

TP 2 - Problèmes sous contraintes et algorithmes associés

Jules Kozolinsky

1 Optimisation sous contraintes égalités - Lagrangien augmenté

1.1 Solution analytique du problème

Le problème est le suivant :

$$\min_{u \in U} J(u) := u_1 + u_2$$

où

$$U = \{u = (u_1, u_2) \in \mathbb{R}^2 / \varphi(u) = u_1^2 + u_2^2 - 2 = 0\}$$

Introduisons le lagrangien :

$$\mathcal{L}(u, \lambda) = J(u) + \lambda \varphi(u)$$

On a alors :

$$\nabla_u \mathcal{L} = 1 + 2\lambda u$$

Ainsi, comme $\lambda \in \mathbb{R}, u_1 = u_2$.

Puis comme $\varphi(u) = 0$, on a $u_1 = 1$ ou $u_1 = -1$.

Donc, pour obtenir le minimum, il faut $u_1 = u_2 = -1$ pour lequel on obtient $J(u) = -2$.

1.2 Résolution numérique

Pour une précision de 10^{-8} , on obtient une solution en 17 itérations seulement. (cf Figure 1)

2 Problème d'élasticité en contact. Algorithme d'Uzawa

L'algorithme d'Uzawa est très efficace pour résoudre ce problème.

2.1 $f = 0$

Pour $f = 0$, avec une précision de 10^{-6} , on obtient une solution en 1292 itérations. (cf Figure 2)

