**Travaux pratiques**

# Optimisation sans contraintes (durée 6h)

Ces travaux pratiques consistent en la mise en oeuvre de quelques méthodes d'optimisation par descente itérative avec recherche linéaire. L'objectif est de réaliser une analyse comparative de ces méthodes à travers deux exemples classiques : la minimisation de la fonction de Rosenbrock et l'ajustement d'une courbe non-linéaire.
**Rapport attendu :** Le compte-rendu consistera en un fichier `pdf` et une archive `zip`. Le fichier `VotreNom-Rapoport.pdf` correspondra au rapport incluant des commentaires et des réponses aux questions posées. L'archive `VotreNom-Code.zip` est un dossier dans lequel un script `main.m` permettra de reproduire tous les résultats. Le compte-rendu doit être déposé sur l'espace dédié sur le serveur hippocampus au plus tard deux semaines après la dernière séance du TP (date à vérifier sur hippocampus).

## 1 Minimisation de la fonction de Rosenbrock

On s'intéresse à la fonction de Rosenbrock [1] ($f_0 : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$) définie par :

$$f_0(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{n-1} b(x_{i+1} - x_i^2)^2 + (1 - x_i)^2, \quad \forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n \text{ et } b \in \mathbb{R}^+.$$

### 1.1 Travail préliminaire

1. Exprimer le gradient et le hessien de cette fonction.
2. Montrer l'existence d'un minimiseur de cette fonction que l'on calculera analytiquement. Quelle est la valeur de la fonction en ce point optimal ?
3. Reformuler la fonction de Rosenbrock sous forme d'un critère de moindres carrés non-linéaires. Exprimer le Jacobien de ce critère.

### 1.2 Visualisation de la fonction objectif

On considérera par la suite le problème de minimisation de la fonction de Rosenbrock dans le cas $n = 2$ et pour $b = 2$.

1. Compléter le fichier Matlab `rosenbrock.m` (disponible sur le serveur) de sorte à évaluer cette fonction objectif, son gradient et son hessien.
2. Evaluer la fonction $f_0$ dans l'intervalle $x_1 \in [-4,\, 4]$ et $x_2 \in [-5,\, 20]$ avec un pas de 0,05.
   a) A l'aide de la fonction de tracé 3D (`meshc`), visualiser l'allure de $f_0$,
   b) Utiliser la fonction `contour` avec $L = 100$ niveaux pour tracer les lignes de niveaux de la fonction $f_0$.

### 1.3 Minimisation par descente itérative

Il vous est demandé de compléter le script `main_tpcsopt_optim1` et la fonction `optimdescent.m` de sorte à :

1. Mettre en oeuvre la méthode de descente de plus forte pente avec un pas fixe. Le test d'arrêt des itérations sera basé sur la norme du gradient ($\texttt{TolG}=10^{-8}$), le nombre maximal d'itérations ($\texttt{MaxIter} = 10^3$), la variation relative de la norme des itérées ($\texttt{TolX}=10^{-8}$) et la variation relative de la valeur de la fonction objectif ($\texttt{TolF} = 10^{-8}$). Tester le fonctionnement pour quelques valeurs différentes du pas (1, $10^{-2}$, $10^{-4}$).

1. Cette fonction a été introduite par Howard H. Rosenbrock en 1960. Elle est aussi connue sous le nom de fonction banane.

2. Ajouter une recherche de pas par une technique de rebroussement (avec un taux $\beta = 0.75$) de telle sorte à assurer la condition d'Armijo (avec une constante $c = 10^{-4}$). Quelles conséquences constatez-vous ?
3. Compléter le code précédent par les algorithmes de descente itérative suivants :
   a) Gradient conjugué non-linéaire (conjugaison de type Fletcher-Reeves),
   b) Newton (pas unitaire puis pas variable),
   c) Quasi-Newton de type BFGS.

