) = 0$.

Des conditions générales suffisantes pour assurer l'existence de la trajectoire et de t^* sur cette trajectoire ont été données par S. Smale (1976), F. J. Gould et C. P. Schmidt (1980).

La méthode que nous étudions ici consiste à considérer le problème de minimisation à $n+1$ variables et n contraintes d'égalité :

$$\begin{aligned} &\min \lambda, \\ &\text{sous les contraintes} \\ &f(x) - \lambda f(x^0) = 0, \end{aligned}$$

en créant des itérés successifs (x^k, λ^k) vérifiant les contraintes et assez voisins pour représenter la trajectoire (le point de départ étant $x^0, \lambda^0 = 1$). Si la trajectoire ainsi déterminée traverse une valeur $\lambda^* = 0$ alors x^* est solution de $f(x) = 0$. Il peut arriver que l'on rencontre un minimum local (x^m, λ^m) avec $\lambda^m > 0$; on poursuit alors la trajectoire en maximisant λ (point de départ x^m, λ^m) jusqu'à un maximum local, à partir duquel on reprend la minimisation. On peut espérer trouver au moins une valeur $\lambda^* = 0$ avec une telle suite de minimisations et maximisations.

La méthode du GRG apparaît bien adaptée à cette suite d'optimisations lorsqu'on choisit convenablement les bornes inférieures et supérieures des variables et le pas de la recherche unidimensionnelle.

Nous exposons succinctement dans une première partie quelques généralités utiles sur la Méthode de Newton Globale et la méthode du GRG, puis nous

appliquons cette méthode pour « suivre » la trajectoire dans la Méthode de Newton Globale.

Dans la deuxième partie nous appliquons l'algorithme numérique ainsi défini au problème de la minimisation d'une fonction $J(x)$ sous des conditions $d(x) \leq 0$, en considérant trois manières d'amener ce problème au précédent. Le cas où certaines inéquations sont remplacées par des équations se traite alors d'une manière immédiate.

Les logiciels ont été appliqués à de nombreux exemples : nous en donnons deux pour la première partie et un pour la deuxième partie.

1. RÉSOLUTION DU SYSTÈME $f(x)=0$

Dans cette partie nous considérons la résolution des systèmes d'équations non linéaires.

1.1. Rappel de la Méthode de Newton Globale

Soit M un sous-ensemble ouvert et borné de $\mathbb{R}^n$, et $\bar{M}$ son adhérence (c'est-à-dire $\bar{M} = M \cup \partial M$, où ∂M est la frontière de M). Dans la suite f désigne une application k fois continûment dérivable d'un ouvert contenant $\bar{M}$, à valeurs dans $\mathbb{R}^p$, avec $k \geq 2$. On écrira, pour abréger, $f \in C^k(\bar{M})$.

Considérons le problème suivant :

Résoudre :

$$f(x)=0, \quad \text{avec } x \in M. \quad (1)$$

Avant de donner le théorème fondamental on rappelle la notion de valeur régulière.

DÉFINITION : Soit $H: \bar{E} \subset \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}^n$. On dit que $y \in \mathbb{R}^n$ est une valeur régulière de H dans $\bar{E}$ si pour tout $w \in H^{-1}(y) \cap \bar{E}$ la matrice $DH(w)$ est de rang maximal, où $DH(w)$ désigne la matrice (n, p) dont les éléments sont :

$$\frac{\partial H_i(w)}{\partial x_j}, \quad 1 \leq i \leq n, \quad 1 \leq j \leq p.$$

Dans cet article on aura toujours $p \geq n$; le rang maximal est donc n .

On dit que $M \subset \mathbb{R}^n$ est un ensemble à frontière lisse et connexe, en abrégé M est à f.l.c., si les deux conditions suivantes sont réunies :

(a) ∂M , la frontière de M , est un ensemble connexe. Autrement dit il n'existe pas deux ensembles V, W ouverts dans ∂M et tels que :

$$V \cap W = \emptyset \quad \text{et} \quad \partial M = V \cup W$$

(rappelons que V est un ouvert dans ∂M s'il existe un ouvert V' de $\mathbb{R}^n$ tel que $V = V' \cap \partial M$).

(b) ∂M est un ensemble lisse. Autrement dit, pour tout $x \in \partial M$ il existe un voisinage V_x de x , un ouvert U dans $\mathbb{R}^{n-1}$, et un difféomorphisme de classe C^1 , $g: U \rightarrow V_x \cap \partial M$.

L'assertion (b) revient à dire que ∂M est une variété de classe C^1 et de dimension $n-1$ (voir J. Milnor, 1965).

Définissons maintenant les conditions à la frontière de Smale. Soit $f \in C^1(\bar{M})$, où M est un ensemble à f. l. c. ouvert et borné de $\mathbb{R}^n$. Les conditions sont les suivantes :

$$\left. \begin{array}{l} (a) \text{ pour tout } u \in \partial M, Df(u) \text{ est une matrice non singulière,} \\ (b) \text{ pour tout } u \in \partial M, \text{ la direction de Newton } -Df(u)^{-1}f(u) \text{ est} \\ \text{constamment dirigée vers l'intérieur de } M \text{ (resp. constamment dirigée} \\ \text{vers l'extérieur de } M). \end{array} \right\} \quad (2)$$

Le théorème fondamental est :

THÉORÈME 1 (S. Smale, 1976; H. B. Keller, 1978) : Soit $f \in C^2(\bar{M})$ où M est un ensemble à f. l. c. ouvert et borné de $\mathbb{R}^n$, vérifiant les conditions à la frontière de Smale, et soit $x^0 \in \partial M$. Si $0 \in \mathbb{R}^n$ est une valeur régulière dans $\bar{M} \times \mathbb{R}$ de l'application $H: \bar{M} \times \mathbb{R} \subset \mathbb{R}^{n+1} \rightarrow \mathbb{R}^n$ définie par :

$$H(x, \lambda) = f(x) - \lambda f(x^0), \quad (3)$$

il existe un intervalle réel V contenant 0 et une trajectoire contenue dans M continûment différentiable, $t \rightarrow (x(t), \lambda(t)) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$, définie dans V , telle que :

$$\left. \begin{array}{l} (a) \quad H(x(t), \lambda(t)) = f(x(t)) - \lambda(t)f(x^0) = 0, \\ (b) \quad \left\| \frac{dx(t)}{dt} \right\|^2 + \left| \frac{d\lambda(t)}{dt} \right|^2 = 1, \\ (c) \quad x(0) = x^0, \quad \lambda(0) = 1. \end{array} \right\} \quad (4)$$

On peut de plus prendre V assez grand pour qu'il existe un $t^* \in V$ tel que $\lambda(t^*) = 0$; $x^* = x(t^*)$ est alors une solution de $f(x) = 0$ dans M .

Remarquons que les conditions à la frontière (2) peuvent être modifiées. On remplace (2) par les conditions (5) (F. J. Gould et C. P. Schmidt, 1980).

DÉFINITION : Soit C un ensemble ouvert borné et connexe avec ∂C lisse. On dit que les directions de Newton en $x \in \partial C$ et $y \in \partial C$ sont en accord par rapport à C si les conditions suivantes sont réunies :

(a) $Df(x)$ et $Df(y)$ sont des matrices non singulières;

(b) les directions de Newton $-Df(x)^{-1}f(x)$ et $-Df(y)^{-1}f(y)$ ne sont pas tangentes à C ;

(c) ces directions sont toutes deux dirigées, soit vers l'intérieur de C , soit vers l'extérieur de C .

On dit que les directions de Newton sont en désaccord si les conditions (a) et (b) sont vérifiées et si les directions de Newton en x et y sont dirigées l'une vers l'intérieur de C et l'autre vers l'extérieur de C .

Définissons maintenant les conditions à la frontière de Gould et Schmidt. Soit $f \in C^1(\bar{C})$ où C est un ensemble ouvert borné connexe de $\mathbb{R}^n$ avec ∂C lisse. Ces conditions sont les suivantes :

(a) $S = \{x \in \partial C : \det Df(x) = 0\}$ est de mesure de Lebesgue nulle sur ∂C ;

(b) quels que soient $x, y \in \partial C - S$, si $\det Df(x)$ et $\det Df(y)$ ont même (5) signe, alors les directions de Newton en x et y sont en accord; sinon elles sont en désaccord.

