Master MVA, examen du cours, "EDPs numériques pour le traitement de l'image",

Normes cristallines, algorithme forward backward.

Les documents sont autorisés. Un notebook Python accompagne ce sujet, et devra être complété également. Les communications entre candidats sont interdites. On peut utiliser le résultat d'une question, même non-résolue, pour répondre aux questions suivantes.

Dans tout le sujet, on fixe un entier $N \geq 1$, et on munit l'espace $\mathbb{R}^N$ du produit scalaire Euclidien usuel noté $\langle\cdot,\cdot\rangle$ et de la norme associée $\|\cdot\|$. On note $(e_1, \cdots, e_N)$ la base canonique de $\mathbb{R}^N$.

1 Normes cristallines

Dans cette section, nous étudions la discrétisation, la convergence, et la résolution numérique de l'équation aux dérivées partielles (EDP) suivante: trouver $u \in C^0(\overline{\Omega}, \mathbb{R})$ solution de viscosité de

$$\max_{1\leq i\leq I} \langle \nabla u(x), w_i\rangle = c(x), \quad \forall x \in \Omega, \qquad\qquad u(x) = 0, \quad \forall x \in \partial\Omega. \tag{1}$$

On fait les hypothèses suivantes sur les données:

(I) Le domaine Ω est un ouvert borné de $\mathbb{R}^N$, de bord régulier.

(II) La fonction coût $c \in C^0(\overline{\Omega},]0, \infty[)$, est continue et strictement positive.

(III) L'envelope convexe des vecteurs $w_1, \cdots, w_I \in \mathbb{R}^N$ est un voisinage de 0.

Contexte. La croissance des structures cristallines n'est pas isotrope, mais fait apparaitre des facettes dans certaines directions liées à la structure atomique, ce qui peut être modélisé par (1).

1.1 Etude des normes cristallines

On pose pour tout $v \in \mathbb{R}^N$

$$N^*(v) := \max_{i\in[\![1,I]\!]} \langle v, w_i\rangle.$$

1. Montrer que pour tout $v \in \mathbb{R}^N$, il existe $\lambda_1, \cdots, \lambda_I \geq 0$, tels que

$$v = \sum_{i\in[\![1,I]\!]} \lambda_i w_i.$$

(Indication: utiliser l'hypothèse III)

2. Montrer que $N^*(v) > 0$ pour tout $v \in \mathbb{R}^N \setminus \{0\}$.

On rappelle qu'une *quasi-norme* est une fonction $N : \mathbb{R}^N \to [0, \infty[$ obéissant aux axiomes suivants : (Séparation) $\forall v \in \mathbb{R}^N$, $N(v) = 0 \Leftrightarrow v = 0$, (Inégalité triangulaire) $\forall v, w \in \mathbb{R}^N$, $N(v + w) \leq N(v) + N(w)$, (Homogénéité positive) $\forall v \in \mathbb{R}^N$, $\forall \lambda \geq 0$, $N(\lambda v) = \lambda N(v)$. Si on a de plus (Symmétrie) $N(v) = N(-v)$ pour tout $v \in \mathbb{R}^N$, alors N définit une *norme*.

3. Justifier que N^* est une quasi-norme.

4. Donner une condition suffisante sur les vecteurs $(w_i)_{i=1}^I$ pour que N^* soit une norme.

Finalement, pour des raisons qui apparaitront claires dans la section 1.3, voit comment ajouter des éléments redondants aux directions $(w_i)_{i=1}^I$.

5. Supposons que w appartient à l'enveloppe convexe de $\{w_1, \cdots, w_I\}$. Montrer que $\langle w, v\rangle \leq N^*(v)$ pour tout $v \in \mathbb{R}^N$.

6. Montrer qu'il existe $\eta > 0$ tel que $\eta\sigma e_n$ appartient à l'enveloppe convexe de $\{w_1, \cdots, w_I\}$, pour tout $n \in [\![1, N]\!]$, $\sigma \in \{-1, 1\}$.

Compte tenu des deux questions précédentes, et quitte à adjoindre des éléments à $w_1, \cdots, w_I$ qui ne modifient pas l'EDP (1), on peut donc supposer qu'il existe $\eta > 0$ tel que:

(IV) $\eta\sigma e_n \in \{w_i; i \in [\![1, I]\!]\}$ pour tous $\sigma \in \{-1, 1\}$, $n \in [\![1, N]\!]$.

