MU5MEF39 : Optimisation en Aérodynamique (CM2)

A. Belme

17 décembre 2021

Contenu du cours

1. Introduction à l'optimisation : définition et notations, convexité, existence et unicité solution locale et globale
2. **Conditions d'optimalité, rappels différentiabilité, inégalité d'Euler, contraintes convexes, Lagrangien et multiplicateurs de Lagrange, point-selle, Th. Kuhn-Tucker**
3. Problème duale : formalisme adjoint continue et discret
4. Algorithmes d'optimisation
5. Analyse des sensibilités et applications
6. Optimisation de maillage*
7. Optimisation sous incertitudes*

Chap 2 : Conditions d'optimalité

Dans le cours précédent nous nous sommes intéressé a l'existence de minimium . Nous alons maintenant chercher des conditions nécessaires et parfois suffisantes de minimalité. Ces conditions d'optimalité seront souvent utilisées pour essayer de calculer un minimum .

L'idée générale des conditions d'optimalité est la même que celle qui, lorsque l'on calcule l'extremum d'une fonction sur $\mathbb{R}$, consiste à écrire que **sa dérivée doit s'annuler**.

On va exprimer ces conditions à l'aide des dérivées prémières ou secondes. Nous obtiendrons surtout des conditions nécessaires d'optimalité, mais l'utilisation de la dérivée seconde ou l'introduction de l'hypothèse de convexité permettront aussi d'obtenir des conditions suffisantes.

Rappel cours précédent : Si x_0 est un point de minimum local de J sur l'intervalle $[a,b] \subset \mathbb{R}$ (J dérivable sur $[a,b]$), alors on a

$$J'(x_0) \geq 0, \text{ si } x_0 = a \quad J'(x_0) = 0 \text{ si } x_0 \in]a,b[, \quad J'(x_0) \leq 0 \text{ si } x_0 = b$$

Preuve : On utilise les contraintes ($x_0 \in [a,b]$) et développements de Taylor dans des **directions admissibles** ($x_0 \pm h$).

C'est exactement la stratégie de cette preuve élémentaire qu'on va adopter dans ce qui suit.
Après avoir introduit lors du dernier cours les divers notions de fonction dérivable (au sens Fréchet et Gateaux) on va maintenant s'intéresser a définir les conditions (surtout nécessaires) d'optimalité.

2.2 Conditions d'optimalité : Inéquations d'Euler et contraintes convexes

L'idée du résultat qui suit est que, $\forall v \in K$ (avec K convexe, fermé non-vide), on peut tester l'optimalité de u dans la "direction admissible" $(v-u)$ car $u + h(v-u) \in K$ si $h \in [0,1]$.

Théorème 2.2 (Inéquation d'Euler, cas convexe) : *Soit $u \in K$ convexe. On suppose que J est différentiable en u. Si u est un point de minimum local de J sur K, alors :*

$$\langle J'(u), v-u \rangle \geq 0, \ \forall v \in K \tag{1}$$

Si u vérifie (1) et si J est convexe, alors u est un minimum global de J sur K.

2.2 Conditions d'optimalité : Inéquations d'Euler et contraintes convexes

La rélation (1) est dite **l'inéquation d'Euler**. Il s'agit d'une condition **nécessaire** d'optimalité (ou nécessaire et suffisante si J est convexe).

L'inéquation se réduit à **l'équation d'Euler** $J'(u) = 0$ si $K = V$ c.a.d problème sans contrainte (car $v - u$ décrit tout V quand $v \in V$) .

Preuve : Soit $v \in K$ et $h \in]0, 1]$, $u + h(v - u) \in K$ et donc $J(u + h(v - u)) \geq J(u)$ (car u est un point de minimum local). On divise ensuite par h :

$$\frac{J(u + h(v - u)) - J(u)}{h} \geq 0$$

puis en faisant $h \to 0$ on obtient l'inégalité d'Euler.