Le résultat de F. J. Gould et C. P. Schmidt est le suivant :

THÉORÈME 2 : Soit $f \in C^2(\bar{C})$ où C est un ensemble ouvert, borné et connexe de $\mathbb{R}^n$ avec ∂C lisse, vérifiant les conditions à la frontière de Gould et Schmidt. Si $0 \in \mathbb{R}^n$ est une valeur régulière dans $\bar{C} \times \mathbb{R} \times \partial C$ de l'application $G(x, \mu, w) = f(x) - \mu f(w)$, où $G: \bar{C} \times \mathbb{R} \times \partial C \rightarrow \mathbb{R}^n$, $x \in \bar{C}$, $\mu \in \mathbb{R}$, $w \in \partial C$ alors $f(x) = 0$ admet une solution dans $\bar{C}$. Si on suppose de plus que $0 \in \mathbb{R}^n$ est une valeur régulière dans $\bar{C}$ de f , le système $f(x) = 0$ admet une solution dans C .

Pour une analyse des conditions à la frontière (2) ou (5) on pourra consulter l'annexe 1 en fin d'article.

En résumé pour résoudre le système :

$$f(x) = 0, \quad f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n,$$

la Méthode de Newton Globale s'inspire des considérations suivantes :

(1) Soit $x^0 \in \mathbb{R}^n$ un point de départ. On suppose qu'il existe un ouvert borné M vérifiant les conditions suivantes :

(a) $x^0 \in \partial M$;

(b) $0 \in \mathbb{R}^n$ est une valeur régulière dans $\bar{M} \times \mathbb{R}$ de l'application H définie par $H(x, \lambda) = f(x) - \lambda f(x^0)$;

(c) les conditions à la frontière (2) [ou (5)].

(2) L'ensemble des points $H^{-1}(0) \subset \mathbb{R}^{n+1}$ contient une trajectoire $(x(t), \lambda(t))$ définie par les équations :

$$\left. \begin{aligned} (a) \quad & H(x(t), \lambda(t)) = f(x(t)) - \lambda(t) f(x^0) = 0; \\ (b) \quad & Df(x(t)) \frac{dx(t)}{dt} - \frac{d\lambda(t)}{dt} f(x^0) = 0; \\ (c) \quad & \left\| \frac{dx(t)}{dt} \right\|^2 + \left| \frac{d\lambda(t)}{dt} \right|^2 = 1; \\ (d) \quad & x(0) = x^0, \quad \lambda(0) = 1. \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

On ajoute une condition d'orientation de la trajectoire :

$$\det \begin{bmatrix} Df(x(t)) & -f(x^0) \\ \frac{dx(t)}{dt} & \frac{d\lambda(t)}{dt} \end{bmatrix} > 0 \quad (\text{resp. } < 0), \quad (6e)$$

si la trajectoire est entrante (resp. sortante).

Le problème est donc de trouver un $t^* \in V$ tel que $\lambda(t^*) = 0$. En effet, dans ce cas $x^* = x(t^*)$ est une solution de $f(x) = 0$.

L'idée de l'algorithme de Newton Global est de suivre la trajectoire $t \rightarrow (x(t), \lambda(t)) \in \bar{M} \times \mathbb{R}$ à partir du point $(x^0, 1)$. Si $\lambda(t)$ s'annule sur cette trajectoire alors nous avons trouvé une solution de $f(x) = 0$ dans $\bar{M}$.

Une caractéristique importante de cette méthode est de trouver, dans certains cas, plus d'une solution, en continuant à cheminer sur la trajectoire, une fois trouvée la première solution.

D'après (6b) et (6c) il est clair que si $d\lambda(t^*)/dt = 0$ pour un t^* alors $\det Df(x(t^*)) = 0$, résultat dont on peut démontrer la réciproque. Plus précisément on peut démontrer le résultat suivant :

$$\text{signe } \lambda^{\cdot}(t) = \alpha \text{ signe } \det Df(x(t)), \quad \forall t \in V, \quad (7)$$

où α est constamment égal, soit à $+1$, soit à -1 , sans changer de valeur au cours du calcul. Autrement dit, sur la trajectoire, $\lambda^{\cdot}(t)$ et $\det Df(x(t))$ ont soit constamment même signe, soit constamment signes contraires (voir H. B. Keller, 1978, lemme 2.10) (fig. 1).

Remarquons que si $d\lambda(t^*)/dt = 0$ et $\lambda(t^*) = 0$, alors $f(x(t^*)) = 0$ et $\det Df(x(t^*)) = 0$, il en résulte que $0 \in \mathbb{R}^n$ n'est pas valeur régulière de l'application f dans $\bar{M}$.

Remarquons aussi que lorsque le point de départ x^0 est tel que $f_i(x^0) = 0$, alors $f_i(x(t)) = 0$. Autrement dit, la trajectoire reste dans $f_i^{-1}(0)$ et plus précisément dans une même composante connexe de ce dernier ensemble.

D'autre part il faut noter que la trajectoire ne peut passer par un point $\bar{x}$ tel que un $f_{i_0}(\bar{x})=0$ et $f_{i_0}(x^0) \neq 0$ que si tous les $f_i(\bar{x})=0$, c'est-à-dire si $\bar{x}$ est une solution (en effet, on a $\lambda=0$ pour $x=\bar{x}$).

Figure 1. — Les points définis par $d\lambda(t)/dt=0$ correspondent à $\det Df(x(t))=0$ et les points définis par $\lambda(t)=0$ à des solutions de $f(x)=0$.

1.2. La méthode du gradient réduit généralisé

Parmi les méthodes numériques de résolution de problèmes d'optimisation non linéaires, la méthode du GRG se trouve dans plusieurs études comparatives comme l'une des plus performantes (A. R. Colville, 1968; K. Schittkowski, 1980; on trouvera d'autres références dans J. Abadie, 1978).

Considérons le problème de la programmation non linéaire avec contraintes d'égalité :

$$(PCE) \quad \begin{cases} \min J(u), & J: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, \\ \text{sous les contraintes} \\ c(u)=0, & c: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m. \end{cases}$$

La méthode du GRG pour résoudre le problème (PCE) est la suivante :

Soit $x \in \mathbb{R}^n$ un point réalisable, c'est-à-dire un point vérifiant $c(x)=0$. On fait l'hypothèse suivante :

(HR) la matrice $Dc(x)$ est de rang m .

Il en résulte que $Dc(x)$ possède une sous-matrice régulière B d'ordre m . On décompose cette matrice en $Dc(x) = (N, B)$. Soit $x = (x_N, x_B)$ la décomposition correspondante de x . Dans la terminologie du GRG, inspirée de la méthode du simplexe pour la programmation linéaire, la variable x se trouve ainsi décomposée en la partie non basique $x_N \in \mathbb{R}^{n-m}$ et la partie basique $x_B \in \mathbb{R}^m$.

Nous avons les notations suivantes :

$$\begin{aligned} N &= D_1 c(x) \text{ matrice } (m, n-m), \\ B &= D_2 c(x) \text{ matrice } (m, m) \text{ non singulière,} \\ x &= (x_N, x_B), \quad A = (N, B), \\ j' &= (j'_N, j'_B) = J'(x) = DJ(x). \end{aligned}$$

On applique le théorème des fonctions implicites à la fonction $c: \mathbb{R}^{n-m} \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ au voisinage du point réalisable $x = (x_N, x_B)$. Alors nous avons deux applications continues :

$$g: V(x_N) \subset \mathbb{R}^{n-m} \rightarrow V(x_B) \subset \mathbb{R}^m,$$

et

$$G: v \in V(x_N) \rightarrow G(v) = J(v, g(v)) \in \mathbb{R},$$

où $V(x_N)$ est un voisinage de $x_N \in \mathbb{R}^{n-m}$ et $V(x_B)$ un voisinage de $x_B \in \mathbb{R}^m$ tels que :

$$\{(z_1, z_2) \in \mathbb{R}^{n-m} \times \mathbb{R}^m : z_1 \in V(x_N), z_2 = g(z_1)\} = c^{-1}(0) \cap V(x_N) \times V(x_B).$$

Les seuls voisinages $V(u)$ considérés ici sont des boules ouvertes de centre u .

De plus, on peut calculer $Dg(x_N)$ par :

$$Dg(x_N) = -D_2 c(x)^{-1} D_1 c(x) = -B^{-1} N.$$

Si le point admissible $x = (x_N, x_B)$ est « proche » d'une solution : $x^* = (x_N^*, x_B^*)$,

du problème (PCE), le théorème des fonctions implicites nous donne $x_B^* = g(x_N^*)$, et x_N^* est une solution du problème réduit :

$$(PR) \quad \min_{v \in V(x_N) \subset \mathbb{R}^{n-m}} G(v)$$

[ci-dessus, x^* est « proche » de x si $x^* \in V(x_N) \times V(x_B)$]; x^* vérifie les conditions de Kuhn et Tucker pour le problème (PCE), les multiplicateurs étant les composantes du vecteur $u = -j'_B B^{-1}$ calculé en x^* .

