M1 IM/MPA : TD Optimisation et Éléments Finis

Feuille 2 : Autour des problèmes d'optimisation.

Exercice 1
Soit $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}, (x, y) \mapsto x^4 + y^4 - 2x^2 - y^2$. On considère le problème de minimisation de f sur $\mathbb{R}^2$.

1. Faire le calcul pour $(x_0, y_0) \in \mathbb{R}^2$ de $Hess(f)(x_0, y_0)$. En déduire que f n'est pas une fonction strictement convexe sur $\mathbb{R}^2$.

2. Ecrire une condition nécessaire d'optimalité reliée à ce problème. *On ne demande pas résoudre le système d'équations obtenu.*

Exercice 2
Formes et fonctionnelles quadratiques.

On se donne la fonction suivante définie sur $\mathbb{R}^2$:

$$f_1(x, y) = x^2 + xy + 2y^2 + 3y,$$

On cherche à résoudre si cela est possible le problème d'optimisation de f_1 sur $\mathbb{R}^2$.
1. Écrire et étudier le problème d'optimisation.

2. Écrire la condition nécessaire d'optimalité pour cette fonctionnelle.

3. Résoudre le problème d'optimisation de f_1 sur $\mathbb{R}^2$.

Exercice 3
Approcher un jeu de valeurs (suite).
On reprend un exercice de la Feuille 1 dont on rappelle l'énoncé.
On cherche à trouver une surface qui approche au mieux le jeu de valeurs observé suivant :

Numéro du Point	x	y	z_{obs}
1	*0*	*1*	*1.26*
2	*0.25*	*1*	*2.19*
3	*0.5*	*1*	*0.76*
4	*0.75*	*1*	*1.26*
5	*1*	*2*	*1.86*
6	*1.25*	*2*	*1.43*
7	*1.5*	*2*	*1.29*
8	*1.75*	*2*	*0.65*
9	*2*	*2*	*1.6*

Pour trouver une surface qui convienne, on commence par partir d'un a priori sur la forme de cette dernière. Ici, on considère la forme générale :

$$z = c_1x^2 + c_2y^2 + c_3xy, \tag{1}$$

avec $(c_1, c_2, c_3) \in \mathbb{R}^3$.

Le but est maintenant de déterminer les valeurs optimales des paramètres c_1, c_2, c_3 *pour minimiser la somme des carrés des erreurs entre les valeurs de* z *observées et les valeurs de* z *calculées en utilisant la forme générale.*

1. Rappeler le problème d'optimisation complet. On pourra noter $z_{obs,i}$ la i-ème observation et (x_i, y_i) les points qui y sont associés pour $i \in \{1, ..., 9\}$.

2. Écrire la condition nécessaire d'optimalité pour ce problème.

Exercice 4

Cas d'une fonctionnelle quadratique dans la méthode de gradient à pas variable.

Soit $d \in \mathbb{N}^*$. On note $\langle \cdot, \cdot \rangle$ le produit scalaire canonique euclidien sur $\mathbb{R}^d$ et $\| \cdot \|$ la norme vectorielle associée. On considère la fonctionnelle

$$\mathcal{J} : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}, v \mapsto \frac{1}{2}\langle Av, v\rangle + \langle b, v\rangle,$$

avec A une matrice symétrique définie positive et b un vecteur de $\mathbb{R}^d$. On note $u^* \in \mathbb{R}^d$, la solution du système $Au^* = -b$. On note également $0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq ... \leq \lambda_d$ les d valeurs propres de A rangées par ordre croissant.

1. Calculer, s'ils existent, le gradient et la matrice Hessienne de $\mathcal{J}$.

2. La fonction $\mathcal{J}$ est-elle convexe ?

On considère alors le problème de minimisation suivant : $\min_{v \in \mathbb{R}^d} \mathcal{J}(v)$.

3. (a) Donner la(les) variable(s) d'optimisation et la fonction coût du problème.

(b) Est-ce un problème d'optimisation en dimension finie ? quadratique ? avec ou sans contraintes ?

4. Montrer que si $\bar{u}$ est solution du problème de minimisation, alors $A\bar{u} = -b$ et en déduire que $\bar{u} = u^*$.

5. Donner l'algorithme de gradient à pas constant. *On notera* $(u_k)_{k \in \mathbb{N}}$ *la suite ainsi construite et* $\rho > 0$ *le pas (constant).*

6. Énoncer le théorème de convergence de la méthode de gradient à pas variable vu en cours.

