Applications de méthodes d'optimisation à la résolution des EDP

Sujet proposé par Nicolas Augier. Contact mail : nicolas.augier@ens-cachan.fr .

31 octobre 2016

Le but de ce sujet est de présenter plusieurs méthodes d'optimisation de fonctionnelles intervenant dans l'étude des équations aux dérivées partielles. Dans une première partie, nous présenterons diverses méthodes d'optimisation. Dans une seconde partie, nous appliquerons ces méthodes à l'équation de convection-diffusion puis à l'équation de la chaleur non linéaire.

I. Méthodes de gradient

Soit $J : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ une fonctionnelle C^1. Dans cette partie, on va analyser la convergence des méthodes de gradient :

$$u_{k+1} = u_k - \rho_k \nabla J(u_k)$$

avec $\rho_k \geq 0,\ \forall k \in \mathbb{N}$.

I.1. Gradient à pas constant

La fonction de Rosenbrock fait partie des cas tests modèles de validation des méthodes d'optimisation numérique. Elle est définie par

$$J(u_1, u_2) = (u_1 - 1)^2 + 100(u_1^2 - u_2)^2.$$

La recherche du minimum est rendue relativement difficile en raison d'une vallée très aplatie.

I.1.1. Tracer les lignes de niveau de J dans le rectangle $(u_1, u_2) \in [-1.5, 1.5] \times [0.5, 1.5]$ (utiliser contourf par exemple).

I.1.2. Appliquer la méthode de gradient à pas constant $u_{k+1} = u_k - \rho \nabla J(u_k)$ On considérera les valeurs numériques $u_0 = (1, 0)$ et $\rho = 0.002$. Tracer les itérés de la méthode de gradient. Afficher le nombre d'itérations qu'il faut pour atteindre le critère d'arrêt suivant $J(u_{k+1}) < 10^{-3}$.

I.1.3. Recommencer avec $\rho = 0.0045$ puis avec $\rho = 0.01$. Que se passe-t-il ?

I.2. Gradient optimal

La méthode de gradient optimal correspond à $\rho_k = \text{argmin}_{\rho \geq 0} J(u_k - \rho \nabla J(u_k))$.

Fonctionnelle quadratique : On considère le problème d'inversion matricielle i.e. résolution de $Ax = b$ où A est une matrice **symétrique définie positive.** Inverser A revient à minimiser la fonctionnelle $J(u) = \frac{1}{2} \langle Au, u \rangle - \langle b, u \rangle$ pour $u \in \mathbb{R}^n$.

I.2.1. Vérifier que

$$\rho_k = \frac{\langle r_k, r_k \rangle}{\langle Ar_k, r_k \rangle} \text{ avec } r_k = \nabla J(u_k).$$

I.2.2. Mettre en oeuvre la méthode de gradient à pas optimal pour $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix}$ et $B = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ pour différentes conditions initiales en utilisant le critère d'arrêt :

$$\frac{\|r_k\|}{\|r_0\|} \leq 10^{-2}.$$

I.2.3. Tracer en échelle semi logarithmique $\frac{\|r_k\|}{\|r_0\|}$ en fonction de k.

Fonctionnelle non quadratique : Quand la fonctionnelle n'est plus quadratique, la recherche de

$$\rho_k = \text{argmin}_{\rho \geq 0} J(u_k - \rho \nabla J(u_k))$$

est un problème plus difficile. En pratique au lieu d'aller chercher exactement le minimum, on va chercher un candidat qui permet un niveau de descente acceptable.

La recherche par dichotomie consiste à prendre initialement ρ grand et tant que $J(u_k - \rho \nabla J(u_k)) > J(u_k)$, on pose $\rho = \frac{\rho}{2}$ et on recommence le procédé au maximum 20 fois.

I.2.1. Mettre en oeuvre le procédé de dichotomie pour la fonction de Rosenbrock.

II. Méthodes newtoniennes

II.1. Méthode de Newton

Pour des problèmes d'optimisation plus compliqués que l'inversion matricielle, on met en place d'autres méthodes. Supposons que $J : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ est C^3.

Soit $F = \nabla J \in C^2(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^m)$.

Trouver un point critique de J revient à trouver un zéro de F.