Si le point admissible x n'est pas proche d'une solution x^* alors la méthode donne un autre point admissible dans le voisinage $V(x_N)$, à partir duquel on répète le procédé. Les voisinages successifs se recouvrent et la fonctionnelle J décroît. [En fait dans GRG on peut considérer le nouveau point admissible en dehors de $V(x_N)$, mais nous simplifions ici.]

La méthode ne peut fonctionner que si l'on se permet de changer, le cas échéant, l'ensemble basique B d'une itération à l'autre.

L'algorithme du GRG peut se résumer comme suit :

- (1) Au point admissible x on effectue la décomposition $x = (x_N, x_B)$.
- (2) Si $G'(x_N) = j'_N - j'_B B^{-1} N = 0$, alors le point x satisfait les conditions de Kuhn et Tucker, le vecteur $u = -j'_B B^{-1}$ étant le vecteur des multiplicateurs.

Sinon soit $h \in \mathbb{R}^{n-m}$ une direction de descente de la fonction réduite :

$$v \in \mathbb{R}^{n-m} \rightarrow G(v) = J(v, g(v)) \in \mathbb{R},$$

au point $x_N \in \mathbb{R}^{n-m}$. Autrement dit, h vérifie $G'(x_N)h = (j'_N - j'_B B^{-1} N)h < 0$.

Par exemple on peut prendre comme direction de descente, $h = -G'(x_N)^T$, ou une direction de gradient conjugué, ou une direction quasi newtonienne.

- (3) On choisit un $\theta > 0$ tel que, si l'on pose $x_N^1 = x_N + \theta h$, alors $x_N^1 \in V(x_N) \subset \mathbb{R}^{n-m}$.

(4) A l'aide de la fonction $g: V(x_N) \rightarrow V(x_B) \subset \mathbb{R}^m$, on pose $x_B^1 = g(x_N^1) \in V(x_B)$. Autrement dit, $c(x_N^1, x_B^1) = 0$, de sorte que (x_N^1, x_B^1) soit un point admissible. Le point $x_B^1 \in \mathbb{R}^m$ est une solution du système de m équations non linéaires aux m inconnues y :

$$c(x_N^1, y) = 0, \quad x_N^1 \in \mathbb{R}^{n-m}, \quad y \in \mathbb{R}^m.$$

- (5) Si $G(x_N^1) \geq G(x_N)$, on diminue θ et l'on revient en (4).
- (6) On va en (1) pour une nouvelle itération, le nouveau point admissible x^1 remplaçant x .

Si le point de départ n'est pas admissible une étape préliminaire incorporée à la méthode permet d'en trouver un.

Par ailleurs remarquons que la condition (HR) est liée aux conditions (a), (b) et (c) suivantes :

- (a) la matrice $Dc(x)$ est de rang maximal m ;
- (b) les vecteurs $Dc_i(x)$, $1 \leq i \leq m$, sont linéairement indépendants;
- (c) $0 \in \mathbb{R}^m$ est une valeur régulière de l'application c .

D'autre part cette condition (HR) permet de donner à l'ensemble des points admissibles une structure de (sous)-variété différentielle. Autrement dit l'ensemble $c^{-1}(0)$ au voisinage du point admissible $x = (x_N, x_B)$ est une variété de dimension $n - m$.

Dans la méthode du GRG, étant donné le point admissible $x = (x_N, x_B)$, on cherche un point voisin $(x_N + \theta h, y)$ dans cette variété différentielle. Pour résoudre le système de m équations aux m inconnues $y : c(x_N + \theta h, y) = 0$, c'est-à-dire pour trouver le point $(x_N + \theta h, y)$ dans la variété différentielle, une idée intéressante consiste à utiliser l'hyperplan tangent à cette variété au point $x = (x_N, x_B)$. Cet hyperplan a pour équation :

$$A w = 0, \quad w = (w_N, w_B) \in \mathbb{R}^{n-m} \times \mathbb{R}^m,$$

où, rappelons-le, $A = Dc(x) = (N, B)$.

Soit $w_N = h$ la direction de descente. On pose :

$$k = w_B = -B^{-1} N h.$$

L'idée générale pour résoudre en y le système $c(x_N + \theta h, y) = 0$ est la suivante :

(1) Faire un déplacement à partir du point $x = (x_N, x_B)$ dans la direction (h, k) , soit $(x_N + \theta h, x_B + \theta k)$.

(2) On cherche ensuite avec une méthode itérative un point dans l'intersection de la variété $c^{-1}(0)$ avec l'hyperplan d'équation :

$$\{(z_1, z_2) \in \mathbb{R}^n : z_1 = x_N + \theta h\}.$$

On peut choisir, comme point de départ, le point $(x_N + \theta h, x_B + \theta k)$, et comme méthode itérative une méthode de Newton modifiée, où l'on aura remplacé la matrice hessienne par B , ce qui a l'intérêt d'éviter de nouveaux calculs de la matrice hessienne et de son inverse, mais l'inconvénient de remplacer une convergence, en général d'ordre 2, par une convergence d'ordre 1 : les itérés successifs de cette méthode de Newton modifiée sont donc :

$$y^1 = x_B + \theta k, \quad y^{p+1} = y^p - B^{-1} c(x_N + \theta h, y^p), \quad p = 1, 2, \dots$$

(on trouvera les détails dans J. Abadie, 1978).

1.3. Application de la méthode GRG pour « suivre » la trajectoire donnée par la Méthode de Newton Globale

Le but de ce paragraphe est d'appliquer la méthode du GRG pour « suivre » la trajectoire de la Méthode de Newton Globale. Ceci est réalisé par une suite de problèmes de minimisation et de maximisation résolus avec la méthode du GRG. On résout des problèmes du type :

$$(PO) \quad \begin{cases} \text{optimiser } J(x, \lambda) = \lambda, \\ \text{sous les contraintes} \\ H(x, \lambda) = 0, \\ XI \leq (x, \lambda) \leq XS, \end{cases}$$

où H est la fonction d'homotopie $H(x, \lambda) = f(x) - \lambda f(x^0)$, et où les bornes XI et XS sont choisies convenablement pour chaque problème (PO).

Il est clair que résoudre le système :

$$(SN) \quad f(x) = 0, \quad f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n,$$

équivalant à trouver un point sur la trajectoire donnée par l'algorithme de Newton Global tel que :

$$(x^*, \lambda^*) \in H^{-1}(0) \quad \text{et} \quad \lambda^* = 0.$$

Pour résoudre le problème (SN) nous sommes donc amenés à chercher sur la trajectoire les points de paramètre d'homotopie nul.

Pour initialiser notre algorithme on choisit comme point de départ $(x^0, 1)$ et $XI_\lambda = 0$ (borne inférieure du paramètre d'homotopie). Les autres bornes XI , XS sont en principe choisies assez grandes en valeur absolue pour que le paralléloétope défini dans $\mathbb{R}^n$ par les bornes de la variable x contienne des solutions du problème (SN).

Si l'on veut empêcher des itérations inutiles du GRG on peut choisir les bornes initiales XI , XS de faible valeur. Dans cette situation le code du GRG peut s'arrêter sans avoir obtenu le point optimal cherché [maximum ou minimum de $J(x, \lambda) = \lambda$ sous les contraintes $H(x, \lambda) = 0$] ou sans avoir obtenu le point (x, λ) de paramètre d'homotopie nul. Ceci a lieu lorsque dans la méthode du GRG on atteint une borne XI , XS différente de $XI_\lambda = 0$. Il faut alors repousser la borne atteinte et appliquer à nouveau l'algorithme du GRG au même problème d'optimisation. Le point initial est alors le dernier point calculé sur la trajectoire. Autrement dit, on repousse les bornes et on continue « à suivre » la trajectoire à partir du dernier point réalisable calculé.

Dans notre algorithme nous avons deux phases. Dans la première, il s'agit d'un problème d'optimisation où l'on peut trouver (x^*, λ^*) , un point sur la trajectoire tel que $\lambda^* = 0$, c'est-à-dire une solution de $f(x) = 0$. Dans la deuxième phase, une phase « auxiliaire », on cherche un optimum local de $J(x, \lambda) = \lambda$ tel que $\lambda^* \neq 0$. Cette phase nous ramènera à la première; on passe alternativement de l'une à l'autre. A chaque pas d'optimisation, on prend pour point de départ la solution obtenue par le pas d'optimisation immédiatement précédent, solution que nous appelons *solution antérieure*.

ALGORITHME : (1) On choisit un point de départ $x^0 \in \mathbb{R}^n$ et les valeurs initiales des bornes inférieures et supérieures XI , XS . On pose $XI_\lambda = 0$ et $\lambda^0 = 1$.

(2) Si au début il faut maximiser alors on applique GRG au problème de maximisation (PO). On est en phase II. Soit (x^M, λ^M) la solution trouvée. Aller en (6).

