

Jeudi 8 décembre 2016

Travaux Pratiques numéro 2 (durée : 4 heures)  
Problèmes sous contraintes et algorithmes associés.

## 1 Optimisation sous contraintes égalités – Lagrangien augmenté

On considère le problème d'optimisation sous contrainte égalité suivant

$$\min_{\mathbf{u} \in U} J(\mathbf{u}) := u_1 + u_2 \quad (1)$$

où

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

Quelle est la solution de ce problème ?

On décide d'adopter une approche d'optimisation par Lagrangien augmenté. Le Lagrangien augmenté  $\mathcal{L}_\rho$  associé au problème (1) et de coefficient de pénalisation  $\rho > 0$  est donné par

$$\mathcal{L}_\rho(\mathbf{u}, \lambda) = J(\mathbf{u}) + \lambda \varphi(\mathbf{u}) + \frac{\rho}{2} [\varphi(\mathbf{u})]^2, \quad \mathbf{u} \in \mathbb{R}^2, \lambda \in \mathbb{R}. \quad (3)$$

Les conditions d'optimalité au premier ordre sont données par

$$\nabla_{\mathbf{u}} \mathcal{L}_\rho(\mathbf{u}, \lambda) = \nabla J(\mathbf{u}) + (\lambda + \rho \varphi(\mathbf{u})) \nabla \varphi(\mathbf{u}) = 0,$$

$$\nabla_\lambda \mathcal{L}_\rho(\mathbf{u}, \lambda) = \varphi(\mathbf{u}) = 0.$$

On reconnaît les équations d'Euler-Lagrange avec un multiplicateur

$$\lambda_\rho = \lambda + \rho \varphi(\mathbf{u}).$$

Cette interprétation donne l'idée d'une méthode itérative de type point fixe. Pour  $\lambda = \lambda^k$  (à l'itération  $k$ ), on doit résoudre le système non linéaire

$$\mathbf{G}^k(\mathbf{u}) := \nabla J(\mathbf{u}) + (\lambda^k + \rho \varphi(\mathbf{u})) \nabla \varphi(\mathbf{u}) = 0$$

L'application d'une itération de la méthode de Newton-Raphson sur  $\mathbf{G}^k(\mathbf{u}) = 0$  donnerait

$$\mathbf{u}^{k+1} = \mathbf{u}^k - [D\mathbf{G}^k(\mathbf{u}^k)]^{-1} \mathbf{G}^k(\mathbf{u}^k)$$

Un calcul simple donne

$$D\mathbf{G}^k(\mathbf{u}^k) = \nabla_{uu}^2 J(\mathbf{u}^k) + \lambda^k \nabla_{uu}^2 \varphi(\mathbf{u}^k) + \rho \varphi(\mathbf{u}^k) \nabla_{uu}^2 \varphi(\mathbf{u}^k) + \rho \nabla \varphi(\mathbf{u}^k) \nabla \varphi(\mathbf{u}^k)^T.$$

Dans l'esprit de la méthode de Gauss-Newton, on néglige le terme  $\rho \varphi(\mathbf{u}^k) \nabla_{uu}^2 \varphi(\mathbf{u}^k)$  ( $\varphi(\mathbf{u}) = 0$  à convergence) et on définit la matrice  $S^k$  définie par

$$S^k = \nabla_{uu}^2 J(\mathbf{u}^k) + \lambda^k \nabla_{uu}^2 \varphi(\mathbf{u}) + \rho \nabla \varphi(\mathbf{u}^k) \nabla \varphi(\mathbf{u}^k)^T.$$

Vérifier (mentalement) que pour le problème particulier de cet exercice, les matrices  $S^k$  sont symétriques définies positives. On introduit alors la direction de recherche  $\mathbf{d}^k$  à l'itération  $k$  définie par

$$\mathbf{d}^k = -(S^k)^{-1} \nabla_u \mathcal{L}_\rho(\mathbf{u}^k, \lambda^k)$$

et on applique une minimisation par recherche linéaire dans la direction  $\mathbf{d}^k$  :

$$\alpha^k = \arg \min_{\alpha \geq 0} \mathcal{L}_\rho(\mathbf{u}^k + \alpha \mathbf{d}^k, \lambda^k),$$

$$\mathbf{u}^{k+1} = \mathbf{u}^k + \alpha^k \mathbf{d}^k.$$

On termine enfin par la mise à jour du multiplicateur :

$$\lambda^{k+1} = \lambda^k + \rho \varphi(\mathbf{u}^{k+1}).$$

Mettre en œuvre cette méthode de Lagrangien augmenté, en partant de  $\mathbf{u}^0 = (2, 1.5)^T$ ,  $\lambda^0 = 0$  et en prenant  $\rho = 0.1$ . Pour la recherche linéaire, on initialisera le pas  $\alpha^k$  par  $\alpha^{k,0} = 1$ .

