propre grapho AO101

Une synthèse des résultats est à rendre avant le 19 mars 2018.
Les codes sont à envoyer par mail au maître de conférence de chaque groupe.

Pour ce TP, vous pouvez utiliser le fichier modèle disponible dans :
`http://uma.ensta-paristech.fr/files/zidani/AO101/PC5/`

Considérons un problème *d'obstacle* consistant à trouver une fonction $u : [0,1] \to \mathbf{R}$ telle que

$$-u''(x) \geq 1 \quad \forall x \in (0,1), \tag{1a}$$

$$u(x) \geq g(x) \quad \forall x \in (0,1), \tag{1b}$$

$$(-u''(x) - 1)(u(x) - g(x)) = 0 \quad \forall x \in (0,1), \tag{1c}$$

avec les conditions aux bords $u(0) = u(1) = 0$, et où $g(\cdot)$ est une fonction donnée.

Le problème (1) apparaît dans de nombreuses applications en physique, et la fonction u peut s'interpréter comme la hauteur d'une membrane en équilibre, fixée en ses extremités et soumise à une contrainte d'obstacle. L'équation (1a) traduit une concavité minimale de la fonction u. La deuxième équation (1b) représente une contrainte d'obstacle qui exprime que la fonction u est au-dessus de la fonction $g(\cdot)$, et la troisième équation (1c) traduit le fait qu'on a au moins égalité dans une des deux équations précédentes : soit on résoud $-u''(x) = 1$ (équation de type Laplace), soit $u(x) = g(x)$ (ce qui veut dire que la fonction u est sur l'obstacle).

On discrétise ce problème en introduisant un maillage uniforme sur l'intervalle $[0,1]$ par $x_j = jh$, $j = 0, \ldots, N+1$ avec $N \geq 1$ entier et $h = \frac{1}{N+1}$. On cherche donc des valeurs U_j (pour $j = 1, \ldots, N$), où U_j représente une approximation de la valeur $u(x_j)$ de la fonction u en le point x_j. Ainsi, on obtient une approximation du problème (1) :

$$\begin{cases} \dfrac{-U_{j-1} + 2U_j - U_{j+1}}{h^2} \geq 1 \qquad \forall j = 1, \ldots, N \\ U_j \geq g_j \qquad \forall j = 1, \ldots, N \\ (\dfrac{-U_{j-1} + 2U_j - U_{j+1}}{h^2} - 1)(U_j - G_j) = 0 \qquad \forall j = 1, \ldots, N \end{cases} \tag{2}$$

où on a posé $U_0 = U_{N+1} = 0$ ainsi que $G_j = g(x_j)$. (On admet que $\dfrac{-U_{j-1} + 2U_j - U_{j+1}}{h^2}$ est l'approximation par différences finies de $-u''(x_j)$.)

Problème de minimisation associé. On considère la matrice $A \in M_N(\mathbf{R})$ et les vecteurs b et G de $\mathbf{R}^N$ définis par :

$$A = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & -1 & 2 & -1 \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}, \qquad b = (1, \ldots, 1)^T \quad \text{et} \quad G = (G_1, \ldots, G_N)^T.$$

Dans toute la suite, pour $x, y \in \mathbf{R}^N$, la notation $x \geq y$ signifie que $x_i \geq y_i$ pour chaque $i = 1, \cdots, N$.

Soit $U = (U_1, \ldots, U_N)^T \in \mathbf{R}^N$. On a l'équivalence suivante :

$$U \text{ est solution de (2)} \iff U \text{ est solution de } \min_{v \in K} J(v),$$

avec $J(v) := \frac{1}{2}(Av, v) - (b, v)$ et $K := \{v \in \mathbf{R}^N,\ v \geq G\}$.

Pour les applications numériques on prendra la fonction

$$g(x) = \max(0, 1 - 100(x - 0.7)^2).$$

I. Algorithme du Gradient Projeté (GP) Afin d'approcher numériquement la solution de $\min_{v \in K} J(v)$, on considère la méthode itérative :

$$\text{(GP)} \left| \begin{array}{l} \text{- On choisit } U^0 \text{ un vecteur de } \mathbf{R}^N \text{ et un pas } \rho > 0. \\ \text{- Si } \left[\ k \geq I_{\max} \text{ ou } \|U^k - U^{k-1}\| < \eta\ \right] \Rightarrow \texttt{STOP}, \\ \text{- Sinon, on calcule le nouveau itéré : } \quad U^{k+1} = \Pi_K\left(U^k - \rho \nabla J(U^k)\right). \end{array} \right.$$

où Π_K désigne la projection sur le convexe K.

Travail à faire pendant la séance de TP : Implémentation numérique

1. Programmer l'algorithme (GP) en adaptant votre programme de gradient à pas fixe (GPF). On pourra utiliser que $\Pi_K(v) = (\max(v_i, g_i))$.
2. (a) Tester votre programme avec $N = 10$, un nombre maximal d'itération $I_{\max} = 1000$, et une tolérance $\eta = 10^{-5}$.
   (b) Choisir le pas ρ comme $\rho_{opt} = 2/(\lambda_1 + \lambda_N)$ (On rappelle que les valeurs propres de A sont $\lambda_k(A) = 4/h^2 sin^2(k\pi h/2)$ pour $k = 1, \cdots, N$).
   (c) Afficher toutes les 10 itérations : le nombre d'itération k, l'estimateur d'erreur $\|U^k - U^{k-1}\|_2$ et la norme $\|\nabla J(U^k)\|$.
   (d) Afficher le graphe de U^k et de G (c'est-à-dire le graphe des (U_i^k) en fonction des (x_i), et le graphe des (G_i) en fonction des (x_i)).