Sinon on applique la méthode du GRG au problème de minimisation (PO). On est en phase I. Soit (x^m, λ^m) la solution trouvée.

(3) Si $\lambda^m = 0$, le point x^m est une solution de (SN). S'il n'y a plus de solutions à trouver on arrête l'algorithme. Sinon aller en (8).

Si $\lambda^m \neq 0$. Le point (x^m, λ^m) est une solution locale de (PO).

(4) On applique la procédure de modification de bornes XI, XS . On pose $XI_\lambda = 0$.

(5) On applique l'algorithme du GRG au problème de maximisation (PO), le point de départ étant la solution antérieure légèrement modifiée. On est en phase II. Soit (x^M, λ^M) la solution trouvée par GRG.

(6) On applique la procédure de modification des bornes XI, XS . On pose $XI_\lambda = 0$.

(7) On applique l'algorithme du GRG au problème de minimisation (PO), avec comme point de départ la solution antérieure légèrement modifiée. Soit (x^m, λ^m) la solution trouvée. Aller en (3).

(8) Les bornes XI, XS prennent leurs valeurs initiales. On pose $XS_\lambda = 0$.

(9) On applique GRG au problème de minimisation (PO), le point de départ étant la solution antérieure légèrement modifiée. On est en phase II. Soit (x^m, λ^m) la solution donnée par GRG.

(10) On modifie les bornes XI, XS . On pose $XS_\lambda = 0$.

(11) On applique GRG au problème de maximisation (PO). Le point de départ étant la solution antérieure légèrement modifiée. On est en phase I. Soit (x^M, λ^M) la solution obtenue.

(12) Si $\lambda^M = 0$, le point x^m est une solution du système (SN). S'il n'y a pas d'autres solutions à trouver on arrête, sinon les bornes XI, XS reprennent leurs valeurs initiales. On pose $XI_\lambda = 0$. Aller en (5).

Si $\lambda^M \neq 0$. On applique la procédure de modification des bornes XI, XS . On pose $XS_\lambda = 0$. Aller en (9).

Procédure de modification des bornes XI, XS et de choix du point de départ dans la méthode du GRG

L'idée essentielle pour choisir les bornes XI, XS à chaque phase est d'empêcher la méthode du GRG de revenir en arrière lorsqu'on « parcourt » la trajectoire. Pour choisir le point de départ de la méthode du GRG on modifie légèrement la solution antérieure afin de ne pas vérifier les conditions nécessaires d'optimalité.

Compte tenu de la structure de l'algorithme du GRG, le vecteur tangent à la trajectoire de Newton Globale est donné par la direction $w = (w_N, w_B)$ dans

l'hyperplan tangent au point (x_N, x_B) , d'où l'idée de choisir le point de départ et les bornes XI, XS dans chaque problème (PO) de la manière suivante :

Soit XC la solution antérieure du problème (PO) donnée par GRG. Soit $XDEP$ le point de départ à choisir. Soit $\eta > 0$ une « petite perturbation » :

Pour les composantes non basiques $i \in \mathcal{N}$:

Si $w_i < 0$, alors on modifie la borne supérieure XS_i en posant $XS_i = XC_i$, et on prend comme point de départ $XDEP_i = XC_i - \eta$.

Si $w_i > 0$, alors on modifie la borne inférieure XI_i en posant $XI_i = XC_i$, et comme point de départ $XDEP_i = XC_i + \eta$, $i \in \mathcal{N}$.

Pour les composantes basiques $i \in \mathcal{B}$:

Les bornes XI, XS prennent leurs valeurs initiales, c'est-à-dire les valeurs dans le paralléloétope choisi au début de l'algorithme. Le point de départ est $XDEP_i = XC_i$, $i \in \mathcal{B}$.

Notons que le point de départ $XDEP$ n'est pas forcément réalisable (dans le code du GRG, une étape préliminaire permet d'en trouver un).

Dans le code GRGA (Abadie, 1978) on effectue quelques modifications pour tenir compte de chaque phase de notre algorithme. Le lecteur peu familier avec cette référence pourra sauter les passages (a), (b) et (c) suivants.

Les modifications sont effectuées :

(a) Dans le calcul de la longueur du pas unidimensionnel (paramètre TB). La valeur initiale de la longueur du pas est très grande car l'on cherche des points à la frontière du paralléloétope défini par les bornes XI et XS . Dans la deuxième phase, on change la valeur de TB de 10^{30} , donnée dans le code, en une valeur petite (par exemple 1).

(b) Dans un test d'arrêt (paramètre EPS1, tolérance pour l'optimum). Le paramètre EPS1 définit un test d'arrêt, qui dépend des bornes XI et XS . Dans la deuxième phase on change la valeur initiale donnée du paramètre EPS1 (10^{-2}) en une valeur plus grande (par exemple 1,5), de façon à éviter les calculs destinés à une précision inutile ici.

(c) On ajoute au code quelques instructions pour connaître à chaque itération les variables hors base et les valeurs des composantes correspondantes du vecteur tangent. Ici il faut tenir compte du fait que le code du GRG ajoute automatiquement quelques variables artificielles si le point de départ n'est pas admissible.

D'autre part si on ne connaît pas à l'avance l'allure du paramètre d'homotopie, comme cela est souvent le cas, on commence l'algorithme en

minimisant λ . Si au bout d'un certain nombre d'itérations on n'a pas trouvé de solution de $f(x)=0$, alors on recommence les calculs à partir du point x^0 , $\lambda^0=1$, en maximisant λ ; autrement dit, on parcourt l'autre partie de la trajectoire.

Dans le cas d'un système d'équations qui admet plusieurs solutions il faut parcourir la trajectoire dans les deux sens, à partir de $x=x^0$, $\lambda=1$. Il peut exister des solutions de chaque côté de la trajectoire.

Il faut noter qu'en l'état actuel de nos recherches, le cas particulier $\lambda(t^*)=0$ et $d\lambda(t^*)/dt=0$ est écarté. Les modifications nécessaires seront exposées dans un article ultérieur.

L'organigramme de cet algorithme est donné dans l'annexe 2.

1.4. Exemples numériques

Dans ce paragraphe nous traitons deux exemples numériques de résolution des systèmes d'équations non linéaires. Il s'agit de systèmes de deux équations à deux inconnues très simples qui ont le mérite de montrer les avantages et inconvénients de la Méthode de Newton Globale (ces exemples sont dus à J. Vignes, 1980).

Exemple 1 : Considérons le système non linéaire :

$$f(x) = \begin{pmatrix} -7x_2^2 + 6x_1x_2 - 4x_1 - 9x_2 - 12 \\ -7x_2^2 - 6x_1x_2 + 10x_1 + x_2 + 30 \end{pmatrix}.$$

La matrice jacobienne est :

$$Df(x) = \begin{pmatrix} 6x_2 - 4 & -14x_2 + 6x_1 - 9 \\ -6x_2 + 10 & -14x_2 - 6x_1 + 1 \end{pmatrix}$$

et le jacobien est :

$$\det Df(x) = -168x_2^2 + 148x_2 - 36x_1 + 86.$$

Ce système admet trois solutions :

$$A^* = \begin{pmatrix} 7,414\,658\dots \\ 1,846\,199\dots \end{pmatrix}, \quad B^* = \begin{pmatrix} -3 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad C^* = \begin{pmatrix} -1,016\,515\dots \\ -1,250\,960\dots \end{pmatrix}.$$

Notons immédiatement que les conditions à la frontière (2) ou (5) ne sont pas nécessairement vérifiées dans cet exemple : cela dépend du choix de l'ensemble M dans lequel on désire trouver des solutions.

Dans la méthode de Newton-Raphson en partant du point initial $a = (-9; 8)$ on obtient la solution A^* et non la solution B^* , plus proche.

Analysons ce point de départ plus en détail :

$$a = (-9; 8), \quad f(a) = (-928; -68), \quad \det Df(a) = -9\,158.$$

En ce point de départ, $H^{-1}(0)$ comporte deux composantes γ_a^1 et γ_a^2 . De ces deux composantes la première seule, γ_a^1 , contient le point de départ $a = (-9; 8)$. Chaque composante contient des solutions du système $f(x) = 0$.

Il est important de remarquer que l'autre composante γ_a^2 n'est pas accessible par notre méthode numérique.

L'allure du paramètre d'homotopie est représentée par la figure 2.

Figure 2. — Allure du paramètre d'homotopie.

Analysons la condition à la frontière (5) avec le sous-ensemble $M \subset \mathbb{R}^2$ donné par la figure 3.

Figure 3. — Courbes de niveau zéro de $f_1(x)$, de $f_2(x)$, la projection sur $\mathbb{R}^2$ de deux composantes, γ_a^1 et γ_a^2 de $H^{-1}(0)$ et le sous-ensemble $\{x \in \mathbb{R}^2 : \det Df(x) = 0\}$.

