

Projet d'analyse numérique

§ A. Introduction

En regardant une carte au 1/25 000^e d'une région montagneuse, on constate que figurent sur cette carte des lignes de niveau qui sont les lignes de niveau de la fonction altitude h . Elles permettent de comprendre comment se présente le relief. Si la région n'est pas trop aride, on constate aussi la présence de courbes tracées en bleu et qui représentent les torrents. Poursuivant l'examen, on se rendra compte que les lignes bleues coupent les lignes de niveau, orthogonalement : la représentation sur la carte des torrents correspond à des lignes de plus grande pente.

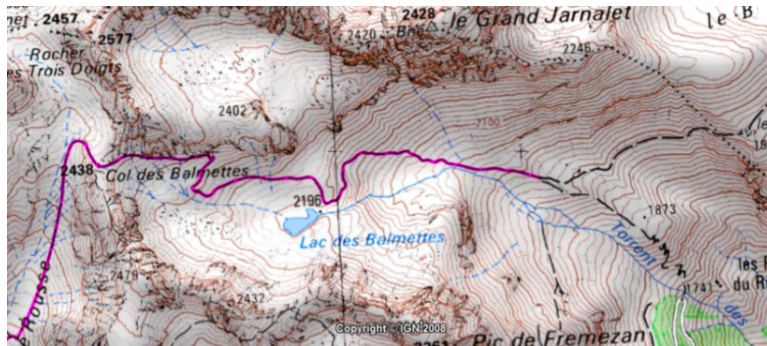


FIGURE 1 – Carte IGN au 1/25 000^e

Dans ce projet nous allons nous intéresser au problème de recherche d'extrema d'une fonction de plusieurs variables à valeurs réelles. Les algorithmes que nous allons étudier font parti de la famille des algorithmes à directions de descente. Le principe de la plupart de ces algorithmes, qui remonte à Cauchy¹, est qu'un déplacement dans la direction du gradient fera croître la fonction.

§ B. Optimisation d'une fonction d'une variable réelle

On se donne une fonction continue f définie sur un intervalle $[a, b]$. L'objectif de cette partie est de construire un algorithme permettant de déterminer une valeur approchée de son minimum. Commençons cette section par quelques méthodes de balayage.

Méthode par balayage à pas constant : On subdivise l'intervalle $[a, b]$ en N intervalles de même longueur $\Delta x = \frac{b-a}{N}$. On cherche ensuite le minimum des valeurs prises par la fonction en chacun des points de la subdivision.

Méthode par balayage aléatoire : On génère de façon aléatoire $N + 1$ valeurs comprises entre a et b . On cherche ensuite le minimum des valeurs prises par la fonction en ces valeurs.

1. L.A. Cauchy, "Méthode générale pour la résolution des systèmes d'équations simultanées", Comptes Rendus de l'Académie des Sciences de Paris, 1847, voir p. 537

1. Programmer ces deux méthodes en **Python**.
2. Tester ces méthodes sur la fonction f définie sur $[0, 3]$ par $f(x) = x^3 - 3x^2 + 2x + 5$.
3. Tracer les courbes d'erreurs. Une des deux méthodes vous semble-t-elle plus efficace que l'autre ?
4. Utiliser un des programmes de la question 1. afin de déterminer une valeur approchée du maximum de f .

Méthodes du gradient 1D : On se fixe $u < 0$ assez petit. On considère alors la suite définie par :

$$\begin{cases} x_0 \in [a, b], \\ x_{n+1} = x_n + uf'(x_n). \end{cases}$$

Après quelques itérations on approche le minimum de f par $f(x_n)$.

5. Expliquer pourquoi en général $f(x_{n+1})$ est plus proche du minimum que $f(x_n)$.
6. Programmer et tester cette méthode.
7. Afin d'améliorer cette méthode on peut essayer de déterminer à chaque étape la longueur de pas optimale, c'est-à-dire qui minimise la fonction φ définie par $\varphi(t) = f(x_n + tf'(x_n))$.
 - a. Calculer $\varphi'(0)$ et $\varphi''(0)$.
 - b. On approche φ' par son développement limité à l'ordre 1 en 0. Pour quelle valeur de t obtient-on un pas u optimal ? Quelle méthode classique retrouve-t-on ?

§ C. Optimisation d'une fonction de deux variables réelles

On considère une fonction $f : \Omega \subset \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}$ de classe \mathcal{C}^1 sur Ω .