Un exemple

Montrer que l'équation d'Euler vérifiée par le point de minimum $u \in H_0^1(\Omega)$ de :

$$\inf_{v \in H_0^1(\Omega)} \left\{ J(v) = \frac{1}{2} \int_\Omega \nabla v^2 dx - \int_\Omega fv dx \right\}$$

est précisément la formulation variationnelle :

$$\int_\Omega \nabla u \nabla v dx = \int_\Omega fv dx, \quad \forall v \in H_0^1(\Omega)$$

2.2 Conditions d'optimalité : Inéquations d'Euler et contraintes convexes

Proposition 2.3 (condition d'optimalité de deuxième ordre) : *On suppose que $K = V$ et que J est deux fois dérivable en u. Si u est un point de minimum local de J, alors :*

$$J'(u) = 0 \ \ et \ \ J''(u)(w,w) \geq 0, \forall w \in V \tag{2}$$

Réciproquement, si , pour tout v dans un voisinage de u,

$$J'(u) = 0 \ \ et \ \ J''(u)(w,w) \geq 0, \forall w \in V \tag{3}$$

alors u est un point de minimum local de J.

2.2 Conditions d'optimalité : Inéquations d'Euler et contraintes convexes

Preuve : Si u est un minimum local alors on sait déjà que $J'(u) = 0$ (condition nécessaire d'ordre 1). Par la définition de la dérivée seconde, i.e. $J(u + w) \approx J(u) + J'(u)w + J''(u)(w, w)/2$ on déduit directement la deuxième condition $J''(u)(w, w) \geq 0$. Pour la réciproque : si u vérifie (3) on écrit un développement de Taylor à l'ordre deux pour $J(u + tw)$ puis on déduit aisément que u est un minimum local (en utilisant la définition).

On s'intéresse maintenant au cas ou K n'est pas convexe. Plus précisement K sera l'ensemble des **contraintes d'égalité** ou d'**inégalité**.

2.3.1 Contraintes d'égalité :

$$K = \{v \in V, F(v) = 0\}$$

où $F(v) = (F_1(v), F_2(v), ..F_M(v))$ est une application de V dans $\mathbb{R}^M$, avec $M \geq 1$.
La **condition nécessaire** d'optimalité prend alors la forme suivante :

Théorème 2.4 (condition nécessaire) : *Soit $u \in K$ avec K définie plus haut. On suppose que J est dérivable en $u \in K$ et que les fonctions F_i $(1 \leq i \leq M)$ sont continûment dérivables dans un voisinage de u. On suppose de plus que les vecteurs $(F_i'(u))_{1 \leq i \leq M}$ sont linéairement indépendants. Alors, si u est un minimum local de J sur K, il existe $\lambda_1, ..., \lambda_M \in \mathbb{R}$, appelés **multiplicateurs de Lagrange**, tels que :*

$$J'(u) + \sum_{i=1}^{M} \lambda_i F_i'(u) = 0 \tag{4}$$

Remarque : Lorsque les vecteurs $(F_i'(u))_{1\leq i\leq M}$ sont linéairement indépendants, on dit qu'on est dans un **cas régulier**. Dans le cas contraire, on parle de cas non régulier et la conclusion du théorème précedent est fausse.

Voici un exemple : Soit $V=\mathbb{R}$, $M=1$, $F(v)=v^2$, $J(v)=v$. On obtient alors : $K=\{0\}$, $u=0$ et comme $F'(u)=0$ on obtient un cas non régulier. De plus, $J'(u)=1$ donc le théorème n'est pas vérifié.