Remarquons que les points $(a; 1)$ et $(A^*; 0)$ appartiennent à la composante γ_a^1 et les points $(B^*; 0)$ et $(C^*; 0)$ à la composante γ_a^2 .

Choisissons deux points sur la composante γ_a^2 : $(x_e, 1)$, et (x_s, λ) , avec $\lambda = 0,044\,742\,7$:

$$x_e = (7,451\,411\,3; -8,986\,499\,6),$$

$$x_s = (-6,760\,626\,4; 1).$$

On suppose le sous-ensemble M choisi en sorte que x_e et x_s appartiennent à la frontière de M .

En partant du point x_e on suit la trajectoire γ_a^2 , rencontrant successivement les solutions C^* et B^* du système $f(x) = 0$, puis on sort du sous-ensemble M par le point x_s .

On constate que pour les points x_e et x_s la condition à la frontière (5) n'est pas vérifiée. En effet, en x_e et x_s les directions de Newton sont en accord et signe $\det Df(x_e) = -\text{signe } \det Df(x_s)$. Plus précisément les directions de Newton sont dirigées vers l'intérieur de M . Cependant sur la trajectoire construite à partir du point x_e il y a deux solutions du système $f(x) = 0$. A la fin de cet article dans l'annexe 1 on analyse plus en détail les conditions à la frontière et cette situation est clarifiée.

Dans le tableau I nous résumons les résultats des calculs à partir de différents points de départ.

A partir des points de départ a, c, d, g et h de $\mathbb{R}^2$ nous avons trouvé différents comportements de la trajectoire.

Pour le point de départ $a = (-9; 8)$, on trouve une seule solution A^* du système $f(x) = 0$ sur la composante qui contient le point $a = (-9; 8)$. Ceci est aussi le cas pour le point $c = (0; -1)$ mais cette fois-ci on trouve une autre solution, C^* , de $f(x) = 0$.

Pour le point de départ $d = (-6; -1)$ on trouve toutes les solutions sur la trajectoire. Ici il faut parcourir la trajectoire dans les deux sens: on trouve des solutions de chaque côté de la trajectoire.

Pour le point $g = (-6; 1)$ on trouve seulement deux solutions sur la trajectoire. Les deux solutions sont du même côté de la trajectoire; la solution A^* ne peut pas être obtenue.

Finalement pour le point $h = (1; -2)$ on trouve toutes les solutions du système $f(x) = 0$ sur la trajectoire. Les trois solutions sont du même côté de la trajectoire.

D'autre part, pour tous les points de départ, $H^{-1}(0)$ comporte deux composantes. Seule la composante qui contient le point de départ $(x^0, 1)$ est accessible par notre méthode.

TABLEAU I

Exemple 1 : $f_1(x) = -7x_2^2 + 6x_1x_2 - 4x_1 - 9x_2 - 12$, $f_2(x) = -7x_2^2 - 6x_1x_2 + 10x_1 + x_2 + 30$.

x^0	$f(x^0)$	$\det Df(x^0)$	Newton-Raphson solution trouvée	Newton globale	Allure du paramètre d'homotopie
$a = \begin{pmatrix} -9 \\ 8 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -928 \\ -68 \end{pmatrix}$	-9158	A^*	Sur la composante qui contient le point de départ une seule solution trouvée, A^* .
$c = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -10 \\ 22 \end{pmatrix}$	-230	C^*	Ce cas est analogue au précédent mais la solution trouvée est C^* .
$d = \begin{pmatrix} -6 \\ -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 50 \\ -74 \end{pmatrix}$	-14	C^*	On trouve toutes les solutions sur la composante qui contient le point de départ. Il faut parcourir la trajectoire dans les deux sens.
$g = \begin{pmatrix} -6 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -40 \\ 0 \end{pmatrix}$	282	B^*	On trouve deux solutions. Cette trajectoire coïncide avec une composante de $f_2^{-1}(0)$.
$h = \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -38 \\ 22 \end{pmatrix}$	-918	C^*	Cas analogue à d. On trouve toutes les solutions mais il suffit de parcourir la trajectoire dans un seul sens.
Remarque : $H^{-1}(0)$ comporte deux composantes pour tous les points.					

Exemple 2 : Considérons $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ définie par :

$$f(x) = \begin{pmatrix} x_1 x_2 - 2 \\ -2 x_1 + x_2^2 - 2 \end{pmatrix}.$$

La solution unique du système d'équations non linéaires $f(x) = 0$ est $x^* = (1; 2)$.
La matrice jacobienne est :

$$Df(x) = \begin{pmatrix} x_2 & x_1 \\ -2 & 2x_2 \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad \det Df(x) = 2x_2^2 + 2x_1.$$

Dans la méthode de Newton-Raphson nous avons interruption de la suite itérative par rejet à l'infini lorsqu'en un itéré x^k , la matrice jacobienne $Df(x^k)$ est singulière. Ceci est le cas dans cet exemple pour le point de départ $x^0 = (2; 0)$; $x^1 = (-1; 1)$ et nous avons $\det Df(x^1) = 0$.

Pour tout point de départ x^0 situé dans la région hachurée (fig. 4), on a $f_1(x) > 0$, $f_2(x) > 0$. On ne peut avoir sur cette trajectoire, $f_1(x) = 0$ que si, simultanément, $f_2(x) = 0$, ce qui est clairement impossible. La trajectoire reste dans la région hachurée et ne contient aucune solution (cette trajectoire est en fait une branche d'hyperbole entièrement située dans la région hachurée).

Figure 4

Dans le tableau II nous résumons les résultats des calculs à partir de différents points de départ. La Méthode de Newton Globale trouve la solution pour tous les points de départ sauf pour les points e et f .

TABLEAU II

Exemple 2 : $f_1(x) = x_1 x_2 - 2$, $f_2(x) = -2x_1 + x_2^2 - 2$.

x^0	$f(x^0)$	$\det Df(x^0)$	Newton-Raphson	Newton Globale	Allure du paramètre d'homotopie
$a = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -2 \\ -6 \end{pmatrix}$	4	Arrêt, jacobien nul à la deuxième itération	Trouve l'unique solution x^*
$b = \begin{pmatrix} -1,3 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -2 \\ 0,6 \end{pmatrix}$	-2,6	Pas de convergence en 40 itérations	id.
$c = \begin{pmatrix} 4 \\ 5 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 18 \\ 15 \end{pmatrix}$	58	Solution trouvée en 5 itérations	id.
$d = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -2 \\ -1 \end{pmatrix}$	2	Pas de convergence en 40 itérations	id.
$e = \begin{pmatrix} -2 \\ -2 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 2 \\ 6 \end{pmatrix}$	4	Pas de convergence en 40 itérations	Pas de solution trouvée. Le point $(x^0, 1)$ n'appartient pas à la composante qui contient la solution
$f = \begin{pmatrix} -2 \\ -1/2 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 \\ 2,25 \end{pmatrix}$	-3,5	Pas de convergence en 40 itérations	Cas analogue à e

2. OPTIMISATION AVEC CONTRAINTES

Dans cette deuxième partie nous appliquons l'algorithme numérique pour la résolution d'un système d'équations $f(x)=0$, exposé dans la première partie, au problème de la minimisation d'une fonction $J(x)$ sous des contraintes $d(x) \leq 0$. Les modifications nécessaires à apporter pour le cas où certaines inéquations seraient remplacées par des équations sont évidentes, et ne seront pas exposées ici.

En partant du système d'inégalités de Kuhn et Tucker nous considérons trois manières de ramener ce problème à la résolution d'un système d'équations non linéaires $f(x)=0$.

Parmi ces transformations l'une d'elles, la troisième, convient le mieux à notre algorithme.

2.1. Quelques transformations du problème

Considérons le problème de programmation non linéaire avec contraintes d'inégalité :

$$(PCI) \quad \left\{ \begin{array}{l} \min J(x), \quad J: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, \\ \text{sous les contraintes} \\ d(x) \leq 0, \quad d: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^p. \end{array} \right.$$

THÉOREME (Kuhn et Tucker) : Soit $x^* \in \mathbb{R}^n$ une solution de (PCI) et $I(x^*) = \{i: d_i(x^*)=0\}$ vérifiant une condition de régularité, par exemple :

$$\{d'_i(x^*): i \in I(x^*)\}$$

est un ensemble des vecteurs linéairement indépendants, alors il existe $u_i^* \in \mathbb{R}$, $i=1, \dots, p$ tels que :

$$(CKT) \quad \left\{ \begin{array}{l} J'(x^*) + \sum_{i=1}^p u_i^* d'_i(x^*) = 0, \\ u_i^* \geq 0 \\ d_i(x^*) \leq 0 \\ u_i^* d_i(x^*) = 0 \end{array} \right\} i=1, \dots, p.$$

Les conditions (CKT) peuvent être transformées en un système d'équations de différentes manières :

Première façon : En ajoutant des variables d'écart dans (CKT) :

$$(CKT1) \quad \left\{ \begin{array}{l} J'(x) + \sum_{i=1}^p u_i d'_i(x) = 0, \\ u_i - \frac{1}{2} z_i^2 = 0 \\ d_i(x) + \frac{1}{2} y_i^2 = 0 \quad i = 1, \dots, p \\ u_i d_i(x) = 0 \end{array} \right.$$

Ce système comporte $(n+3p)$ équations et $(n+3p)$ inconnues qui sont les composantes de x , u , y et z .