L'algorithme de Newton est défini de façon générale pour $F \in C^2(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^n)$ par :

$$u_{k+1} = u_k - (DF(u_k))^{-1} F(u_k), \forall k \geq 0.$$

Theorem II..1. *Soit* $F \in C^2(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^m)$*. Soit* u *tel que* $F(u) = 0$ *et* $DF(u)$ *inversible. Il existe un réel* $\epsilon > 0$ *tel que si* $\|u - u_0\| \leq \epsilon$*, alors :*

$$\|u_{k+1} - u\| \leq C\|u_k - u\|^2.$$

L'algorithme converge localement de façon quadratique. Cependant, la hessienne de J est coûteuse à calculer et à inverser, on va essayer de l'approximer.

II.2. Méthode de Gauss-Newton

Dans le cas du problème des moindres carrés on arrive à obtenir une approximation convenable de la Hessienne de J.

Dans ce cas on veut minimiser la fonctionnelle

$$J(u) = \frac{1}{2}\|f(u)\|^2$$

avec $f \in C^3(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^m)$.

On note : $f = \begin{pmatrix} f_1 \\ . \\ . \\ f_m \end{pmatrix}$. On a : $\nabla J(u) = Df^T(u)f(u)$

et $\nabla^2 J(u) = Df^T(u)Df(u) + Q(u)$ où $Q(u) = \sum_{i=1}^m f_i(u)\nabla^2 f_i(u)$.

On décide de négliger $Q(u)$. On applique alors l'algorithme de Newton avec cette matrice approchée.

Application : Ajustement des paramètres d'une famille de fonctions à des observations (y_i).

Soit la fonctionnelle à minimiser :

$$J(\beta) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m} \|y_i - g(x_i, \beta)\|^2$$

où g est une superposition de Gaussiennes :

$$g(x,\beta) = \sum_{j=1}^{K} \alpha_j \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{(x-x_j^0)^2}{\sigma_j^2}\right)$$

$\beta = (\alpha_1, ..., \alpha_K, \sigma_1, ..., \sigma_K, x_1^0, ..., x_K^0) \in \mathbb{R}^{3K}$.

On veut ajuster les $\alpha_j, \sigma_j, x_j^0$.

II.2.1. Ecrire le processus itératif.

II.2.2. Programmer la méthode de Gauss Newton.

On considère les valeurs suivantes :

x_i	1	2	3	4	5	6	7	8
y_i	0.127	0.2	0.3	0.25	0.32	0.5	0.7	0.9

On choisira K=2. On initialisera par $\alpha_1 = \alpha_2 = 1,\ \sigma_1 = \sigma_2 = 1,\ x_1^0 = 3$ et $x_2^0 = 7$. Tracer le nuage de points et l'approximation au cours des itérations de la boucle d'optimisation.

II.2.3. Reprendre la question 1 avec $\alpha_1 = \alpha_2 = 1,\ \sigma_1 = \sigma_2 = 1,\ x_1^0 = 3$ et $x_2^0 = 6$. Mettre en évidence la divergence. On parle alors de non-convergence locale contrairement à ce qu'il se passe en appliquant la méthode de Newton classique.

III. Application à l'équation de convection-diffusion.

On étudie l'équation de convection-diffusion en dimension 1 suivante :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} - b\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0,\ (x,t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+$$

$$u(x,0) = u_0(x)$$

u_0 est une fonction indéfiniment dérivable bornée sur $\mathbb{R}$, $a \in \mathbb{R}$ et $b \in \mathbb{R}_*^+$.

III.1. Différents schémas d'approximation

On commence par restreindre $\mathbb{R}$ à $\Omega = [-10, 10]$.

On discrétise l'espace et le temps avec des pas respectifs Δx et Δt.

On pose $x_i = i\Delta x$, $i \in [-i_{max}, i_{max}]$ et $t_n = n\Delta t$, $n \in \mathbb{N}$.

u_i^n est une valeur approchée de $u(x_i, t_n)$.

On considère les conditions au bord de Dirichlet : $u^n_{-i_{max}-1} = u^n_{i_{max}+1} = 0$.

On notera $U^n = \begin{pmatrix} u^n_{-i_{max}} \\ . \\ u^n_{i_{max}} \end{pmatrix}$.

On étudie les 2 schémas suivants :

(1) $\frac{u_i^{n+1}-u_i^n}{\Delta t} + a\frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x} - b\frac{u_{i+1}^n + u_{i-1}^n - 2u_i^n}{\Delta x^2} = 0$

(2) $\frac{u_i^{n+1}-u_i^n}{\Delta t} + a\frac{u_{i+1}^{n+1} - u_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x} - b\frac{u_{i+1}^{n+1} + u_{i-1}^{n+1} - 2u_i^{n+1}}{\Delta x^2} = 0$

Pour chacun des schémas :

III.1.1. Etudier sa consistance en précisant son ordre en temps et en espace.