Un exemple (optimisation quadratique à contraintes linéaires) :
Soit A une matrice carrée d'ordre n, symétrique définie positive. Soit B une matrice rectangulaire de taille mxn. Soit b vecteur de $\mathbb{R}^n$. On veut résoudre le problème :

$$\inf_{x \in KerB} \left\{ J(x) = \frac{1}{2} Ax \cdot x - b \cdot x \right\}.$$

2.3 Conditions optimalité : Multiplicateurs de Lagrange

Solution : Soit b_i, $1 \leq i \leq m$ les m lignes de B. On a donc m contraintes : $b_i x = 0$. Si le rang de B est m alors les contraintes sont linéairement indépendantes et on peut appliquer directement le théorème (si non, les contraintes sont contradictoires ou redondantes). Il existe donc un multiplicateur de Lagrange $\lambda \in \mathbb{R}^m$ tel que un point de minimum $\bar{x}$ vérifie :

$$A\bar{x} - b + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i b_i = 0$$

Si A est inversible on en déduite alors :

$$\bar{x} = A^{-1}(b - \sum_{i=1}^{m} \lambda_i b_i) = A^{-1}(b - B^* \lambda)$$

On multiplie par B à gauche et on utilise la contrainte pour conclure :

$$0 = BA^{-1}b - BA^{-1}B^*\lambda$$

$$\lambda = (BA^{-1}B^*)^{-1}BA^{-1}b$$

On introduit le **Lagrangien** $\mathcal{L}$ du problème de minimisation de J sur K. En effet, soit $\mathcal{L}$ définie sur $V \times \mathbb{R}^M$ par :

$$\mathcal{L}(v, \mu) = J(v) + \sum_{i=1}^{M} \mu_i F_i(v) = J(v) + \mu \cdot F(v) \tag{5}$$

Si $u \in K$ est un minimum local de J sur K, d'après le théorème précédent, dans le cas régulier, il existe $\lambda \in \mathbb{R}^M$ tel que :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v}(u, \lambda) = 0 \quad , \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mu}(u, \lambda) = 0$$

puisque $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mu}(u, \lambda) = F(u) = 0$ (les contraintes) et
$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v}(u, \lambda) = J'(u) + \lambda F'(u) = 0$ (condition d'optimalité).
On peut ainsi écrire la contrainte et la condition d'optimalité comme *l'annulation du gradient (la stationnarité) du Lagrangien*.

2.3.2 Contraintes d'inégalité

Soit $K = \{v \in V, F_i(v) \leq 0,\ 1 \leq i \leq M\}$, avec $F_i : V \to \mathbb{R}, \forall i \in 1, .., M$.

On parlera dans cette section de **conditions de qualifications** , des conditions auxiliaires qu'on imposera aux contraintes. Ces conditions vont 'garantir' que l'on peut faire des "variations" autour d'un point v pour tester son optimalité.

Il existe plusieurs types des conditions de qualifications. Ici on regardera sur un problème linéarisé s'il est possible de faire des variations en respectant les contraintes linéarisées.

2.3 Conditions optimalité : Multiplicateurs de Lagrange

Définition (contraintes actives) : *Soit $u \in K$. L'ensemble $I(u) = \{i \in 1, ..., M, F_i(u) = 0\}$ est appelé l'ensemble des contraintes* ***actives*** *en u.*

Définition (contraintes qualifiées) : *On dit que les contraintes $F_i(v) \leq 0,\ 1 \leq i \leq M$ sont* ***qualifiées*** *en $u \in K$ ssi $\exists$ une direction $\bar{w} \in V$ telle que l'on ait pour tout $i \in I(u)$:*

$$\textit{ou bien } \ \langle F_i'(u), \bar{w} \rangle < 0,$$

$$\textit{ou bien } \ \langle F_i'(u), \bar{w} \rangle = 0, \quad \textit{et } F_i \ \textit{ est affine.}$$