Deuxième façon : En ajoutant des variables d'écart dans (PCI) :

$$(CKT2) \quad \left\{ \begin{array}{l} J'(x) + \sum_{i=1}^p u_i d'_i(x) = 0, \\ d_i(x) + \frac{1}{2} y_i^2 = 0 \quad i = 1, \dots, p. \\ u_i y_i = 0 \end{array} \right.$$

Ce système a $(n+2p)$ équations et $(n+2p)$ inconnues (x, u, y) . Remarquons que les *maximums* de J sous les contraintes $d(x) \leq 0$ vérifient aussi les équations (CKT2).

Troisième façon : En ajoutant les relations de complémentarité de façon implicite :

$$(CKT3) \quad \left\{ \begin{array}{l} J'(x) + \sum_{i=1}^p \psi^+(b_i) d'_i(x) = 0, \\ d_i(x) + \psi^-(b_i) = 0, \quad i = 1, \dots, p, \end{array} \right.$$

où :

$$\psi^+(a) = (\max(0, a))^k, \quad \psi^-(a) = (\max(0, -a))^k, \quad a \in \mathbb{R},$$

k étant un entier ≥ 2 . Ce système comporte $(n+p)$ équations et $(n+p)$ inconnues.

Par ailleurs les relations entre les u_i dans (CKT) et les b_i de (CKT3) sont :

$$882 \quad u_i = \psi^+(b_i), \quad b_i = \begin{cases} u_i^{1/k} & \text{si } d_i(x) = 0, \\ -(-d_i(x))^{1/k} & \text{si } d_i(x) < 0, \end{cases}$$

ce qui permet en fin de résolution d'obtenir les valeurs des multiplicateurs u_i .

Calculons la matrice jacobienne de chaque système. Soit :

$$L_{xx}(x, u) = J''(x) + \sum_{i=1}^p u_i d_i''(x);$$

il en résulte que $L_{xx}(x, u)$ est une matrice d'ordre n pour chaque $(x, u) \in \mathbb{R}^{n+p}$.

Système (CKT1) : Soit $(x, u, y, z) \in \mathbb{R}^{n+3p}$ alors la matrice jacobienne est :

$$\begin{pmatrix} L_{xx}(x, u) & d'(x)^T & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 & \begin{matrix} -z_1 \\ \vdots \\ -z_p \end{matrix} \\ d'(x) & 0 & \begin{matrix} y_1 \\ \vdots \\ y_p \end{matrix} & 0 \\ u_1 d'_1(x) & d_1(x) & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ u_p d'_p(x) & 0 & d_p(x) & 0 \end{pmatrix}$$

où I est la matrice identité (p, p) . La matrice est non symétrique d'ordre $(n+3p)$.

Système (CKT2) : Soit $(x, u, y) \in \mathbb{R}^{n+2p}$. La matrice jacobienne est :

$$\begin{pmatrix} L_{xx}(x, u) & d'(x)^T & 0 \\ d'(x) & 0 & \begin{matrix} y_1 \\ \vdots \\ y_p \end{matrix} \\ \begin{matrix} y_1 \\ \vdots \\ y_p \end{matrix} & 0 & \begin{matrix} u_1 & 0 \\ \vdots & \vdots \\ 0 & u_p \end{matrix} \end{pmatrix}$$

La matrice jacobienne est symétrique d'ordre $(n+2p)$.

Système (CKT3) : Soit $(x, b) \in \mathbb{R}^{n+p}$. La matrice jacobienne est :

$$\left(\begin{array}{c|cccc} L_{xx}(x, b^+) & \psi^{+(1)}(b_1) d'_1(x)^T & \dots & \psi^{+(1)}(b_p) d'_p(x)^T \\ \hline d'(x) & \psi^{-(1)}(b_1) & & 0 \\ & & \ddots & \\ & 0 & & \psi^{-(1)}(b_p) \end{array} \right)$$

où $\psi^{+(1)}$ et $\psi^{-(1)}$ sont les dérivées premières de ψ^+ et ψ^- et la notation b^+ désigne le vecteur de composantes $\psi^+(b_i)$ $i = 1, \dots, p$. Plus précisément :

$$\psi^{+(1)}(a) = \begin{cases} 0 & \text{si } a \leq 0, \\ ka^{k-1} & \text{si } a \geq 0 \end{cases} \quad \psi^{-(1)}(a) = \begin{cases} -k(-a)^{k-1} & \text{si } a \leq 0, \\ 0 & \text{si } a \geq 0. \end{cases}$$

La matrice jacobienne n'est pas symétrique. Elle est d'ordre $(n+p)$.

Remarquons qu'en utilisant la relation $\psi^{+(1)}(a)\psi^{-(1)}(a) = 0$, $\forall a \in \mathbb{R}$, on diminue le nombre de calculs à faire.

Analysons le rang des matrices jacobiennes à l'optimum du problème (PCI).

Système (CKT1) : Soit $X = (x, u, y, z) \in \mathbb{R}^{n+3p}$ une solution du système (CKT1). En général nous avons :

$$\begin{aligned} y_j &= 0 & \text{pour } j \in I(x) = \{j : d_j(x) = 0\}, \\ u_j &= 0 & \text{et } z_j = 0 \text{ pour } j \in I^*(x) = \{j : d_j(x) < 0\}. \end{aligned}$$

Par conséquent la matrice jacobienne du système est de rang au plus égal à $n+3p - |I(x)| - |I^*(x)|$. Or dans la Méthode de Newton Globale, pour résoudre le système $F: \mathbb{R}^{n+3p} \rightarrow \mathbb{R}^{n+3p}$, on suppose que la matrice d'ordre $(n+3p, n+3p+1)$, $[DF(X), -F(X^0)]$, est de rang maximal $n+3p$. Ainsi on ne peut pas appliquer la Méthode de Newton Globale au système (CKT1), de sorte que ce système ne convient pas ici. Dans l'exemple numérique ci-après les points de départ choisis ne nous permettront pas d'aboutir à la solution.

Système (CKT2) : Soit $X = (x, u, y) \in \mathbb{R}^{n+2p}$ une solution du système (CKT2). On a en général :

$$\text{soit } y_j = 0 \text{ et } u_j \neq 0,$$

$$\text{soit } y_j \neq 0 \text{ et } u_j = 0.$$

Par conséquent la matrice $[DF(X), -F(X^0)]$ d'ordre $(n+2p, n+2p+1)$ peut être de rang maximal $n+2p$. Dans l'exemple numérique 3 on constate que la Méthode de Newton Globale réussit à résoudre le système (CKT2) pour la plupart des points.

Système (CKT3) : Dans le système (CKT3) à l'optimum $X=(x, b) \in \mathbb{R}^{n+p}$ du problème (PCI) on a en général :

soit $\psi^-(b_j)=0, \psi^{-(1)}(b_j)=0, \psi^+(b_j) \neq 0, \psi^{+(1)}(b_j) \neq 0$ lorsque $d_j(x)=0$;

soit $\psi^-(b_j) \neq 0, \psi^{-(1)}(b_j) \neq 0, \psi^+(b_j)=0, \psi^{+(1)}(b_j)=0$ lorsque $d_j(x) \neq 0$.

Par conséquent la matrice $[DF(X), -F(X^0)]$ d'ordre $(n+p, n+p+1)$ peut être de rang maximal $n+p$. Dans l'exemple numérique 3 nous avons trouvé la solution du système (CKT3) quel que soit le point de départ.

Les considérations précédentes, ainsi que les essais numériques effectués sur l'exemple 3, montrent que le système (CKT3) est préférable à (CKT2), qui lui même est préférable à (CKT1).