   La recherche de pas sera toujours utilisée.
4. Comparer les performances des algorithmes pour deux points initiaux différents choisis suffisamment éloignés du point optimal. Tous les algorithmes doivent être initialisés à la même valeur $\boldsymbol{x}_0$.
   a) Tracer sur le même graphique l'évolution du critère pour toutes les méthodes,
   b) Tracer sur le même graphique l'évolution de la norme du gradient au cours des itérations,
   c) Reporter le nombre d'itérations et le temps de calcul nécessaires pour chaque méthode.
   d) Commenter ces résultats.
5. Compléter les fonctions `optimdescent.m` et `rosenbrock.m` de telle sorte à pouvoir ajouter les méthodes de Gauss-Newton et Levenberg-Marquardt.
6. Appliquer ces méthodes à l'optimisation de la fonction de Rosenbrock. Comparer les résultats avec ceux obtenus par les autres méthodes (convergence et temps de calcul).

## 2 Ajustement d'une courbe non-linéaire

Le relevé expérimental résultant de l'étalonnage d'un capteur résistif de mesure d'intensité lumineuse est résumé dans la table 1. On souhaite déterminer les coefficients $(\alpha, \beta)$ permettant de modéliser la valeur de sa résistance $(R)$

| E (lux) | 5013 | 2415 | 1558 | 1000 | 820 | 621 | 433 | 201 | 105 | 55 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| R (KΩ) | 0,141 | 0,329 | 0,525 | 0,970 | 1,140 | 1,511 | 2,362 | 5,224 | 12,826 | 25,512 |

TABLE 1 – Relevé experimental.

en fonction de l'éclairement $(E)$ à l'aide d'une caractéristique de la forme $R(E) = \beta E^{-\alpha}$ à partir de ce relevé expérimental. La recherche des meilleurs coefficients se fera par minimisation du critère des moindres carrés

$$f_0(\alpha, \beta) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \left(R_i - \beta E_i^{-\alpha}\right)^2$$

1. Ecrire un fonction `capteur.m` permettant d'évaluer la fonction objectif, son gradient et hessien pour toute valeur de $\boldsymbol{x} = [\alpha \quad \beta]^{\mathrm{t}}$. On s'appuiera sur un calcul analytique du gradient et du hessien. On utilisera la même syntaxe que dans l'exercice précédent ;
2. Tracer les courbes de niveau du log-critère $\log(f_0)$ pour $\alpha \in [0, 2]$, $\beta \in [0, 4]$ avec un pas de 0,01,
3. Appliquer les algorithmes mis en oeuvre dans l'exercice précédant pour résoudre ce problème de régression non-linéaire,
4. Faire un récapitulatif des résultats (valeur finale du critère, solution, nombre d'itérations, temps de calcul),
5. Tracer la caractéristique théorique obtenue et comparer avec les points expérimentaux.

## 3 Débruitage d'un signal par minimisation d 'un critère composite

Soit un signal, $x$, dont la version mesurée, $y$, est entachée d'un bruit, $b$, additif et inconnu. La fonction `simsignal`, disponible sur le serveur pédagogique de l'enseignement, permet de simuler un signal similaire au spectre vibrationnel d'une molécule chimique. La même fonction permet également de simuler un signal sous forme d'électrocardiogramme.

L'objectif de cet exercice est d'utiliser les méthodes d'optimisation itératives pour le débruitage du signal.

### 3.1 Simulation des signaux

1. Simuler une réalisation du vecteur $x$ de longueur $n = 1000$ échantillons avec une forme de votre choix,
2. Calculer la variance de bruit additif nécessaire pour obtenir un rapport signal sur bruit (RSB) de 20 décibels (dB). Rappelons que le rapport signal sur bruit est défini par

$$\text{RSB (dB)} = 10 \cdot \log_{10} \frac{E_x}{\sigma_b^2},$$

avec $E_x$ est l'énergie du signal et $\sigma$ est l'écart-type du bruit.

3. Simuler puis tracer le signal de mesure en présence de bruit.
4. Montrer que le modèle de mesure peut s'écrire sous la forme matricielle

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{H}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{e}$$

oú le vecteur $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ et $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$ contiennent les échantillons des signaux $x$ et $y$ respectivement. Que vaut la matrice $\boldsymbol{H}$ ?