7. Ce théorème s'applique-t-il ici ?

8. Montrer que

$$\|u_{k+1} - u^*\|^2 \leq (1 - 2\rho\lambda_1 + \rho^2\lambda_d^2)\|u_k - u^*\|^2$$

9. Préciser alors les estimations du théorème de convergence à l'aide des valeurs propres de A.

10. On reprend la démonstration de convergence de la méthode pour préciser encore les estimations trouvées.

a) Montrer que

$$\|u_{k+1} - u^*\| \leq |||(Id - \rho A)||| \|u_k - u^*\|. \tag{2}$$

b) On note ensuite r le rayon spectral matriciel. En utilisant que $|||(Id - \rho A)||| = r(Id - \rho A)$, en déduire une majoration de l'erreur commise à l'itération k en fonction des valeurs propres de A.

Éléments de correction

Solution exercice 1

1. On a $f \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^2)$ et pour tout $(x_0, y_0) \in \mathbb{R}^2$, $\nabla f(x_0, y_0) = \begin{pmatrix} 4x_0^3 - 4x_0 \\ 4y_0^3 - 2y_0 \end{pmatrix}$ et $Hessf(x_0, y_0) = \begin{pmatrix} 12x_0^2 - 4 & 0 \\ 0 & 12y_0^2 - 2 \end{pmatrix}$. On voit donc que pour $(x_0, y_0) \in \mathbb{R}^2$, les valeurs propres de la matrice Hessiennes peuvent être négatives si par exemple $x_0^2 \leq \frac{1}{3}$. Or les valeurs propres de la matrice Hessienne d'une application convexe sont positives et celles de la matrice Hessienne d'une fonction strictement convexe, sont strictement positives. On voit donc ici qu'il existe des points du plan pour lesquels cela n'est pas vérifié. La fonction n'est donc pas convexe sur $\mathbb{R}^2$.

2. La condition nécessaire d'optimalité s'écrit ici : si $(x_0, y_0) \in \mathbb{R}^2$ est un point de minimum de f sur $\mathbb{R}^2$, alors $\nabla f(x_0, y_0) = \begin{pmatrix} 4x_0^3 - 4x_0 \\ 4y_0^3 - 2y_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$

Solution exercice 2

1. La fonction f_1 est une fonctionnelle quadratique mais pas une forme quadratique et on a $f_1 : x \in \mathbb{R}^2 \mapsto \frac{1}{2}\langle Au, u\rangle - \langle b_1, u\rangle$ avec $A_1 = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 4 \end{pmatrix}$ et $b_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ -3 \end{pmatrix}$.

On trouve que A_1 est symétrique définie positive. Comme f_1 est $\mathcal{C}^2(\mathbb{R}^2)$ et $Hess(f_1)(u) = A$ pour tout $u \in \mathbb{R}^d$, on en déduit que $\forall (u, w) \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2$ $\langle Hess(f_1)(u)w, w\rangle \geq \lambda_1 \|w\|^2$, avec λ_1 la plus petite valeur propre de A_1 (ici A_1 est définie positive, donc $\lambda_1 > 0.$). Et donc f_1 est λ_1-convexe.

Comme f_1 est α-convexe avec $\alpha > 0$ sur $\mathbb{R}^2$ ($\alpha = \lambda_1$), un résultat du cours nous assure que f_1 est en particulier "infinie à l'infini". De plus $\mathbb{R}^2$ est un ensemble fermé non vide et f_1 est continue sur $\mathbb{R}^2$; un autre théorème du cours nous assure donc qu'il existe au moins une solution au problème d'optimisation donné en 1. De plus, comme f_1 est α-convexe sur $\mathbb{R}^2$ avec $\alpha > 0$, on en déduit qu'il existe au plus un point de minimum au problème d'optimisation donné. En combinant ces deux résultats, on en déduit qu'il existe un unique point de minimum au problème d'optimisation donné.

2. La condition nécessaire d'optimalité associée au problème d'optimisation, s'écrit ici "Trouver $u^* \in \mathbb{R}^2$, tel que $f_1(u^*) = \min_{u \in \mathbb{R}^2} f_1(u)$", est : Si $u^* \in \mathbb{R}^2$ est un point de minimum local de f_1 sur

$\mathbb{R}^2$, alors :

$$A_1 u^* = b_1.\text{"} \tag{3}$$

Comme f_1 est convexe, cette condition nécessaire devient aussi une condition suffisante d'optimalité.

3. Par les question qui précèdent, on a que le problème d'optimisation admet un unique point de minimum et celui-ci est déterminé par la solution du système linéaire $A_1 u^* = b_1$. On trouve $u^* = \begin{pmatrix} \frac{3}{7} \\ -\frac{6}{7} \end{pmatrix}$