1.2 Un schéma numérique linéaire

Soit X un ensemble fini et soit $F : \mathbb{R}^X \to \mathbb{R}^X$. On rappelle que F est *discret dégénéré elliptique* (DDE) s'il est de la forme suivante : pour tout $u : X \to \mathbb{R}$ et tout $x \in X$,

$$Fu(x) = \mathcal{F}(x, u(x), [u(x) - u(y)]_{y \in X \setminus \{x\}}),$$

où $\mathcal{F}$ est une fonction croissante en sa seconde et sa troisième variable, coordonnée par coordonnée. Une fonction $u : X \to \mathbb{R}$ est une sous-solution (resp. sur-solution) si $Fu(x) \leq 0$ (resp. $Fu(x) \geq 0$) pour tout $x \in X$.

Soit $e_1, \cdots, e_N$ la base canonique de $\mathbb{R}^N$. Etant donné $h > 0$, on définit

$$\Omega_h := \Omega \cap h\mathbb{Z}^N, \qquad \partial\Omega_h := \{x + h\sigma e_n;\ x \in \Omega_h,\ n \in [\![1, N]\!],\ \sigma = \pm 1\} \setminus \Omega_h,$$

et $X_h := \Omega_h \sqcup \partial\Omega_h$. Soit $w \in \mathbb{R}^d \setminus \{0\}$, que l'on écrit sous la forme

$$w = (\sigma_1\rho_1, \cdots, \sigma_N\rho_N), \qquad \sigma_1, \cdots, \sigma_N \in \{-1, 1\}, \qquad \rho_1, \cdots, \rho_N \geq 0.$$

Etant donné $u : X_h \to \mathbb{R}$, et $x \in \Omega_h$, on définit un schéma $F_h^w : \mathbb{R}^{X_h} \to \mathbb{R}^{X_h}$ par

$$\forall x \in \Omega_h,\ F_h^w u(x) := \sum_{n \in [\![1,N]\!]} \rho_n \frac{u(x) - u(x - h\sigma_n e_n)}{h} - c(x), \quad \forall x \in \partial\Omega_h,\ F_h^w u(x) := u(x).$$

7. Justifier que F_h^w est bien défini, et que c'est un schéma DDE sur X_h.

8. Soit $u \in C^1(\Omega)$ et soit $x \in \Omega$. Justifier que $F_h^w u(x) = \langle \nabla u(x), w\rangle - c(x) + \mathcal{O}(h)$.

On s'intéresse maintenant aux sous-solutions et sur-solutions du schéma proposé.

9. Montrer que $\overline{u} : X_h \to 0$ définie par $\overline{u}(x) = 0$ est sous-solution de F_h^w, quel que soit $h > 0$.

10. Justifier qu'il existe $v \in \mathbb{R}^N$ tel que $\langle w, v\rangle \geq c(x)$ pour tout $x \in \overline{\Omega}$. Justifier qu'il existe $\lambda \in \mathbb{R}$ tel que $\underline{u}(x) := \langle v, x\rangle + \lambda$ est sur-solution de F_h^w quel que soit $h \in]0, 1]$.

11. Soit $u : X_h \to \mathbb{R}$ une sur-solution de F_h. Montrer que pour tout $\varepsilon > 0$, $u_\varepsilon := (1+\varepsilon)u + \varepsilon$ est une sur-solution stricte de F_h.

12. Déduire des questions précédentes que, pour tout $h \in]0,1]$, il existe une unique solution $u_h : X_h \to \mathbb{R}$ au problème $F_h^w u_h = 0$. Montrer de plus que $\overline{u} \le u_h \le \underline{u}$. (Indication: on pourra citer ici un résultat du cours.)

On rappelle que l'opérateur de mise à jour de Jacobi Λ, associé à un schméma numérique F, est défini comme la solution $\lambda = \Lambda u(x)$ (supposée exister et être unique) de l'équation

$$\mathcal{F}(x, \lambda, [\lambda - u(y)]_{y \in X \setminus \{x\}}) = 0.$$

13. Montrer que l'opérateur $\Lambda_h^w u(x)$ associé au schéma F_h^w est bien défini, pour tous $u : X_h \to \mathbb{R}$ et $x \in X_h$. Donner son expression, en distinguant les cas $x \in \Omega_h$ et $x \in \partial\Omega_h$.

1.3 Schéma pour l'équation non-linéaire

On conserve les notations $X_h = \Omega_h \sqcup \partial\Omega_h$ et F_h^w de la section précédente. On définit pour tout $u : X_h \to \mathbb{R}$ et tout $x \in X_h$

$$F_h u(x) := \max_{i \in [\![1,I]\!]} F_h^{w_i} u(x).$$

Les propriétés suivantes du schéma F_h peuvent soit se déduire des propriétés correspondantes de F_h^w, soit s'établir par un raisonnement analogue, selon le cas.

14. Montrer F_h est un schéma DDE sur X_h.

15. Montrer que F_h admet une sous-solution $\overline{u}$, et une sur solution $\underline{u}$, indépendantes de $h \in]0,1]$ et que l'on précisera.

