

TP 3: Optimisation numérique unidimensionnelle avec SCILAB

Soit f une fonction définie sur un intervalle $I = [a_0, b_0] \subset \mathbb{R}$. Notre objectif ici est de trouver le minimum de f numériquement. On propose plusieurs méthodes. On dira que f est unimodale sur I si: (a) f admet un minimum unique sur I , atteint en un point $t^* \in I$, (b) f est strictement décroissante sur $[a_0, t^*]$ et strictement croissante sur $[t^*, b_0]$. Ainsi, si f est strictement convexe sur I et atteint son minimum en un point $t^* \in \overset{\circ}{I}$, alors f est unimodale sur I .

1. Méthode de dichotomie sans dérivées

La première étape de la dichotomie sans dérivée consiste à considérer un intervalle plus petit $[a'_0, b'_0]$ tel que $a'_1 = (1 - \rho_1)a_0 + \rho_1 b_0$, et $b'_1 = \rho_1 a_0 + (1 - \rho_1)b_0$ où ρ_1 est un réel (arbitrairement choisi pour le moment) tel que $0 \leq \rho_1 < \frac{1}{2}$ (la longueur de l'intervalle $[a'_1, b'_1]$ est égale à $(1 - 2\rho_1)(b_0 - a_0)$). On a deux cas: (a) soit $f(a'_1) < f(b'_1)$ et donc $t^* \in [a_0, b'_1]$. On pose alors $[a_1, b_1] = [a_0, b'_1]$, (b) Soit $f(a'_1) \geq f(b'_1)$ et donc $t^* \in [a'_1, b_0]$. On pose alors $[a_1, b_1] = [a'_1, b_0]$.

Dans les deux cas, l'intervalle $[a_1, b_1]$ est de longueur $(1 - \rho_1)(b_0 - a_0)$. On recommence ensuite le même processus en démarrant de l'intervalle $[a_1, b_1]$; on choisit un nouvel intervalle $[a'_2, b'_2] \subset [a_1, b_1]$ tel que $a'_2 = (1 - \rho_2)a_1 + \rho_2 b_1$ et $b'_2 = \rho_2 a_1 + (1 - \rho_2)b_1$ et on continue de même. Au bout de N itérations, on obtient un intervalle réduit $[a_N, b_N]$ de taille $(1 - \rho_1)\dots(1 - \rho_N)(b_0 - a_0)$. Il reste à choisir les coefficients ρ_1, \dots, ρ_N .

L'une des façons de les choisir repose sur le souhait de réduire le nombre d'évaluations de la fonction f (ces évaluations peuvent être très coûteuses en temps de calcul). Ainsi, il convient de choisir dans la deuxième étape ci-dessus $b'_2 = a'_1$ (quand $t^* \in [a_0, b'_1]$) ou $a'_2 = b'_1$ (quand $t^* \in [a'_1, b_0]$). Un petit calcul montre que ce choix n'est possible que si

$$\rho_2 = 1 - \frac{\rho_1}{1 - \rho_1}, \quad (1)$$

et pour les itérations suivantes on a la relation de récurrence

$$\rho_{k+1} = 1 - \frac{\rho_k}{1 - \rho_k}, \text{ pour } k \geq 1. \quad (2)$$

Cette relation permet de calculer tous les termes de la suite $(\rho_k)_{k \geq 1}$ à partir du premier terme ρ_1 . Si on veut que tous ces facteurs soit égaux, il est nécessaire que ρ_1 vérifie l'équation

$$\rho = 1 - \frac{\rho}{1 - \rho}, \quad (3)$$

dont la seule solution comprise entre 0 et 1/2 est

$$\rho = \frac{3 - \sqrt{5}}{2} = 2 - \frac{1 + \sqrt{5}}{2}.$$

On reconnaît l'apparition du nombre d'or $\frac{1+\sqrt{5}}{2}$. Cette méthode est dite *méthode de la section d'or*. Puisque au bout de N itérations, l'intervalle d'incertitude $[a_N, b_N]$ contenant t^* est de taille $(1 - \rho)^N$, la méthode de la section d'or converge quand f est unimodale.