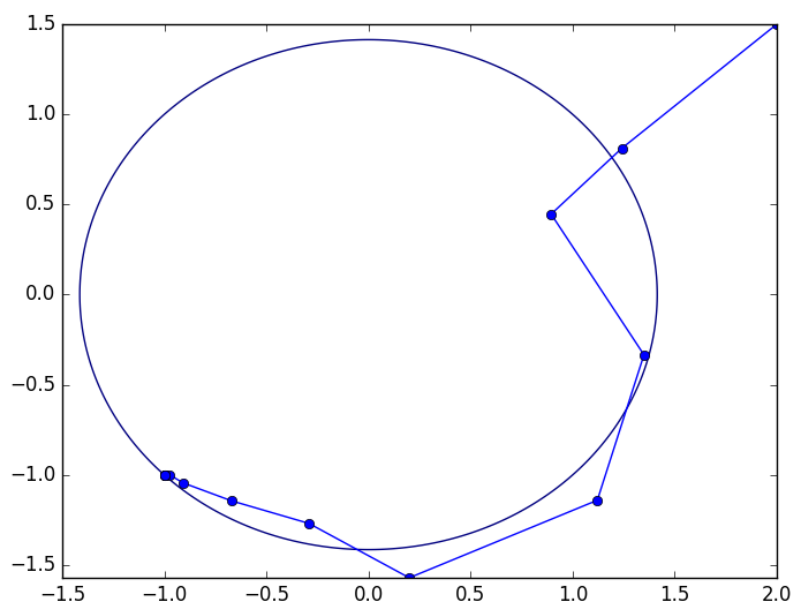


FIGURE 1 – Itérés u_k et contrainte U

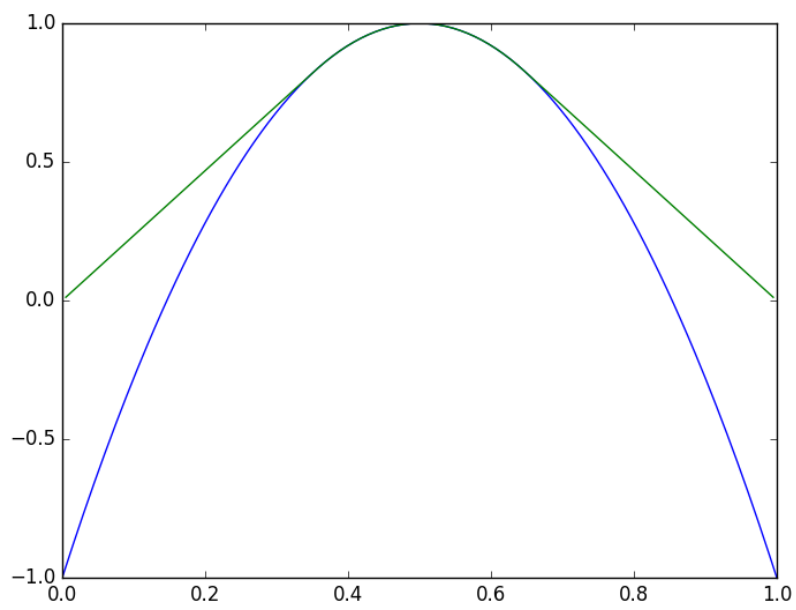


FIGURE 2 – Membrane élastique pour $f = 0$

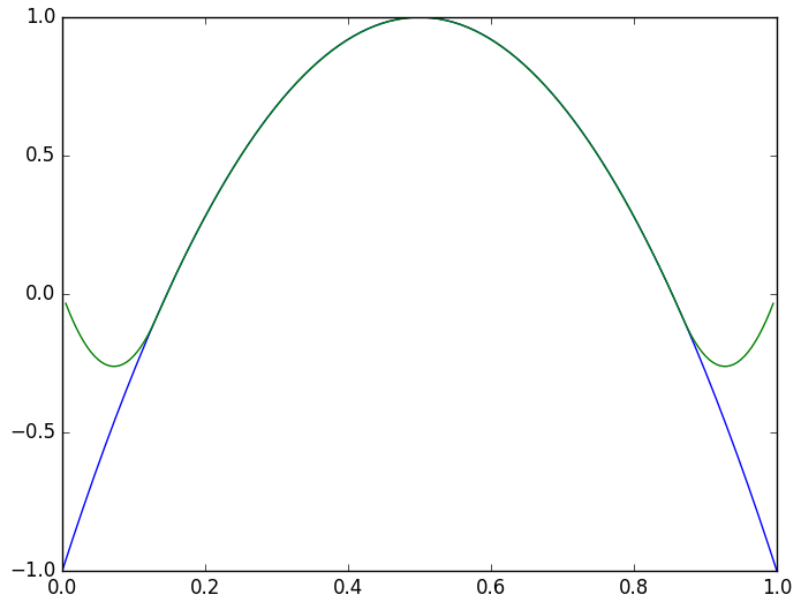


FIGURE 3 – Membrane élastique pour $f = -100$

2.2 $f = -100$

Pour $f = -100$, avec une précision de 10^{-6} , on obtient une solution en 1672 itérations. (cf Figure 3)

3 Conformation atomique d'une nano-particule et potentiel de Lennard-Jones

3.1 Résolution analytique et numérique $N = 4$

3.1.1 Solution théorique

On pose

$$\begin{aligned} X_1 &= 0 \\ X_2 &= (x_2, 0, 0)^T \\ X_3 &= (x_3, y_3, 0)^T \\ X_4 &= (x_4, y_4, z_4)^T \end{aligned}$$

Et $J(X_1, X_2, X_3, X_4) = V(r_{12}) + V(r_{13}) + V(r_{14}) + V(r_{23}) + V(r_{24}) + V(r_{34})$. Or

$$\begin{aligned} d_{12} = r_{12}^2 &= \|X_1 - X_2\|^2 = x_2^2 \\ d_{13} = r_{13}^2 &= \|X_1 - X_3\|^2 = x_3^2 + y_3^2 \\ d_{14} = r_{14}^2 &= \|X_1 - X_4\|^2 = x_4^2 + y_4^2 + z_4^2 \\ d_{23} = r_{23}^2 &= \|X_2 - X_3\|^2 = (x_2 - x_3)^2 + y_3^2 \\ d_{24} = r_{24}^2 &= \|X_2 - X_4\|^2 = (x_2 - x_4)^2 + y_4^2 + z_4^2 \\ d_{34} = r_{34}^2 &= \|X_3 - X_4\|^2 = (x_3 - x_4)^2 + (y_3 - y_4)^2 + z_4^2 \end{aligned}$$

et, en remplaçant r par $d = r^2$, on renomme V et U pour simplifier les calculs de dérivés :

$$\begin{aligned} U(d) &= \frac{1}{d^6} - \frac{2}{d^3} \\ U'(d) &= \frac{6}{d^4} \left(1 - \frac{1}{d^3}\right) \end{aligned}$$

D'où $J(X_1, X_2, X_3, X_4) = U(d_{12}) + U(d_{13}) + U(d_{14}) + U(d_{23}) + U(d_{24}) + U(d_{34})$. Ainsi, par annulation des gradients, on a : $d_{34} = d_{24} = d_{23} = d_{14} = d_{13} = d_{12} = 1$. Ainsi, on trouve :

$$\begin{aligned} x_2^2 &= 1 \\ x_3 &= \text{sign}(x_2) \frac{1}{2} \\ x_3 &= x_4 \\ y_3^2 &= \frac{3}{4} \\ y_4 &= \text{sign}(y_3) \frac{1}{3} \\ z_4^2 &= \frac{23}{36} \end{aligned}$$

Ainsi, l'ensemble des solutions est de cardinal 8.

3.1.2 Résolution numérique

On initialise avec un vecteur aléatoire. On obtient une valeur minimale de $J_4 = -6.0$ avec une précision de 10^{-7} en 10^3 itérations en moyenne.

