Université Claude Bernard, Lyon I
43, boulevard 11 novembre 1918
69622 Villeurbanne cedex, France

Licence Sciences & Technologies
Spécialité Mathématiques
M2AO Printemps 2010

T.P : Optimisation sans contraintes

L'objectif de ces travaux pratiques est de mettre en oeuvre des méthodes numériques pour la résolution de problèmes de minimisation sans contraintes sur deux exemples.

Résolution d'une EDO avec conditions de bords

Soit $g : [0,1] \to \mathbb{R}$ une fonction continue. On s'intéresse au problème suivant:

$$-u''(x) = g(x),\ \forall x \in]0,1[,\ \ u(0) = u(1) = 0.$$

On montre aisément qu'il existe une solution et qu'elle est unique. On souhaite calculer numériquement cette solution. Pour cela, on va utiliser la méthode des *différences finies*. Soit $x_i = ih$, $i = 0..N+1$ et $h = \frac{1}{N+1}$, une subdivision de l'intervalle $[0,1]$: on va approcher la dérivée seconde u au point $x_i, i = 1..N$ par:

$$u''(x_i) \approx \frac{u(x_{i+1}) - 2u(x_i) + u(x_{i-1})}{h^2}.$$

On obtient donc le problème discrétisé

$$-\frac{u(x_{i+1}) - 2u(x_i) + u(x_{i-1})}{h^2} \approx g(x_i),\ i = 1..N,$$

avec les conditions aux bords $u(x_0) = u(x_{N+1}) = 0$. En posant $U_i = u(x_i)$, $G_i = g(x_i)$, on s'intéresse alors à la résolution du système linéaire approché $AU = G$, où A est la matrice

$$A = \frac{-1}{h^2}\begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}.$$

Pour obtenir une bonne approximation de la solution, il faut faire tendre le pas de discrétisation vers 0 ce qui augmente la taille du système linéaire à résoudre.

1. Montrer que la matrice A est symétrique définie positive.

2. En utilisant un théorème du cours, montrer que U est solution de $AU = G$ si et seulement si U est solution du problème de minimisation *Trouver* $U \in \mathbb{R}^N$ *tel que* $J(U) = \inf_{V\in\mathbb{R}^N} J(V)$, *où* J *est définie par*

$$J(U) = \frac{1}{2}U^t AU - (G,U).\ (M)$$

3. Programmer la méthode de relaxation pour le problème de minimisation (M) et illustrer sa vitesse de convergence: on représentera $\frac{|r_{k+1}|}{|r_k|}$ où $r_k = b - A\,x_k$.
   Rappel: x_k donné, on se donne la direction de minimisation e_k, k-ième vecteur de la base canonique et on minimise $\alpha \mapsto J(x_k + \alpha e_k)$ (calculer explicitement la valeur α_k pour laquelle le minimum est atteint).

4. Programmer la méthode du gradient à pas optimal et illustrer la vitesse de convergence de la méthode.
   Rappel: x_0 donné, $r_0 = b - A\,x_0$, $\alpha_k = \dfrac{|r_k|^2}{(A\,r_k, r_k)}$, $x_{k+1} = x_k + \alpha_k\, r_k$.

5. Programmer la méthode du gradient conjugué et illustrer la vitesse de convergence de la méthode.
   Rappel: x_0 donné, $p_0 = r_0 = b - A\,x_0$, on pose $\alpha_k = \dfrac{|r_k|^2}{(A\,p_k, p_k)}$, $x_{k+1} + \alpha_k\, p_k$, $r_{k+1} = r_k - \alpha_k\, A\,p_k$, $\beta_{k+1} = \dfrac{|r_{k+1}|^2}{|r_k|^2}$ et $p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_{k+1}\, p_k$.

Exemple de la “banane” de Rosenbrock

L’objectif est de comparer différentes méthodes d’optimisation sur $J : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ définie par

$$J(x, y) = (x - 1)^2 + 10(x^2 - y)^2.$$

1. Calculer $\nabla J(x, y)$ puis $\nabla^2 J(x, y)$.

2. Cette fonction est-elle convexe ? En quels points est-elle minimale ?

3. Visualiser la fonction en 3D (fonctions *plot3d* ou *plot3d1*), puis en 2D par niveaux de gris (fonction *grayplot*). Visualiser également ses lignes de niveau (fonction *contour2d*). Qu’observez-vous ? Pourquoi J n’est-elle pas simple à minimiser ?

4. Implémenter la méthode de relaxation et l’appliquer à la fonction J en partant du point $(-1, 1)$. Afficher la trajectoire des points calculés successivement.

5. Implémenter la méthode du gradient à pas constant et l’appliquer à la fonction J en partant du point $(-1, 1)$. Afficher la trajectoire des points calculés successivement.

6. Implémenter la méthode du gradient à pas optimal et l’appliquer à la fonction J en partant du point $(-1, 1)$. Afficher la trajectoire des points calculés successivement.

7. Implémenter la méthode de Newton pour trouver les zéros de ∇J en partant du point $(-1, 1)$. Afficher la trajectoire des points calculés successivement.

8. Implémenter la méthode du gradient conjugué et l’appliquer à la fonction J en partant du point $(-1, 1)$. Afficher la trajectoire des points calculés successivement.