### 3.2 Débruitage du signal

1. Quelle est la solution du débruitage par minimisation d'un critère de moindres carrés ?
2. Le problème de débruitage est maintenant formulé comme un problème d'optimisation simultanée de deux critères

$$f_0(\boldsymbol{x}) = \|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{H}\boldsymbol{x}\|_2^2 \quad \text{et} \quad f_1(\boldsymbol{x}) = \|\boldsymbol{D}\boldsymbol{x}\|_2^2,$$

oú $\boldsymbol{D}$ est une matrice associée à la différentiation numérique d'ordre 1. Expliciter $\boldsymbol{D}$. Que vaut la solution minimisant $f_1(\boldsymbol{x})$ ?

3. On souhaite réaliser le débruitage par minimisation d'un critère mixant les deux fonctions $f_0$ et $f_1$

$$f_\lambda(\boldsymbol{x}) = (1 - \lambda) f_0(\boldsymbol{x}) + \lambda f_1(\boldsymbol{x}),$$

avec $\lambda \in ]0, 1[$. Expliciter la solution du problème d'optimisation du critère $f_\lambda$. Calculer la solution par une approche fondée sur la minimisation itérative du critère $f_\lambda$. Afficher sur le même graphique les signaux originaux, bruité et estimé.

4. Refaire l'analyse pour plusieurs valeurs de $\lambda \in ]0, 1[$. En traçant l'évolution de la norme de l'erreur d'estimation de $\boldsymbol{x}$ en fonction de la valeur de $\lambda$, y'a t-il une valeur optimale de $\lambda$ ?
5. Tracer la courbe $f_0(\hat{\boldsymbol{x}}(\lambda))$ en fonction de $f_1(\hat{\boldsymbol{x}}(\lambda))$. Localiser la meilleure valeur de $\lambda$.

## 4 Inversion numérique d'une transformée de Laplace par optimisation sous contraintes

Considérons des données issues de la mesure de relaxation RMN longitudinale (T1) ou transverse (T2). L'objectif de l'analyse de ces données est l'estimation des distributions $S(T_1)$ et $S(T_2)$ des temps de relaxation (T1 et T2), qui reflètent la composition moléculaire de l'échantillon organique analysé, sachant que les mesures de relaxation RMN sont expliquées par un modèle physique sous la forme

$$x(\tau) = \begin{cases} \displaystyle\int_0^\infty S(T_1)(1 - e^{-\tau/T_1}) dT_1 & \text{en mode T1,} \\ \displaystyle\int_0^\infty S(T_2) e^{-\tau/T_2} dT_2 & \text{en mode T2.} \end{cases} \tag{1}$$

La figure **??** illustre les deux courbes de relaxation enregistrées en mode T2 et T2 pour une échantillon de pomme. Afin de résoudre ce problème d'estimation des distributions à partir des données mesurées, on se propose dans ce travail pratique de mettre en oeuvre une méthode d'analyse fondée sur l'optimisation sous contraintes. La méthode d'estimation consiste en la résolution du problème

$$\min_{\boldsymbol{s}} \sum_{k=1}^{M} [y(\tau_k) - x(\tau_k)]^2 \tag{2}$$

$$\text{sous contrainte } \boldsymbol{s} \geqslant 0 \tag{3}$$

où $y(\tau_k)$ représente le signal mesuré à l'instant $\tau_k$ et $x(\tau_k)$ le signal obtenu selon le modèle 1. On ajoutera à ce critère un deuxième terme mesurant la régularité de la distribution à travers la norme de sa dérivée première pondérer par un coefficient $\beta$.

Les étapes à suivre pour la mise en oeuvre de l'algorithme d'analyse des courbes de relaxation sont les suivantes :

1. Ecrire une fonction permettant de calcul le signal de relaxation à partir d'un vecteur $\mathbf{s}$ contenant la distribution discrete des temps de relaxation évaluée sur $N$ valeurs $T(k)$ sur l'intervalle $]0; T_{\max}]$, et d'un autre vecteur $\mathbf{t}$ contenant les instants des temps de mesure $\tau_1, \cdots, \tau_M$.
2. Ecrire une fonction permettant le calcul de la fonction objectif, de son gradient et son hessien.
3. Ecrire une fonction permettant de résoudre le problème d'optimisation en utilisant la méthode de la barrière logarithmique.
4. Ecrire une fonction permettant de résoudre le problème d'optimisation en utilisant la méthode de pénalité extérieure.
5. La validation de la méthode se fera sur les données fournies `DataSim` et `DataRelax`.