2.2. Exemple numérique

Exemple 3 : Un problème d'optimisation avec une contrainte d'inégalité. Considérons le problème :

$$(P) \quad \begin{cases} \min J(x) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2, \\ d(x) = \frac{x_1^2}{4} + x_2^2 - 1 \leq 0, \end{cases}$$

Solution :

minimum :

$$A^* = (1,666 \dots; 0,5554 \dots), \quad u_A = 0,804726,$$

maximum :

$$B^* = (-1,9797 \dots; -0,142046), \quad u_B = -8,040959.$$

Pour ce problème de minimisation les conditions de Kuhn et Tucker sont :

$$(CKT) \quad \begin{cases} J'(x) + u d'(x) = 0, \\ u \geq 0, \\ d(x) \leq 0, \\ u d(x) = 0. \end{cases}$$

D'autre part on peut associer trois systèmes d'équations non linéaires aux conditions (CKT).

Première façon : Un système à $n + 3p = 5$ équations et inconnues :

$$(CKT1) \quad \left\{ \begin{array}{l} 2(x_1 - 2) + \frac{1}{2}ux_1 = 0, \\ 2(x_2 - 1) + 2ux_2 = 0, \\ u - \frac{1}{2}z^2 = 0, \\ d(x) + \frac{1}{2}y^2 = 0, \\ ud(x) = 0. \end{array} \right.$$

Deuxième façon : Un système à $n + 2p = 4$ équations et inconnues :

$$(CKT2) \quad \left\{ \begin{array}{l} 2(x_1 - 2) + \frac{1}{2}ux_1 = 0, \\ 2(x_2 - 1) + 2ux_2 = 0, \\ d(x) + \frac{1}{2}y^2 = 0, \\ uy = 0. \end{array} \right.$$

Troisième façon : Un système à $n + p = 3$ équations et inconnues :

$$(CKT3) \quad \left\{ \begin{array}{l} 2(x_1 - 2) + \frac{1}{2}\psi^+(b)x_1 = 0, \\ 2(x_2 - 1) + 2\psi^+(b)x_2 = 0, \\ d(x) + \psi^-(b) = 0, \end{array} \right.$$

où :

$$\psi^+(b) = (\max(0, b))^k \quad \text{et} \quad \psi^-(b) = (\max(0, -b))^k, \quad k \geq 2$$

et k entier. En plus nous avons :

$$u = \psi^+(b) \quad \text{et} \quad b = \begin{cases} u^{1/k} & \text{si } d(x) = 0, \\ -(-d(x))^{1/k} & \text{si } d(x) < 0. \end{cases}$$

On remarquera que A^* est la seule solution de (P), (CKT), (CKT1), (CKT3), tandis que (CKT2) admet pour solutions A^* et B^* .

Les matrices jacobienues sont :

Première façon : Pour un $(x, u, y, z) \in \mathbb{R}^5$:

$$\begin{pmatrix} 2 + \frac{1}{2}u & 0 & \frac{1}{2}x_1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 + 2u & 2x_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -z \\ \frac{1}{2}x_1 & 2x_2 & 0 & y & 0 \\ \frac{1}{2}ux_1 & 2ux_2 & d(x) & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Deuxième façon : Pour un point $(x, u, y) \in \mathbb{R}^4$:

$$\begin{pmatrix} 2 + \frac{1}{2}u & 0 & \frac{1}{2}x_1 & 0 \\ 0 & 2 + 2u & 2x_2 & 0 \\ \frac{1}{2}x_1 & 2x_2 & 0 & y \\ 0 & 0 & y & u \end{pmatrix}.$$

Troisième façon : Pour un point $(x, b) \in \mathbb{R}^3$:

$$\begin{pmatrix} 2 + \frac{1}{2}\psi^+(b) & 0 & \frac{1}{2}x_1\psi^{+(1)}(b) \\ 0 & 2 + 2\psi^+(b) & 2x_2\psi^{+(1)}(b) \\ \frac{1}{2}x_1 & 2x_2 & \psi^{-(1)}(b) \end{pmatrix}.$$

Analysons les trois systèmes à partir de différents points de départ.

Remarquons que si (x^*, u^*, y^*, z^*) est une solution du système (CKT1) alors $y^* = 0$, c'est-à-dire $d(x^*) = 0$, et la matrice jacobienne du système est singulière.

D'autre part dans le même système (CKT1) il ne faut pas donner comme point de départ de la Méthode de Newton Globale un point (x^0, u^0, y^0, z^0) tel que $y^0 z^0 = 0$ car la matrice jacobienne est singulière dans ce cas.

Dans le système (CKT2) si le point de départ (x^0, u^0, y^0) est tel que $u^0 = 0$ et $y^0 = 0$ alors la matrice jacobienne est singulière.

Pour le système (CKT3) si le point de départ (x^0, b^0) est tel que $b^0 = 0$ alors la matrice jacobienne du système est singulière.

Système CKT1 : Considérons quelques points de départ.

Soit $y = \pm 1$ et $z = 1$:

$$b = (-2; 0; 8; y; z),$$

$$c = (0; -1; 2; y; z),$$

$$d = (0; 1; 0; y; z), \quad \det Df = 0.$$

Pour tous ces points de départ ni la Méthode de Newton Globale ni la méthode de Newton-Raphson ne trouvent la solution. L'allure du paramètre d'homotopie est donnée par la figure 5 a.

Système CKT2 : Considérons quelques points de départ :

		Solution trouvée	
		Newton Raphson	Newton Globale
$a = (2; 0; 0; y)$	$y = \pm 1$	A^*	A^*
$b = (-2; 0; 8; y)$	$y = \pm 1$	A^*	A^*
	$y = 0$	B^*	A^*
$c = (0; -1; 2; y)$	$y = \pm 1$	A^*	A^*
	$y = 0$	Pas de convergence	A^*
$d = (0; 1; 0; y)$	$y = \pm 1$	A^*	A^*
$e = (0; -1; 1; y)$	$y = \pm 1$	A^*	B^*
	$y = 0$	Pas de convergence	B^*

Pour les points $c = (0; -1; 2; 0)$ et e (pour toutes les valeurs de y) l'allure du paramètre d'homotopie est donnée par la figure 5 b. Pour tous les autres points nous avons une allure donnée par la figure 5 c.

Système CKT3 : Considérons quelques points de départ.

		Solution trouvée	
		Newton Raphson	Newton Globale
$a = (2; 0; b)$	$b = \pm 1$	A^*	A^*
$b = (-2; 0; b)$	$b = \pm 1$	A^*	A^*
$c = (0; -1; b)$	$b = -1$	A^*	A^*
	$b = 1$	Arrêt, jacobien nul à la deuxième itération	A^*
$d = (0; 1; b)$	$b = -1$	A^*	A^*
	$b = 1$	A^*	A^*

Dans tous les cas l'allure du paramètre d'homotopie est donnée par la figure 5c.

Figure 5

CONCLUSIONS

La Méthode de Newton Globale, pour la résolution des systèmes d'équations, possède des propriétés remarquables :

- (1) certitude de trouver une solution du système $f(x) = 0$ lorsque les conditions à la frontière sont vérifiées;
- (2) lorsque les conditions à la frontière ne sont pas vérifiées, probabilité accrue par rapport à des méthodes locales, telles que la méthode de Newton-Raphson ou les méthodes quasi newtoniennes, de trouver une solution et même d'en trouver plusieurs;
- (3) la trajectoire traverse sans difficulté les points tels que :

$$\text{rang } Df(x) = n-1 \quad \text{et} \quad \text{rang } [Df(x), -f(x^0)] = n.$$

La Méthode de Newton Globale est d'autre part une application directe de l'esprit de la méthode du GRG : parmi les variables à notre disposition, on en choisit n (le nombre des équations) comme variables dépendantes, sans se préoccuper de leurs significations. C'est dans le même état d'esprit qu'on résout les problèmes de commande optimale, et quelques autres (voir J. Abadie, 1978 et 1979).

Nous avons vu, sur quelques exemples, que la Méthode de Newton Globale, en conjonction avec celle du GRG, peut effectivement résoudre des problèmes lorsque les conditions à la frontière de M ne sont pas vérifiées. Cela n'est cependant pas certain (exemple 2). Si M est « petit » et contient une solution, alors la méthode redevient certaine.

Nous avons d'autre part donné trois méthodes, dont la troisième est la meilleure, permettant de résoudre, avec le même degré de généralité, les problèmes de programmation mathématique avec contraintes d'inégalités et

d'égalités, avec une probabilité accrue d'obtenir un optimum global dans M : ceci est dû au fait que la méthode peut trouver plusieurs optimums sur la même trajectoire.

En ce qui concerne la précision et la stabilité numérique de l'algorithme proposé, nous aborderons cette étude avec les idées de J. Vignes (J. Vignes, 1984) et plus particulièrement de P. Tolla (voir P. Tolla, 1983) pour la méthode du GRG, et de R. Alt (voir R. Alt, 1983) pour l'intégration numérique des systèmes d'équations différentielles.