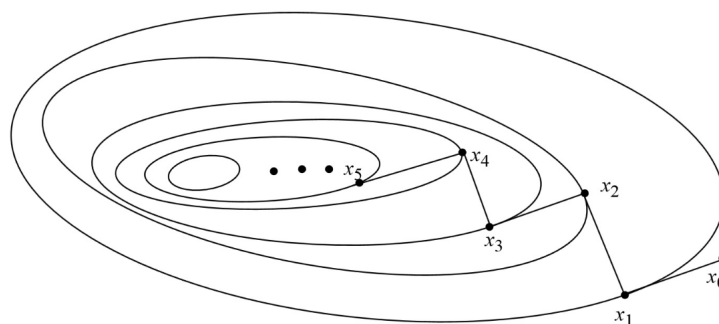
La méthode du gradient à pas constant : Elle consiste à fixer un pas u et un point de départ (x_0, y_0) , et à calculer les termes :

$$(x_{n+1}, y_{n+1}) = (x_n, y_n) + u\nabla f(x_n, y_n).$$

On arrête le calcul lorsque le nombre d'itérations est trop grand (la méthode n'a pas convergé) ou lorsque $\|\nabla f(x_n, y_n)\| < \varepsilon$, ε étant une précision donnée. Dans ce cas, on a sans doute atteint un point critique.

Version améliorée : Elle consiste à chercher le plus grand pas possible dans la direction du gradient pour se rapprocher de l'extremum. On fixe un pas u et un point de départ (x_0, y_0) puis à chaque nouvelle itération on calcule les termes :

$$\begin{aligned} F_1 &= f((x_n, y_n) + ku\nabla f(x_n, y_n)), \\ F_2 &= f((x_n, y_n) + (k+1)u\nabla f(x_n, y_n)). \end{aligned}$$



Lors de la recherche d'un minimum, on augmente k tant que $F_2 < F_1$ car on se rapproche du minimum. On utilise ensuite le même test d'arrêt que dans la méthode précédente.

On considère les fonctions définies par $g_{a,b}(x, y) = \frac{x^2}{a} + \frac{y^2}{b}$ et $h(x, y) = \cos(x) \sin(y)$.

1. Représenter les graphes (3D) de $g_{2, \frac{2}{7}}$ et de h .
2. Représenter les courbes de niveau associées à ces fonctions.
3. Calculer les gradients de $g_{a,b}$ et de h .
4. Evaluer ces gradients en quelques points et calculer leurs normes.
5. Ecrire une fonction Python `gradpc(eps, m, u, x0, y0, df1, df2)` permettant de tracer la suite obtenue avec la méthode du gradient à pas constant.
6. Pour les fonctions h et $g_{2, \frac{2}{7}}$, représenter les itérations de cet algorithme (les suites (x_n, y_n)) générées à partir des points $(x_0, y_0) = (0, 0)$ pour h et $(x_0, y_0) = (7, 1.5)$ pour g . Ajouter également les courbes de niveau. Commenter les résultats.
7. Tracer la courbe d'erreur relative à $g_{1,20}$ en prenant $\varepsilon = 10^{-5}$, un maximum de 120 itérations, et en faisant varier u entre -0.99 et -0.001 . Que constatez-vous ?
8. Ecrire une fonction Python `gradamax(eps, m, u, x0, y0, f, df1, df2)` permettant de tracer la suite obtenue avec la méthode du gradient à pas constant amélioré. Pour simplifier la procédure traiter uniquement le cas où on cherche un maximum. Tester.
9. Ecrire une fonction Python `gradamin(eps, m, u, x0, y0, f, df1, df2)` permettant de traiter le cas où on cherche un minimum. Tester.
10. En prenant $\varepsilon = 10^{-5}$ et en faisant varier u entre -0.999 et 0.001 comparer les nombres d'itérations entre les 2 méthodes pour $g_{1,20}$. Commenter les résultats.

§ D. Calcul de l'inverse d'une matrice

Soit A une matrice symétrique définie positive, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$, et Φ la fonction définie sur \mathbb{R}^n par

$$\Phi(\mathbf{y}) = \mathbf{y}^T A \mathbf{y} - 2\mathbf{y}^T \mathbf{b}.$$

On peut montrer que la résolution de $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ est équivalente à la détermination de $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ minimisant Φ .

L'algorithme de gradient à pas optimal est donné par la suite :

$$\begin{cases} \mathbf{y}_{k+1} = \mathbf{y}_k - \rho_k G(\mathbf{y}_k) & \text{avec :} \\ \rho_k = \frac{\|G(\mathbf{y}_k)\|^2}{2G(\mathbf{y}_k)^T A G(\mathbf{y}_k)} & \text{si } G(\mathbf{y}_k) \neq 0 \text{ et} \\ \rho_k = 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

où $G(\mathbf{y}) = 2(A\mathbf{y} - \mathbf{b})$ est le gradient de Φ au point \mathbf{y} .