L'énergie minimum des atomes est donc représentée sous un simplexe de dimension 4.

On obtient $X_1 = 0$ (fixé), $X_2 = (-1, 0, 0)$, $X_3 = (-0.5, -0.86, 0)$ et $X_4 = (-0.5, -0.29, 0.81)$.

(On est proche des valeurs théoriques)

3.2 Résolution numérique pour $N = 13$

On initialise également avec un vecteur aléatoire. On obtient un palier de convergence pour $J_N = -36.3$ (cf Figure 5 et 6).

Pourtant dans la littérature (sujet de l'agreg), on trouve un minimum d'environ -44 . En effet, on n'a pas exactement un icosaèdre régulier. Cela est peut-être dû à la mauvaise initialisation choisie ici, mais je n'en trouve pas de mieux.

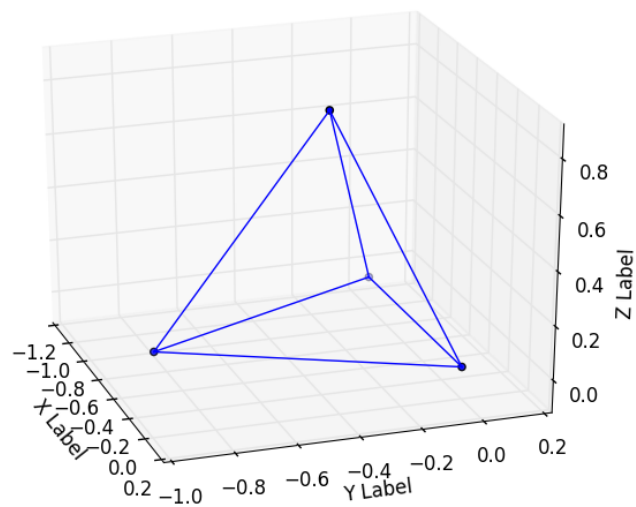


FIGURE 4 – (X_1, X_2, X_3, X_4) optimum

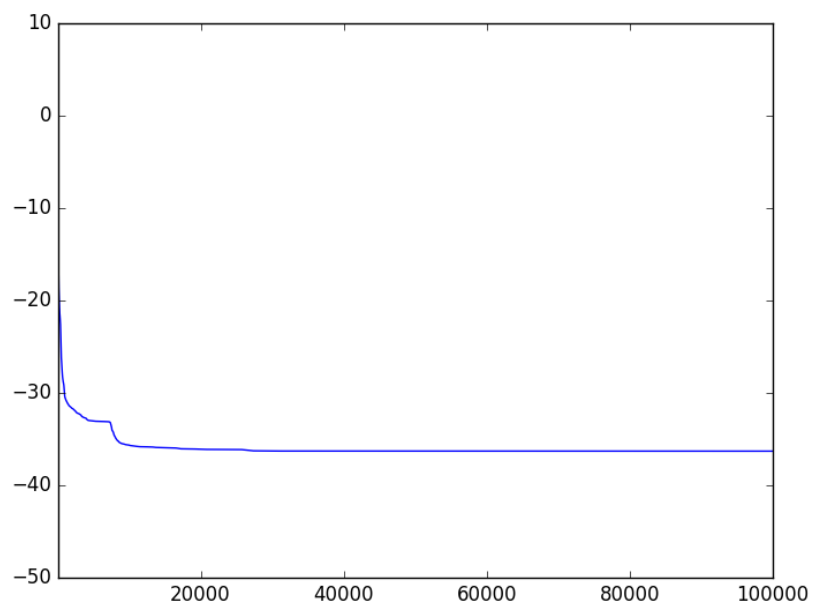


FIGURE 5 – Historique de convergence de J

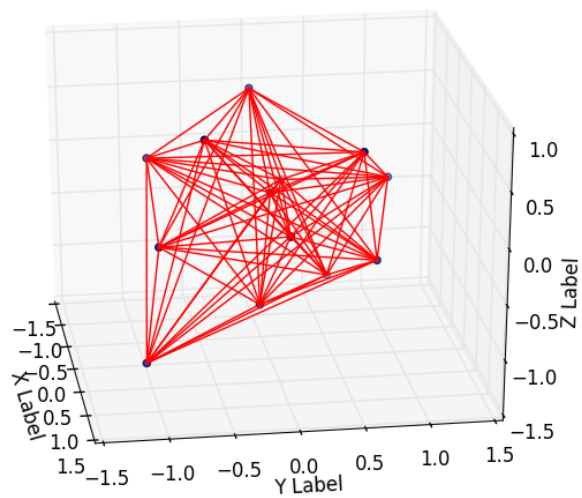


FIGURE 6 – Solution optimale