16. Montrer que toute sur-solution de F_h est limite d'une suite de sur-solutions.

On déduit des questions précédentes qu'il existe une unique solution $u_h : X_h \to \mathbb{R}$ à l'equation $F_h u_h = 0$, où $h \in]0,1]$, et que de plus elle satisfait $\overline{u} \le u_h \le \underline{u}$.

17. Montrer que l'opérateur de Jacobi $\Lambda_h : \mathbb{R}^{X_h} \to \mathbb{R}^{X_h}$ associé à F_h est

$$\Lambda_h u(x) = \min_{i \in [\![1,I]\!]} \Lambda_h^{w_i} u(x).$$

Les sous-solutions du schéma non-linéaire F_h satisfont une propriété supplémentaire: elles sont Lipschitziennes.

18. En utilisant l'hypothèse (IV), montrer que toute sous-solution $u : X_h \to \mathbb{R}$ de F_h satisfait

$$\forall x \in \Omega_h, \forall n \in [\![1,n]\!], \forall \sigma \in \{-1,1\}, \quad u(x) \le u(x + \sigma h e_n) + hc(x)/\eta.$$

19. Montrer que la solution u_h de F_h satisfait $|u_h(x) - u_h(y)| \le C\|x-y\|$ pour tous $x, y \in X_h$, où C est une constante que l'on précisera.

1.4 Convergence

20. En utilisant la question 19, montrer qu'il existe une suite $h_n \to 0^+$ et une fonction $u \in C^0(\overline{\Omega})$ telle que
$$\max_{x\in\Omega_{h_n}} |u_{h_n}(x) - u(x)| \to 0, \qquad \text{lorsque } n \to \infty.$$
(Suggestion : montrer que la fonction $v_h(x) := \min_{y\in X_h} u_h(y) + C\|x-y\|$ coincide avec u_h sur Ω_h, puis qu'elle satisfait les hypothèses du théorème de compacité d'Ascoli.)

21. Montrer que u est C-Lipschitzienne sur $\overline{\Omega}$, et que $u_{|\partial\Omega} = 0$.

On définit $\mathcal{F} : \Omega \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}^N \times S_N \to \mathbb{R}$ par
$$\mathcal{F}(x, \lambda, v, m) := N^*(v) - c(x).$$

22. Justifier que l'opérateur aux dérivées partielles $Fu(x) := \mathcal{F}(x, u(x), \nabla u(x), \nabla^2 u(x))$ est dégénéré elliptique.

On rappelle les définitions suivantes classiques dans le cadre de l'étude des solutions de viscosité:

- Une sous-solution de (1) est une fonction $\overline{u} \in C^0(\Omega, \mathbb{R})$ telle que $\overline{u} \leq 0$ pour tout $x \in \partial\Omega$, et $F\varphi(x) \leq 0$ pour tout $x \in \Omega$ et toute $\varphi \in C^2(\Omega)$ tangente supérieurement[1] à $\overline{u}$ en x.
- Une sur-solution de (1) est une fonction $\underline{u} \in C^0(\Omega, \mathbb{R})$ telle que $\underline{u} \geq 0$ pour tout $x \in \partial\Omega$, et $F\varphi(x) \geq 0$ pour tout $x \in \Omega$ et toute $\varphi \in C^2(\Omega)$ tangente inférieurement à $\underline{u}$ en x.

Une solution de (1) est une fonction qui est à la fois sous-solution et sur-solution.

Dans la suite, on note $u_n := u_{h_n}$, $X_n := X_{h_n}$, et $F_n := F_{h_n}$, pour alléger les notations. Soit $\varphi \in C^2(\Omega)$, tangente supérieurement à u en $x \in \Omega$.

23. On pose $\psi(z) := \varphi(z) + \|z - x\|^2$, et on note x_n le minimiseur de $\psi - u_n$ sur X_n. Montrer que $x_n \to x$ lorsque $n \to \infty$.

24. Montrer que $F_n\psi(x_n) \leq F_n u_n(x_n)$, pour tout $n \geq 0$.

25. En déduire que $F\psi(x) \leq 0$, puis que u est une sous-solution de viscosité de (1).

26. Par un raisonnement similaire, montrer que u est une sur-solution de viscosité de (1), et donc une solution de viscosité.