Solution exercice 3

1. On a un jeu de 9 observations $z_{obs,i}$, $i \in \{1, .., 9\}$ associées chacunes à un couple de valeurs (x_i, y_i) pour $i \in \{1, .., 9\}$. Pour chacune de ces 9 observations, on peut calculer la valeur que prédit la forme générale, i.e. pour chaque $i \in \{1, .., 9\}$, on calcule $z_i = c_1 x_i^2 + c_2 y_i^2 + c_3 x_i y_i$. L'erreur entre les valeurs de z observées ($z_{obs,i}$) et les valeurs de z calculées (z_i) sont données par $z_{obs,i} - z_i$. On nous dit que l'on cherche à minimiser la somme des carrés des erreurs. La fonction objectif est donc donnée par :

$$\mathcal{J} : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}, (c_1, c_2, c_3) \mapsto \mathcal{J}(c_1, c_2, c_3) = \sum_{i=1}^{9} (z_{obs,i} - (c_1 x_i^2 + c_2 y_i^2 + c_3 x_i y_i))^2.$$

Le problème de minimisation s'écrit donc :

$$\min_{(c_1, c_2, c_3) \in \mathbb{R}^3} \mathcal{J}(c_1, c_2, c_3).$$

En posant $A = \begin{pmatrix} x_1^2 & y_1^2 & x_1 y_1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ x_i^2 & y_i^2 & x_i y_i \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ x_9^2 & y_9^2 & x_9 y_9 \end{pmatrix} \in M_{5,3}(\mathbb{R})$, on écrit $\mathcal{J}(\mathbf{c}) = \|\mathbf{z_{obs}} - A\mathbf{c}\|^2$, pour tout $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^3$. Cela donne

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(\mathbf{c}) &= \|\mathbf{z_{obs}}\|^2 + \|A\mathbf{c}\|^2 - 2\langle \mathbf{z_{obs}}, A\mathbf{c} \rangle && (4) \\ &= \|\mathbf{z_{obs}}\|^2 + \langle A\mathbf{c}, A\mathbf{c} \rangle - 2\langle \mathbf{z_{obs}}, A\mathbf{c} \rangle && (5) \\ &= \|\mathbf{z_{obs}}\|^2 + \langle {}^t AA\mathbf{c}, \mathbf{c} \rangle - 2\langle {}^t A\mathbf{z_{obs}}, \mathbf{c} \rangle && (6) \\ & && (7) \end{aligned}$$

On reconnaît donc une fonctionnelle quadratique la matrice de la partie quadratique

$$\mathcal{J}(\mathbf{c}) = \underbrace{\frac{1}{2}\langle B\mathbf{c}, \mathbf{c} \rangle}_{\text{partie quadratique}} \underbrace{-\langle g, \mathbf{c} \rangle}_{\text{partie linéaire}} + \underbrace{l}_{\text{partie constante}} \tag{8}$$

étant $B = 2{}^t AA$, $g = 2{}^t A\mathbf{z_{obs}}$ et $l = \|\mathbf{z_{obs}}\|^2$. La condition nécessaire d'optimalité s'écrit alors : Si $c^* \in \mathbb{R}^3$ est un point de minimum de $\mathcal{J}$ sur $\mathbb{R}^3$, alors

$$Bc^* = g$$

Solution exercice 4

1. cf autres exercices.

2. La Hessienne de $\mathcal{J}$ en tout point $u \in \mathbb{R}^d$ est donnée par A qui est par hypothèse symétrique définie positive. Un résultat d'algèbre linéaire nous assure que pour tout $w \in \mathbb{R}^d$, $\langle Aw, w\rangle \geq \lambda_1 \|w\|^2$, on en déduit donc que $\mathcal{J}$ est λ_1-convexe avec $\lambda_1 > 0$, donc convexe.

3. (a) La variable d'optimisation est $u \in \mathbb{R}^d$, la fonction coût est $\mathcal{J}$.
(b) C'est un problème d'optimisation en dimension finie, non linéaire, quadratique et sans contraintes.

4. On sait que si $\bar{u} \in \mathbb{R}^d$ est solution du problème de minimisation (qui est posé sur $\mathbb{R}^d$ qui est ouvert), comme $\mathcal{J} \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}^d)$, on a $\nabla\mathcal{J}(\bar{u}) = 0$. Et donc comme $\nabla\mathcal{J}(\bar{u}) = A\bar{u} + b$, on a le résultat puisque u^* est la solution du système linéaire $Au^* = -b$.

5. cf. cours.

6. cf. cours.

7. La fonction $\mathcal{J}$ est $\mathcal{C}^2(\mathbb{R}^d)$, elle est λ_1-convexe avec $\lambda_1 > 0$, de plus pour tout $(u_1, u_2) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$,

$$\|\nabla\mathcal{J}(u_1) - \nabla\mathcal{J}(u_2)\| = \|A(u_1 - u_2)\|. \tag{9}$$

De plus, on a

$$\|A(u_1 - u_2)\| \leq \lambda_d \|u_1 - u_2\|. \tag{10}$$

Et donc le gradient de $\mathcal{J}$ est Lipschitzien. On peut donc appliquer le théorème II.2.3 du cours donnant la convergence de l'algorithme de gradient à pas constant.