ANNEXE 1

Dans les exemples numériques traités, la Méthode de Newton Globale, appliquée à partir d'un certain nombre de points de départ, n'a pas trouvé la solution du problème $f(x)=0$. En général ceci a lieu lorsque $H^{-1}(0)$ comporte plusieurs composantes et que le point $(x^0, 1) \in H^{-1}(0)$ appartient à une composante qui ne contient pas de solution du problème $f(x)=0$. Dans ces cas les conditions à la frontière ne sont pas vérifiées.

Analysons la condition à la frontière (5). Rappelons que :

$$H(x(t), \lambda(t)) = f(x(t)) - \lambda(t) f(x^0) = 0$$

et :

$$Df(x(t)) \dot{x}(t) - f(x^0) \dot{\lambda}(t) = 0,$$

avec la notation :

$$\dot{x} = \frac{dx(t)}{dt} \quad \text{et} \quad \dot{\lambda} = \frac{d\lambda(t)}{dt}.$$

Par conséquent si $\lambda(t) \det Df(x(t)) \neq 0$ on peut écrire :

$$(A1) \quad \dot{x} = \frac{\dot{\lambda}(t)}{\lambda(t)} Df(x(t))^{-1} f(x(t))$$

ou encore :

$$Df(x(t))^{-1} f(x(t)) = \frac{\lambda(t)}{\dot{\lambda}(t)} \dot{x}(t).$$

Soient t_e et t_s tels que $x_e = x(t_e)$ soit le point d'entrée et $x_s = x(t_s)$ soit le point de sortie de la trajectoire de l'ensemble M . Alors $\dot{x}_e = \dot{x}(t_e)$ est un vecteur dirigé vers l'intérieur de M et $\dot{x}_s = \dot{x}(t_s)$ est un vecteur dirigé vers l'extérieur.

On sait que $\lambda(t_e) = 1 > 0$, et l'on va montrer que $\lambda(t_s) < 0$. Il en résultera l'existence de t^* , $t_e < t^* < t_s$, tel que $\lambda(t^*) = 0$, d'où une solution $x(t^*)$ de $f(x) = 0$. Pour ce faire, nous allons analyser le signe de :

$$\sigma = \frac{\dot{\lambda}(t_e)}{\lambda(t_e)} \frac{\dot{\lambda}(t_s)}{\lambda(t_s)}.$$

Supposons que les conditions à la frontière (5) sont vérifiées.

Premier cas : On suppose que les directions de Newton en x_e et x_s sont en accord et que $\det Df(x_e)$ et $\det Df(x_s)$ ont même signe.

Si la direction de Newton en x_e est dirigée vers l'extérieur, alors son opposée $Df(x_e)^{-1} f(x_e)$ est dirigée vers l'intérieur. D'autre part $\dot{x}_e$ est dirigée vers l'intérieur (point d'entrée). (A1) montre que $\dot{\lambda}(t_e)/\lambda(t_e) > 0$. Les hypothèses faites entraînent que $Df(x_s)^{-1} f(x_s)$ est dirigée vers l'intérieur, tandis que $\dot{x}_s$ est dirigée vers l'extérieur (sortie). Il résulte alors de (A1) que $\dot{\lambda}(t_s)/\lambda(t_s) < 0$. Le même raisonnement s'applique si la direction de Newton en x_e est dirigée vers l'intérieur. En conclusion, on a dans ce premier cas :

$$\frac{\dot{\lambda}(t_e)}{\lambda(t_e)} < 0 \quad (\text{resp. } > 0)$$

et

$$\frac{\dot{\lambda}(t_s)}{\lambda(t_s)} > 0 \quad (\text{resp. } < 0),$$

si les directions de Newton en x_e et x_s sont dirigées vers l'intérieur de M (resp. vers l'extérieur de M). De sorte que $\sigma < 0$ dans ce premier cas.

D'autre part puisque, par hypothèse, $\det Df(x_e)$ et $\det Df(x_s)$ ont même signe, alors $\dot{\lambda}(t_e)$ et $\dot{\lambda}(t_s)$ ont même signe (voir H. B. Keller, 1978, lemme 2.10). Il en résulte que $\lambda(t_e)\lambda(t_s) < 0$, donc on peut conclure qu'il existe un t^* , $t_e < t^* < t_s$, tel que $\lambda(t^*) = 0$.

Deuxième cas : On suppose que les directions de Newton en x_e et x_s sont en désaccord et que $\det Df(x_e)$ et $\det Df(x_s)$ ont signes contraires.

Puisque $\det Df(x_e)$ et $\det Df(x_s)$ ont signes contraires alors $\dot{\lambda}(t_e)\dot{\lambda}(t_s) < 0$.

D'autre part si $-Df(x_e)^{-1} f(x_e)$ est dirigée vers l'intérieur (resp. vers l'extérieur) de M et si $-Df(x_s)^{-1} f(x_s)$ est dirigée vers l'extérieur (resp. vers l'intérieur) de M alors :

$$\frac{\dot{\lambda}(t_s)}{\lambda(t_s)} < 0 \quad (\text{resp. } > 0)$$

et

$$\frac{\dot{\lambda}(t_s)}{\lambda(t_s)} < 0 \quad (\text{resp. } > 0).$$

Par conséquent $\sigma > 0$ dans ce deuxième cas. De sorte que $\lambda(t_e) \lambda(t_s) < 0$, d'où on peut conclure qu'il existe un t^* tel que $t_e < t^* < t_s$, et $\lambda(t^*) = 0$.

D'autre part si les conditions à la frontière ne sont pas vérifiées alors on peut seulement démontrer, par le même raisonnement, que $\lambda(t_e) \lambda(t_s) > 0$ et par conséquent on ne peut conclure qu'il existe t^* tel que $\lambda(t^*) = 0$.

REMARQUE : Dans le théorème de Smale on suppose la frontière ∂M connexe, et $Df(x)$ non singulière sur ∂M . Dans le théorème de Gould et Schmidt, M est connexe, mais non nécessairement ∂M (par exemple, un anneau entre deux sphères concentriques); de plus $Df(x)$ peut être singulière sur ∂M , en des points formant un ensemble S de mesure de Lebesgue nulle sur ∂M ; il y a alors une condition aux points de $\partial M - S$ (voir l'énoncé du théorème de Gould et Schmidt).

ANNEXE 2

$(x, \lambda) \in C$ si et seulement si
 $H(x, \lambda) = 0$ et $XI \leq (x, \lambda) \leq XS$.

BIBLIOGRAPHIE

- J. ABADIE, *The GRG Method for Nonlinear Programming*, in *Design and Implementation of Optimization Software*, H. J. GREENBERG, SIJTHOFF & NOORDHOFF, éd., Alphen aan den Rijn, The Netherlands, 1978, p. 335-362.
- J. ABADIE, *Advances in Nonlinear Programming*, Proceedings of the Eighth I.F.O.R.S. International Conference on Operational Research, K. B. HALEY, éd., North-Holland, Amsterdam, 1979, p. 900-930.
- R. ALT, *Minimizing the Error Propagation in the Integration of O.D.E.*, Scientific Computing, I.M.A.C.S. Transactions, vol. 1, North Holland, Amsterdam, 1983, p. 231-235.
- A. J. COLVILLE, *A Comparative Study of Nonlinear Programming Codes*, I.B.M. Scientific Center Report n° 320-2949, 1968.
- F. J. GOULD et C. P. SCHMIDT, *An Existence Result for the Global Newton Method, in Variational Inequalities and Complementarity Problems: Theory and Applications*, J. Wiley, New York, 1980, p. 187-194.
- H. B. KELLER, *Global Homotopies and Newton Methods*, in *Numerical Analysis*, G. GOLUB, éd., Academic Press, New York, 1978, p. 73-94.
- J. MILNOR, *Topology from the Differentiable Viewpoint*, Charlottesville, University Press of Virginia, 1965.
- K. SCHITTKOWSKI, *Nonlinear Programming Codes*, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York, 1980.
- S. SMALE, *A Convergent Process of Price Adjustment and Global Newton Methods*, Journal of Mathematical Economics, vol. 3, 1976, p. 107-120.
- P. TOLLA, *Linear and Nonlinear Programming Software Validity*, Math. and Comp. in Sim., vol. XXV, 1983, p. 39-42.
- J. VIGNES, *Algorithmes numériques, Analyse et mise en œuvre*, tome II, *Équations et systèmes non linéaires*, Éditions Technip, Paris, 1980.
- J. VIGNES, *Implémentation des méthodes d'optimisation : test d'arrêt optimal, contrôle et précision de la solution*, Première partie : *Aspect méthodologique*, R.A.I.R.O., Recherche Opérationnelle, vol. 18, n° 1, 1984, p. 1-18. Deuxième partie : *Logiciel et exemple d'utilisation*, R.A.I.R.O., Recherche opérationnelle, vol. 18, n° 2, 1984, p. 103-129.