2 Algorithme forward backward

L'algorithme forward-bacward (FB) est une discrétisation semi-implicite du flot gradient
$$\forall t \geq 0, \partial_t x = -\nabla f(x) - \nabla g(x), \qquad\qquad x(0) = x_0.$$
Il est souvent utilisé en tant que méthode numérique itérative de minimisation d'une somme de deux fonctions:
$$\min_{x\in\mathbb{R}^N} f(x) + g(x).$$
Il définit une suite $(x_k)_{k\geq 0}$, initialisée par $x_0 \in \mathbb{R}^N$ arbitraire, et définie par récurrence: $\forall k \geq 0$,
$$x_{k+1} = \mathrm{prox}_{\tau f}(x_k - \tau\nabla g(x_k)), \qquad \text{où } \mathrm{prox}_{\tau f}(x) := \operatorname*{argmin}_{z\in\mathbb{R}^N} \frac{1}{2}\|z - x\|^2 + \tau f(z),$$
et où τ désigne le pas de temps. On fait les hypothèses[2] suivantes:
$$f, g : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R} \text{ sont convexes}, \qquad \nabla g : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N \text{ est } L\text{-Lipschitz}, \qquad \tau \in]0, 1/L[.$$

[1] C.a.d: $\overline{u} \leq \varphi$ sur Ω, et $\overline{u}(x) = \varphi(x)$.

[2] Pour que cet algorithme soit d'utilité pratique, il faut de plus que $\mathrm{prox}_{\tau f}$ soit facilement calculable.

2.1 Consistance avec le flot gradient

On fait l'hypothèse supplémentaire, dans cette sous-section seulement, que ∇f est bien défini, Lipschitz, et que ∇f et ∇g sont bornés sur $\mathbb{R}^N$.

1. Soit $x \in \mathbb{R}^N$, et soit $y = \mathrm{prox}_{\tau f}(x)$. Montrer que $y + \tau\nabla f(y) = x$.

2. Montrer que, pour tout $n \geq 0$ on a a $x_{k+1} + \tau\nabla f(x_{k+1}) = x_k - \tau\nabla g(x_k)$. En déduire que

$$\frac{x_{k+1} - x_k}{\tau} = -\nabla f(x_k) - \nabla g(x_k) + \mathcal{O}(\tau).$$

2.2 Décroissance de l'énergie

3. Montrer que $g(y) \leq g(x) + \langle y - x, \nabla g(x)\rangle + (L/2)\|y - x\|^2$, pour tous $x, y \in \mathbb{R}^N$.

4. On suppose que $y = \mathrm{prox}_{\tau f}(x - \tau\nabla g(x))$. Montrer que

$$\frac{1}{2}\|y - (x - \tau\nabla g(x))\|^2 + \tau f(y) \leq \frac{1}{2}\|\tau\nabla g(x)\|^2 + \tau f(x).$$

   En déduire que

$$f(y) + \langle y - x, \nabla g(x)\rangle + \frac{1}{2\tau}\|y - x\|^2 \leq f(x).$$

5. Montrer, sous les hypothèses de la question précédente, que

$$f(y) + g(y) + \frac{\tau^{-1} - L}{2}\|y - x\|^2 \leq f(x) + g(x).$$

   En déduire que la suite $(f(x_k) + g(x_k))_{k\geq 0}$ est décroissante.

6. Posons $X_\tau(t) := x_n$ pour tout $t \in [k\tau, k + 1\tau[$, et supposons $f + g$ bornée inférieurement. Montrer que $\|X_\tau(t) - X_\tau(t')\| \leq C\sqrt{|t - t'| + \tau}$, où C est une constante que l'on précisera .

2.3 Application à la méthode de régression statistique LASSO

La méthode LASSO, utilisée en statistique, peut être vue co

$$\underset{x\in\mathbb{R}^N}{\mathrm{argmin}}\ \frac{1}{2}\|y - Ax\|_2^2 + \lambda\|x\|_1,$$

où $y \in \mathbb{R}^M$, A est une matrice de taille $M \times N$, et $\lambda > 0$. On peut voir ce problème comme une inversion approchée du système linéaire $y = Ax$, avec une pénalisation L^1 ce qui favorise les vecteurs solution x ayant peu de coordonnées non-nulles. On rappelle que $\|z\|_p^p := \sum_{n=1}^N |z_n|^p$, pour tout $z \in \mathbb{R}^N$.

7. On pose $g(x) := \frac{1}{2}\|y-Ax\|_2^2$. Montrer que g est convexe, justifier que $\nabla g(x) = A^\top Ax - A^\top y$, et que ce gradient est L-Lipschitz pour une constante L que l'on précisera.

8. On pose $f(x) := \lambda\|x\|_1$. Montrer que f est convexe, et que $z := \mathrm{prox}_{\tau f}(x)$ est caractérisé par: pour tout $n \in [\![1, N]\!]$, et avec $\alpha := \tau\gamma$

$$z_n = \begin{cases} x_n - \alpha & \text{si } x_n \geq \alpha, \\ 0 & \text{si } |x_n| \leq \alpha, \\ x_n + \alpha & \text{si } x_n \leq -\alpha. \end{cases}$$