2.3 Conditions optimalité : Multiplicateurs de Lagrange

Théorème 2.5 (conditions nécessaires d'optimalité) : *On suppose* $K = \{v \in V, F_i(v) \leq 0,\ 1 \leq i \leq M\}$, *les fonctions* J *et* F_i *(*$i = 1, ..., M$*) sont dérivables en* u *et que les contraintes sont qualifiées en* u*. Alors, si* u *est un minimum local de* J *sur* K*, il existe* $\lambda_1, ..., \lambda_M \geq 0$ *appelés multiplicateurs de Lagrange, tels que :*

$$J'(u) + \sum_{i=1}^{M} \lambda_i F_i'(u) = 0, \quad \lambda_i \geq 0, \quad \lambda_i = 0 \text{ si } F_i(u) < 0, \forall 1 \leq i \leq M \qquad (6)$$

2.3.3 Contraintes d'égalité et d'inégalité

On peut mélanger les deux types de contraintes.
Soit alors $K = \{v \in V, G(v) = 0, F(v) \leq 0\}$ où
$G(v) = (G_1(v), ..., G_N(v))$ et $F(v) = (F_1(v), ..., F_M(v))$ sont deux applications de V dans $\mathbb{R}^N$ et resp. $\mathbb{R}^M$.
Il faudra alors donner une définition adéquate de la qualification des contraintes. On note toujours $I(u) = \{i \in 1, ..., M, F_i(u) = 0\}$ l'ensemble des contraintes d'inégalité actives en u.

Définition : On dit que les contraintes précédentes sont **qualifiées** en $u \in K$ ssi les vecteurs $(G_i'(u))_{1 \leq i \leq N}$ sont linéairement indépendants et il existe une direction $\bar{w} = \cap_{i=1}^{N} [G_i'(u)]^{\perp}$ telle que l'on ait pour tout $i \in I(u)$

$$\langle F_i'(u), \bar{w} \rangle < 0$$

Théorème 2.6 (conditions nécessaires d'optimalité pour contraintes mixtes) : *Soit $u \in K$ avec K définie plus haut. On suppose que J et F sont dérivables en u, que G est dérivable dans un voisinage de u, et que les contraintes sont qualifiées en u. Alors, si u est un minimum local de J sur K, il existe des multiplicateurs de Lagrange $\mu_1, ..., \mu_N$ et $\lambda_1, ..., \lambda_M \geq 0$, tels que :*

$$J'(u) + \sum_{i=1}^{N} \mu_i G_i'(u) + \sum_{i=1}^{M} \lambda_i F_i'(u) = 0 \quad \lambda \geq 0, F(u) \leq 0, \lambda \cdot F(u) = 0. \quad (7)$$

2.4 Conditions optimalité : Point selle, théorème de Kuhn et Tucker

2.4.1 Point-selle

Nous avons vu qu'il est possible d'intérpreter le couple (u, λ) (point de minimum, multiplicateur de Lagrange) comme **point de stationnarité du Lagrangien** $\mathcal{L}$.

Dans cette section nous allons concrétiser la nature de ce point (point-selle) ; et nous verrons que sous certaines hypothèses les conditions nécessaires sur le Lagrangien seront également suffisantes.

2.4.1 Point selle

De manière abstraite, V et Q étant deux espaces de Hilbert réels, un Lagrangien $\mathcal{L}$ est une application de $V \times Q$ (ou d'une partie $U \times P$ de $V \times Q$) dans $\mathbb{R}$.
Dans le théorème 2.4 : $U = K$ et $P = \mathbb{R}^M$ et $\mathcal{L}(v, q) = J(v) + q \cdot F(v)$.

Définition (point-selle) *Un point $(u, \lambda) \in U \times P$ est un **point-selle** (min-max ou col) de $\mathcal{L}$ sur $U \times P$ si :*

$$\forall q \in P \quad \mathcal{L}(u, q) \leq \mathcal{L}(u, \lambda) \leq \mathcal{L}(v, \lambda), \forall v \in U \tag{8}$$

2.4.1 Point selle

Lien avec le problème de min avec contrainte égalité-inégalité :