1. Vérifier que dans le cas $n = 1$ on retrouve l'algorithme de la question 7. de la partie B..
2. Écrire un programme de calcul de cette suite qui s'arrête lorsque le nombre d'itérations est trop grand ou lorsque $\|\mathbf{y}_{k+1} - \mathbf{y}_k\| < \varepsilon$.
3. Tester votre algorithme dans les cas où $n = 2$ ou 3. On pourra également comparer cette méthode à celles des parties précédentes.

§ E. Application à des problèmes de transfert de la chaleur

Dans cette partie, on s'intéresse à la résolution de l'équation différentielle :

$$(\star) \quad \forall x \in]0, 1[\quad -\frac{d^2 T}{dx^2}(x) + c(x)T(x) = f(x); \quad T(0) = a, \quad T(1) = b,$$

où a et b sont deux réels. Concrètement, il s'agit de modéliser l'espace (une droite) par un segment $[0, 1]$ et de calculer l'évolution de la température T en chacun des points de cet espace. Notre but ici consiste à déterminer, étant données deux fonctions c et f (fixés), une fonction T qui soit une solution approchée de cette équation (en admettant qu'une telle solution existe).

1. Considérons une barre cylindrique dont les parois latérales sont parfaitement calorifugées. On suppose que depuis un temps très long la température des extrémités est maintenue aux valeurs suivantes :

$$T(x=0) = a \quad \text{et} \quad T(x=1) = b.$$

En régime permanent le profil de température est obtenu en résolvant (\star) avec $c = 0$ et $f = 0$. En utilisant l'algorithme que vous avez obtenu dans la section précédente, résoudre ce système (on prendra $a = 500$ K et $b = 350$ K).

2. Reprenons l'exemple précédent d'une barre dont la température aux extrémités est maintenue constante. Nous n'allons plus supposer que les parois latérales sont parfaitement calorifugées. On va supposer que le transfert thermique entre la tige et l'atmosphère est de type conducto-convectif. En régime stationnaire le profil de température est obtenu en résolvant (★) avec

$$c = \frac{2h}{\lambda R} \quad \text{et} \quad f = \frac{2hT_a}{\lambda R},$$

où h est le coefficient de transfert conducto-convectif, R est le rayon de la tige, λ sa conductivité thermique, et T_a la température de l'atmosphère. En utilisant l'algorithme que vous avez obtenu dans la section précédente, résoudre ce système.

On prendra $D = \sqrt{\frac{\lambda R}{2h}} = \sqrt{0.1}$ m, $a = 500$ K, $b = 350$ K, et $T_a = 300$ K.

§ F. Pour aller plus loin

Plusieurs extensions de ce travail peuvent être envisagées :

- Étude d'autres méthodes numériques permettant de minimiser une fonction.
- Étude d'autre(s) technique(s) (que les différences finies) permettant de résoudre (★), notamment les méthodes de tir.

§ G. Quelques rappels

On considère une fonction $f : \Omega \subset \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}$ de classe \mathcal{C}^1 sur l'ouvert Ω .

Extrema locaux : On dit que f admet un maximum local en $(x_0, y_0) \in \mathbb{R}^2$ s'il existe un disque ouvert centré en (x_0, y_0) et inclus dans Ω sur lequel $f(x, y) \leq f(x_0, y_0)$. On définit de la même façon la notion de minimum local.

Points critiques : On dit que (x_0, y_0) est un point critique lorsque :

$$\nabla f(x_0, y_0) \stackrel{\text{def}}{=} \left(\frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0), \frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0) \right) = (0, 0).$$

Points critiques et extrema : Si f admet un extremum en $(x_0, y_0) \in \Omega$ alors (x_0, y_0) est un point critique. En d'autres termes les extrema sont à chercher parmi les points critiques.

Ligne de niveau : Notons S_f le graphe de la fonction f . Soit $k \in \mathbb{R}$. La ligne de niveau k de la fonction f correspond à la projection sur le plan $z = 0$ de $S_f \cap \{z = k\}$; i.e. l'ensemble $\{(x, y) \in \mathbb{R}^2 / f(x, y) = k\}$.