III.1.2. Etudier sa stabilité en norme l^∞ et l^2. Illustrer les éventuelles conditions CFL.

III.2. Schéma implicite

On considère le schéma numéro (2) :

$$\frac{u_i^{n+1}-u_i^n}{\Delta t} + a\frac{u_{i+1}^{n+1} - u_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x} - b\frac{u_{i+1}^{n+1} + u_{i-1}^{n+1} - 2u_i^{n+1}}{\Delta x^2} = 0.$$

III.2.1. Ecrire le schéma sous la forme $U^n = MU^{n+1}$ avec M matrice à préciser.

III.2.2. Montrer que la matrice M est inversible.

III.2.3. Calculer et représenter la solution approchée de l'équation de convection diffusion par le schéma implicite avec la méthode d'inversion matricielle du gradient optimal. On prendra pour condition initiale : $u_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}x^2}$ et $a = b = 1$.

Indication : Dans ce cas la matrice M n'est pas symétrique. On ne peut donc pas appliquer directement la méthode du gradient optimal. Comme M est inversible, $Mx = y$ équivaut à $M^T Mx = M^T y$. On appliquera donc la méthode du gradient à $M^T M$.

En général, l'inversion exacte d'une matrice est très coûteuse, on va mettre en place des méthodes itératives d'inversion.

IV. Application à l'équation de la chaleur non linéaire

On considère l'équation de la chaleur non linéaire :

$$\frac{\partial u}{\partial t} - b\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + u^4 = 0$$

sur $\Omega = [-10, 10]$ avec conditions au bord de Dirichlet.

$$u(x, 0) = u_0(x)$$

u_0 est une fonction indéfiniment dérivable bornée sur $\mathbb{R}$, $a \in \mathbb{R}$ et $b \in \mathbb{R}_*^+$.

IV.1. Schéma implicite linéaire.

On veut construire une solution approchée grâce au schéma implicite linéarisé suivant :

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} - b\frac{u_{i+1}^{n+1} + u_{i-1}^{n+1} - 2u_i^{n+1}}{\Delta x^2} + u_i^{n+1}(u_i^n)^3 = 0,\ \forall i \in [-i_{max}, i_{max}]$$

avec conditions au bord de Dirichlet :$u^n_{-i_{max}-1} = u^n_{i_{max}+1} = 0$.

IV.1.1. Ecrire U^n sous la forme

$$U^n = \left(A + \Delta t \mathrm{diag}((u^n_{-i_{max}})^3, ..., (u^n_{i_{max}})^3)\right) U^{n+1}$$

où $\mathrm{diag}((u^n_{-i_{max})^3}, ..., (u^n_{i_{max}})^3)$ est la matrice diagonale de coefficients $(u_i^n)^3$ pour $i \in [-i_{max}, i_{max}]$ et A une matrice tridiagonale à préciser.

IV.1.2. Calculer et représenter la solution approchée de l'équation de la chaleur non linéaire par le schéma implicite linéaire en utilisant la méthode d'inversion matricielle du gradient optimal. On prendra pour condition initiale : $u_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}x^2}$, $b = 1$ et pour pas d'espace et de temps $\Delta x = 0.1$ et $\Delta t << \Delta x$.

IV.2. Schéma pour l'équation stationnaire

On veut construire une solution approchée de l'équation de la chaleur en régime stationnaire :

$$-b\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + u^4 = Q(x)$$

sur $\Omega = [-10, 10]$ avec conditions au bord de Dirichlet où Q est une fonction régulière.
On considère le schéma explicite centré suivant :

$$-b\frac{u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i}{\Delta x^2} + (u_i)^4 = Q_i, \ \forall i \in [-i_{max}, i_{max}]$$

où $Q_i = Q(x_i)$ valeur de Q au point de discrétisation en espace.
Les conditions au bord sont de Dirichlet :$u_{-i_{max}-1} = u_{i_{max}+1} = 0$.

IV.2.1. Pour $n > 0$ fixé, écrire ce schéma sous la forme d'une résolution

$$G(u_{-i_{max}}, ..., u_{i_{max}}) = 0$$

où $G : \mathbb{R}^{2i_{max}+1} \longrightarrow \mathbb{R}^{2i_{max}+1}$ est C^2.

IV.2.2. Calculer la solution de l'équation précédente en utilisant la méthode de Newton (On inversera DG avec la méthode de gradient optimal), donner l'allure des solutions. On prendra pour Q la fonction constante égale à 1, $b = 1$ et pour pas d'espace $\Delta x = 0.01$.