Une autre façon de choisir les coefficients consiste à minimiser la taille de l'intervalle d'incertitude obtenu au bout de N itérations; il s'agit alors de minimiser le produit $(1 - \rho_1) \dots (1 - \rho_N)$ sous les contraintes de récurrence (2) et les contraintes $0 \leq \rho_k \leq \frac{1}{2}$ pour tout $k \leq N$. En introduisant la suite de Fibonacci $(F_k)_{k \geq -1}$ définie par

$$F_{-1} = 0, F_0 = 1, F_{k+1} = F_k + F_{k-1},$$

on peut montrer que la solution est donnée par

$$\rho_k = 1 - \frac{F_{N-k+1}}{F_{N-k+2}} \text{ pour } 1 \leq k \leq N. \quad (4)$$

Dans ce cas, on a

$$(1 - \rho_1) \dots (1 - \rho_N) = \frac{1}{F_{N+1}}. \quad (5)$$

Afin d'obtenir la solution avec une erreur inférieure à $e > 0$, il suffit de choisir au départ N tel que

$$\frac{b_0 - a_0}{F_{N+1}} < e. \quad (6)$$

Notons que $\rho_N = \frac{1}{2}$; on ne peut donc réduire l'intervalle à la dernière étape; c'est pour cela qu'en pratique, on choisit $\rho_N = \frac{1}{2} - \epsilon$, où $\epsilon < 0$ est suffisamment petit.

2. Méthode de dichotomie avec dérivée

Supposons ici que f est de classe \mathcal{C}^1 sur $[a_0, b_0]$ et que $f'(a_0) < 0$ et $f'(b_0) > 0$. Il existe alors un point $t^* \in [a_0, b_0]$ tel que $f'(t^*) = 0$. Si de plus f est unimodale, alors t^* réalise le minimum de f . On cherche la racine de l'équation $f'(x) = 0$ de la façon suivante: on évalue $f'(c)$ où c est le milieu de $[a, b]$. Si $f'(c) > 0$, alors $t^* \in [a, c]$, sinon $t^* \in [c, b]$. On recommence ensuite la recherche avec l'intervalle $[a, c]$ ou l'intervalle $[c, b]$. Pour obtenir la solution avec un précision inférieur à e ($e > 0$), il faudrait en général N itérations, avec

$$\frac{b_0 - a_0}{2^N} < e.$$

3. Méthode de Newton-Raphson

On suppose ici que f est de classe \mathcal{C}^2 . On démarre la recherche à partir d'un point $x = x^{(0)}$. Ensuite, à chacune des itérations, on minimise la fonction

$$q(x) = f(x^{(k)}) + f'(x^{(k)})(x - x^{(k)}) + \frac{1}{2}f''(x^{(k)})(x - x^{(k)})^2 \approx f(x). \quad (7)$$

Le minimum est atteint alors au point $x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f'(x^{(k)})}{f''(x^{(k)})}$. La méthode de Newton marche bien si $f''(x) > 0$ dans $[a_0, b_0]$. Sinon, si f'' change de signe, la méthode de Newton peut échouer ou converger vers un minimum local.

Question: Écrire sous SCILAB (et visualiser les résultats) des fonctions qui calculent le minimum d'une fonction f sur un intervalle $[a, b]$ avec une précision e , et cela, avec chacune des quatre méthodes précédentes. Comparer les résultats pour les fonctions suivantes:

$$\begin{aligned} f_1(x) &= x^2 - 2 \sin x, & [a, b] &= [0, 2], & x^{(0)} &= 1, \\ f(x) &= x^2 + 2e^{-x}, & [a, b] &= [0, 1], & x^{(0)} &= 0.5, \\ f(x) &= -\frac{1}{x} + \cos x, & [a, b] &= [2, 4], & x^{(0)} &= 2.1. \end{aligned}$$