Proposition : *On suppose $J, F_1, ...F_M$ continues sur V, et K un ensemble de contraintes (d'égalité ou d'inégalité). On note $P = \mathbb{R}^M$ (pour contraintes d'égalité) et $P = (\mathbb{R}_+)^M$ (pour contraintes d'inégalité) . Soit U un ouvert de V contenant K. Pour $(v, q) \in U \times P$ on pose*
$\mathcal{L}(v, q) = J(v) + q \cdot F(v)$.
Soit (u, λ) un point selle de $\mathcal{L}$ sur $U \times P$. Alors $u \in K$ et u est un minimum global de J sur K. De plus, si $J, F_1, ...F_M$ sont dérivables en u, on a :

$$J'(u) + \sum_{i=1}^{M} \lambda_i F_i'(u) = 0 \tag{9}$$

2.4.1 Point selle

Preuve : Commençons par écrire les conditions de point-selle :

$$\forall q \in P \ J(u) + q \cdot F(u) \leq J(u) + \lambda \cdot F(u) \leq J(v) + \lambda \cdot F(v), \ \forall v \in U \quad (10)$$

Cas contrainte égalité : Comme $P = \mathbb{R}^M$ la rélation (10) à gauche devient :

$$q \cdot F(u) \leq \lambda \cdot F(u), \forall q \in P$$

puis $F(u) = 0$ donc $u \in K$. Il reste alors :

$$J(u) \leq J(v) + \lambda \cdot F(v), \ \forall v \in U$$

En prenant v dans $K \subset U$ on a bien $J(u) \leq J(v)$ (un mimimum global de J sur K).
Un raissonement similaire est considéré pour le cas de contrainte d'inégalité.
Pour finir, si $J, F_1, ...F_M$ sont dérivables en u, la deuxième inégalité montre que u est un point de minimum sans contrainte pour $J + p \cdot F$ dans l'ouvert U , i.e. la dérivée s'annule en u.

2.4.2 Théorème de Kuhn et Tucker

Nous revenons aux problèmes de minimisation sous contrainte d'inégalité avec $K = \{v \in V, F_i(v) \leq 0, \text{ pour } 1 \leq i \leq m\}$.

On a établi précédement une condition nécessaire d'optimalité pour ce cas, nous verront comment ce résultat dévient également **suffisant** si les contraintes sont également convexes.

En effet, dans la proposition précédente on a vue que si (u, λ) est un point-selle du Lagrangien, alors u réalise le minimum de J sur K.
Nous allons établir une réciproque de ce résultat pour un problème de minimisation convexe avec des contraintes d'inégalité convexes.

Théorème de Kuhn-Tucket (ou Karush-Kuhn-Tucker, ou KKT) *On suppose que les fonctions $J, F_1, ..., F_M$ sont convexes continues sur V et dérivable sur K. On introduit le Lagrangien associé :*

$$\mathcal{L}(v,q) = J(v) + q \cdot F(v),\ \forall (v,q) \in Vx(\mathbb{R}_+)^M.$$

Soit $u \in K$ un point de K où les contraintes sont qualifiées. Alors u est un minimum global de J sur K ssi il existe $\lambda \in (\mathbb{R}_+)^M$ tel que (u, λ) soit un point-selle du Lagrangien $\mathcal{L}$ sur $Vx(\mathbb{R}_+)^M$, ou de manière équivalente, tel que :

$$F(u) \leq 0, \lambda \geq 0, \lambda \cdot F(u) = 0,\ J'(u) + \sum_{i=1}^{M} \lambda_i F_i'(u) = 0. \tag{11}$$

2.4.2 Théorème de Kuhn et Tucker

Remarque :
Le théorème de Kuhn-Tucker ne s'applique qu'aux contraintes d'inégalité, cependant, il est bon de remarque que des contraintes d'égalité affines $Ax = b$ peuvent s'écrire sous la forme de contrainte d'inégalité (affines donc convexes) : $Ax - b \leq 0$ et $b - Av \geq 0$. Ceci permet d'appliquer le théorème de Kuhn-Tucker à un problème de minimisation avec des contraintes d'égalité affines.