NB : on tracera les itérés  $\mathbf{u}^k$  dans le plan (reliés par des segments de droite), et on affichera de même l'ensemble des contraintes  $U$  (cercle) pour apprécier la position relative des itérés par rapport aux contraintes.

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

Dans le cours, on a considéré le problème d'une membrane élastique attachée au bord d'un domaine bidimensionnel borné  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ , soumise à une force surfacique  $f \in L^2(\Omega)$  et possiblement en contact avec un obstacle régulier représenté par une fonction  $\chi \in \mathcal{C}^1(\Omega)$ . On supposera que  $\chi|_{\partial\Omega} < 0$ . En notant  $u = u(x)$  le déplacement de la membrane dans la direction  $z$ , le problème de contact (sous l'hypothèse de petits déplacements) revient à minimiser l'énergie de la membrane

$$\min_{u \in U} \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla u|^2 dx - \int_{\Omega} f u dx \quad (4)$$

où

$$U = \{v \in H_0^1(\Omega), v(x) \geq \chi(x) \text{ p.p.}\} \quad (5)$$

Pour simplifier, on considère dans cet exercice le cas monodimensionnel où  $\Omega = ]0, 1[$ . On montre que les éléments finis P1 définis sur un maillage uniforme  $\{x_i = i h, i = 0, 1, \dots, n, n+1\}$  de l'intervalle  $[0, 1]$  conduisent à la matrice de rigidité  $A$  définie par

$$A = \frac{1}{h} \text{tridiag}(-1, 2, -1),$$

où  $h = \frac{1}{n+1}$ , et  $n$  est le nombre de points de discrétisation intérieurs à  $[0, 1]$ . Le problème discret d'élasticité sous contact s'écrit alors comme suit : trouver  $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n$  solution du problème de minimisation

$$\min_{\mathbf{u} \in U} \frac{1}{2} \langle A\mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle - \langle \mathbf{f}, \mathbf{u} \rangle \quad (6)$$

avec  $\mathbf{f} = M(f(x_1), \dots, f(x_n))^T$ ,  $M$  étant la matrice  $M = h \text{ tridiag}(\frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{1}{4})$  et

$$U = \{\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n / \mathbf{u} \geq \mathbf{X}\} \quad (7)$$

où  $\mathbf{X} = (X_i)_i$ ,  $X_i = \chi(x_i)$ ,  $i = 1, \dots, n$ . Les contraintes s'écrivent alors

$$\varphi(\mathbf{v}) = \mathbf{X} - \mathbf{v} \leq 0$$

où  $\varphi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ . Le Lagrangien du problème discret  $\mathcal{L}(\mathbf{v}, \mu)$  s'écrit

$$\mathcal{L}(\mathbf{v}, \mu) = \frac{1}{2} \langle A\mathbf{v}, \mathbf{v} \rangle - \langle \mathbf{f}, \mathbf{v} \rangle + \mu^T (-\mathbf{v} + \mathbf{X}), \quad \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n, \mu \in \mathbb{R}_+^n.$$

On montre facilement que la fonctionnelle duale  $H$  :

$$H(\mu) = \inf_{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n} \mathcal{L}(\mathbf{v}, \mu), \quad \mu \in \mathbb{R}_+^n.$$

est égale (à une constante près) à

$$H(\mu) = -\frac{1}{2} \langle \mu, A^{-1} \mu \rangle + \langle \mu, \mathbf{X} - A^{-1} \mathbf{f} \rangle$$

et que

$$\nabla_{\mu} H(\mu) = \varphi(\mathbf{u}_{\mu}), \quad \mathbf{u}_{\mu} = \arg \min_{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n} \mathcal{L}(\mathbf{v}, \mu) = A^{-1}(\mathbf{f} + \mu).$$

On rappelle l'algorithme d'Uzawa donné dans le cours :