Analyse de l'algorithme - Résultats à rédiger dans le rapport à rendre

1. Faire tourner le programme pour $N = 100$ avec $I_{\max} = 10000$. Afficher toutes les 1000 itérations : le nombre d'itération k, l'estimateur d'erreur $\|U^k - U^{k-1}\|_2$ et la norme $\|\nabla J(U^k)\|$.
2. Noter le temps de calcul et le nombre d'itérations k nécessaires pour obtenir $\|U^k - U^{k-1}\|_2 \leq 10^{-6}$.
3. Afficher le graphe de U^k et de G (c'est-à-dire le graphe des (U_i^k) en fonction des (x_i), et le graphe des (G_i) en fonction des (x_i)).
4. On désire calculer une approximation U^k de U avec une précision 10^{-4}.

(a) Montrer d'abord que pour tout $k \geq 1$, on a :

$$\|U^{k+1} - U^k\|_2 \leq \gamma \|U^k - U^{k-1}\|_2,$$

avec $\gamma := \|I - \rho A\|_2 = \dfrac{\lambda_N - \lambda_1}{\lambda_1 + \lambda_N}$.

(b) Vérifier que $\sum_{j \geq k} (U^j - U^{j+1}) = U^k - U$. En déduire alors que

$$\|U^k - U\|_2 \leq \frac{\gamma}{1-\gamma} \|U^k - U^{k-1}\|_2.$$

(c) Quelle tolérance η doit-on choisir pour assurer que $\|U^k - U\|_2 \leq 10^{-4}$?

5. Vérifier numériquement qu'on a bien les inégalités

$$\|U^k - U\|_2 \leq \frac{\gamma}{1-\gamma} \|U^k - U^{k-1}\|_2 \leq 10^{-4}.$$

(*Ind. La solution U est donnée dans le fichier* `pc5I_100.dat` *(pour $N = 100$) et dans le fichier* `pc5I_1000.dat` *(pour $N = 1000$).*)

6. Quelle est votre conclusion pour ce test numérique ?

II. Algorithme de UZAWA. On peut mettre l'ensemble des contraintes sous la forme

$$K = \{x \in \mathbf{R}^N,\ Cx \leq f\},$$

où C est une matrice $p \times N$ (p est à préciser) et f est un vecteur à préciser. On considère alors l'algorithme suivant :

(UZAWA)

(1) On choisir λ^0 dans $\mathbf{R}^p$ et $\rho > 0$ un pas fixe.
Calculer U^0 tel que $AU^0 + C^T \lambda^0 = b$.

(2) Tant que $\|\max(0, CU^k - f)\| > \eta$ ou $\|U^k - U^{k-1}\| > \epsilon$, calculer
$\lambda^{k+1} = \max(\lambda^k + \rho(CU^k - f), 0)$,
et U^{k+1} t.q. $AU^{k+1} + C^T \lambda^{k+1} = b$.

Travail pendant la séance de TP : Implémentation et premiers tests numériques

1. Programmer l'algorithme d'UZAWA. Utiliser l'algorithme du Gradient Conjugué (GC) pour le calcul de U^{k+1}.
2. Comparer l'efficacité numérique (erreur d'approximation et vitesse de convergence) des algorithmes GP et UZAWA pour $N = 10$, $N = 100$ et ensuite $N = 1000$.

$Au = b$

$J(x) = A\{(x, x)\} - (b, x)$

Résultats à rédiger dans le rapport à rendre On suppose maintenant que la fonction u recherchée doit satisfaire

$$\int_0^1 u(x)dx \geq L,$$

où $L > 0$ est une constante. Cette contrainte est alors approchée par

$$h \sum_{i=1}^{i=N} U_i \geq L. \qquad (3)$$

Le problème de minimisation est maintenant :

$$\min_{v \in \widetilde{K}} J(v), \qquad \text{avec } \widetilde{K} := \{v \in \mathbf{R}^N, v \geq G \text{ et } h\sum_{i=1}^{N} v_i \geq L\}.$$

Dans les tests numériques, on prendra $L = 0.5$ (vous pouvez aussi tester avec d'autres valeurs de votre choix).

1. Mettre l'ensemble des contraintes $\widetilde{K}$ sous la forme :

   $$\widetilde{K} = \{x \in \mathbf{R}^N,\ \widetilde{C}x \leq \widetilde{f}\},$$

   où $\widetilde{C}$ est une matrice $(N+1) \times N$ et $f \in \mathbf{R}^{N+1}$ est un vecteur à préciser.

2. Faire tourner le programme pour $N = 100$ avec $I_{\max} = 10000$. Afficher toutes les 1000 itérations : Le numéro d'itération k, l'estimateur d'erreur $||U^k - U^{k-1}||_2$ et la norme $\|\nabla J(U^k)\|$. Noter le temps de calcul et le nombre d'itérations k nécessaires pour obtenir $||U^k - U^{k-1}||_2 \leq 10^{-6}$.
3. Afficher le graphe de U^k et de G (c'est-à-dire le graphe des (U_i^k) en fonction des (x_i), et le graphe des (G_i) en fonction des (x_i)).
   Sur le même graphe afficher le multimplicateur de Lagrange λ associé à la contrainte $U \geq G$. Commenter ce graphe.
   (Ind. Il se peut que λ ne soit pas à la même échelle que U. On conseille d'afficher sur le graphique le vecteur $\frac{\lambda}{\|\lambda\|_\infty}$ au lieu de λ.)
4. Quelle est la valeur (approchée) du multiplicateur associé à la contrainte $h\sum_{i=1}^{N} U_i \geq L$?

   Cette contrainte est-elle saturée ?