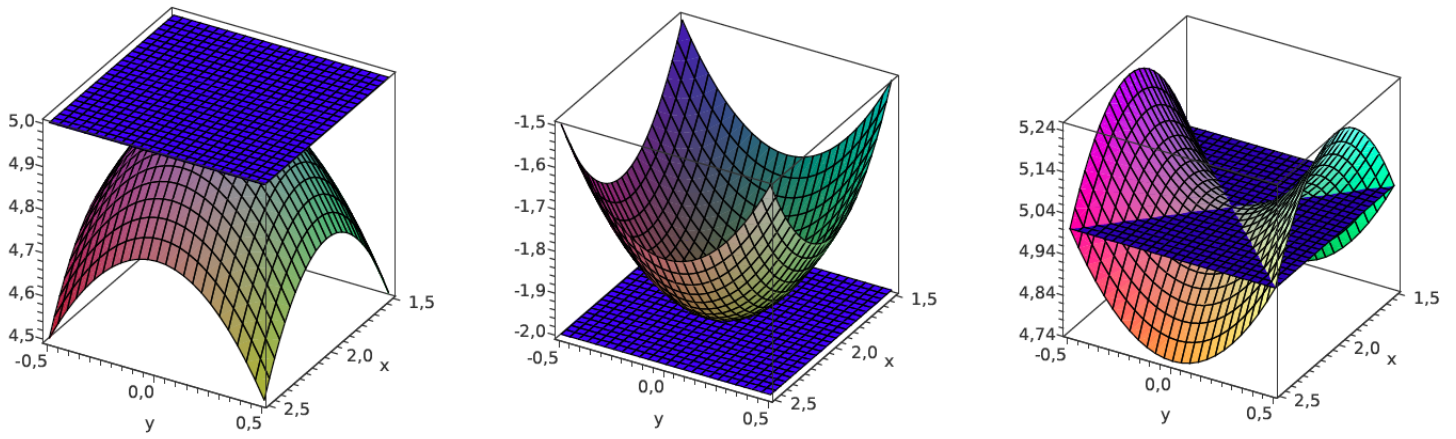


FIGURE 2 – De gauche à droite on observe un maximum local, un minimum local, puis un point selle. Ce dernier point est un point où le gradient s’annule mais qui n’est pas un extremum.

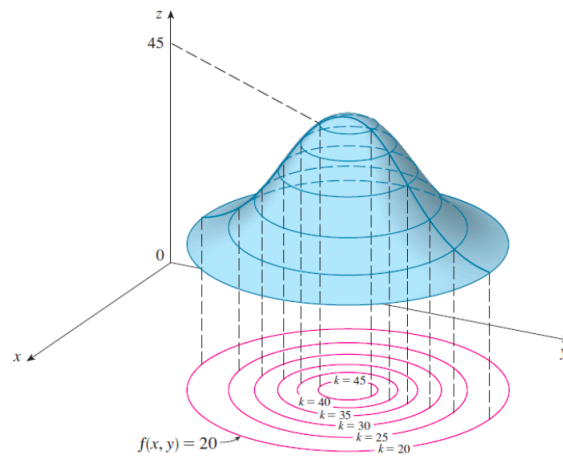


FIGURE 3 – Ligne de niveau de la fonction $f(x, y) = x^2 + y^2$.

Gradient : En tout point (x, y) le vecteur $\nabla f(x, y)$ est perpendiculaire à la surface de niveau passant par ce point. De plus il est dirigé suivant la direction de variation la plus rapide de f , dans le sens des valeurs croissantes de f .

Ligne de courant : Le long d'une courbe paramétrée qui est en tout point tangente au vecteur $\nabla f + \vec{e}_z$ et orientée par lui, la variation de f est la plus forte. C'est ce que l'on appelle une ligne de courant ou une ligne de plus grande pente.

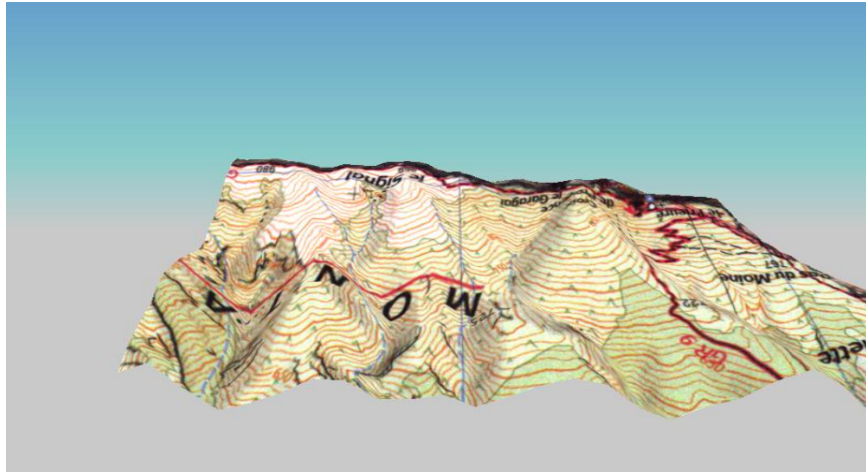


FIGURE 4 – Face nord de la Sainte Victoire. Les lignes de niveau sont déjà dessinées, placez des lignes de plus grandes pentes ...