1. (Initialisation) Multiplicateur  $\lambda^{(0)} \in \mathbb{R}_+^n$  donné, et pas de gradient  $\rho > 0$  "correctement choisi" ;
2. Boucle sur les itérations  $(k)$  :

$$\mathbf{u}^{(k)} = \arg \min_{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n} \mathcal{L}(\mathbf{v}, \lambda^{(k)}),$$

$$\lambda^{(k+1)} = [\lambda^{(k)} + \rho \nabla_{\mu} H(\lambda^{(k)})]_+$$

( $[\dots]_+$  désigne le projecteur sur l'orthant positif) ;

3. Critère d'arrêt :

$$\frac{\|\mathbf{u}^{(k+1)} - \mathbf{u}^{(k)}\|}{1 + \|\mathbf{u}^{(0)}\|} < \varepsilon.$$

Mettre en œuvre l'algorithme d'Uzawa avec un pas de gradient "convenable". Pour cela on calculera  $\alpha = \lambda_1(A)$  (plus petite valeur propre de  $A$ ) et on choisira

$$\rho = \alpha.$$

On prendra aussi  $n = 200$ ,  $\lambda^{(0)} = 0$  (dans  $\mathbb{R}^n$ ) et  $\varepsilon = 10^{-3}$ .

1. On considérera dans un premier temps  $f = 0$ , et  $\chi(x) = 1 - 2(2x - 1)^2$ . Réaliser l'optimisation avec l'algorithme d'Uzawa. Tracer la solution numérique ainsi que la fonction  $\chi$ .
2. On considérera dans un deuxième temps  $f = -100$ , et  $\chi(x) = 1 - 2(2x - 1)^2$ . Recommencer l'optimisation dans ce cas.

### 3 Autre application (optimisation sans contrainte). Conformation atomique d'une nano-particule et potentiel de Lennard-Jones

NB : problème donné à l'épreuve de "modélisation" de l'Agrégation de Mathématiques.

L'état fondamental d'une nano-particule d'or composée de  $N$  atomes peut se modéliser par la minimisation d'un potentiel de Lennard-Jones de taille  $N$ , c'est-à-dire

$$\min_{(\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_N) \in (\mathbb{R}^3)^N} J_N := \sum_{i=1}^N \sum_{j/i < j \leq N} V(r_{ij})$$

où  $r_{ij} = \|\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j\|$ ,  $i \neq j$  et

$$V(r) = \frac{1}{r^6} - \frac{2}{r^{12}}, \quad r > 0$$

désigne proprement dit le potentiel de Lennard-Jones entre 2 particules distantes de  $r$ . Remarquer que

$$r^* = \arg \min_{r>0} V(r) = 1, \quad V(r^*) = -1.$$

L'une des difficultés de ce problème est son caractère non convexe. De plus, on conjecture que le nombre de minima locaux de cette fonctionnelle est exponentiel en  $N$ .

Pour  $N \geq 4$ , on peut réduire légèrement la dimension du problème en "quotientant" par les invariances par translation et rotation. Dans ce cas, on fixe

$$\mathbf{X}_1 = 0_{\mathbb{R}^3}$$

et on choisit aussi  $\mathbf{X}_2$  et  $\mathbf{X}_3$  de la forme

$$\mathbf{X}_2 = (x_2, 0, 0)^T, \quad \mathbf{X}_3 = (x_3, y_3, 0).$$

Pour  $N$  particules ( $N \geq 4$ ), la dimensionnalité du problème est alors  $(3N - 6)$ .

Quelle est la solution théorique du problème pour  $N = 4$ ? Essayer de retrouver cette solution en utilisant l'algorithme de Nelder-Mead (vu au TP1). Tracer la nano-particule en reliant les différents centres des atomes par des segments de droite. Afficher la valeur de  $J_4$  optimale ainsi trouvée.

Pour  $N = 13$ , on sait (pour des raisons de géométrie et de symétrie) que la solution optimale est unique et est donnée par l'icosaèdre régulier. Essayer de retrouver la conformation optimale du point de vue numérique, sinon préciser les difficultés rencontrées. Tracer la solution numérique et afficher la valeur de  $J_{13}$  "optimale" ainsi trouvée.

NB : on fera attention à initialiser correctement la conformation représentée par le vecteur inconnu  $\mathbf{u}$  (à réfléchir).