Magistère de mathématiques

TP4 – Moindres carrés et méthodes de gradient

Exercice 1. *Moindres carrés*

On souhaite déterminer la linéarisation de l'expression trigonométrique $\cos^5 x\,(1+\sin^3 x)$, c'est à dire les coefficients rationnels $(a_j)_{0\leq j\leq d}$ et $(b_j)_{1\leq j\leq d}$ tels que

$$\cos^5 x\,(1+\sin^3 x) = a_0 + \sum_{j=1}^{d} a_j \cos(jx) + b_j \sin(jx)$$

a. Considérer un entier N suffisamment grand et constituer le vecteur colonne F de taille N comme suit :

```
X = 2*pi/N*np.arange(N)
F = np.cos(X)**5*(1+np.sin(X)**3)
```

b. Définir une fonction `base(d,X)` prenant en argument un entier `d` supérieur ou égal à 1, et un vecteur colonne `X` de taille notée N, et renvoyant la matrice suivante

$$\mathtt{A} = \begin{pmatrix} 1 & \cos \mathtt{X}_1 & \cdots & \cos \mathtt{dX}_1 & \sin \mathtt{X}_1 & \cdots & \sin \mathtt{dX}_1 \\ 1 & \cos \mathtt{X}_2 & \cdots & \cos \mathtt{dX}_2 & \sin \mathtt{X}_2 & \cdots & \sin \mathtt{dX}_2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & \cos \mathtt{X}_\mathtt{N} & \cdots & \cos \mathtt{dX}_\mathtt{N} & \sin \mathtt{X}_\mathtt{N} & \cdots & \sin \mathtt{dX}_\mathtt{N} \end{pmatrix}$$

c. Pour des valeurs de `d` de plus en plus grandes, déterminer le vecteur `C` de taille `2d+1`, solution au sens des moindres carrés de l'équation $\mathtt{A\,C} = \mathtt{F}$. On utilisera la commande `np.linalg.lstsq(a,b,rcond=None)[0]` qui renvoie la solution x de $ax = b$ au sens des moindres carrés.

d. On considère désormais une valeur `d` pour laquelle la norme du résidu $\|\mathtt{A\,C} - \mathtt{F}\|$ est jugée suffisamment petite. Déterminer une expression rationnelle des coefficients de la solution retenue `C` et la linéarisation recherchée.

e. Déterminer numériquement la matrice symétrique définie positive intervenant dans l'équation normale.

f. Linéariser également l'expression $(1+\cos^3(2x)+\sin^3(2x))\cos^{10}(x)$.

Exercice 2. *Minimum d'une fonctionnelle quadratique strictement convexe*

Soit n un entier naturel non-nul et $J : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ une fonctionnelle prenant la forme

$$J(x) = \frac{1}{2}\langle Ax, x\rangle - \langle b, x\rangle, \tag{1}$$

où $b \in \mathbb{R}^n$ et $A \in S_n^{++}(\mathbb{R})$. Dans ce cadre, il est connu (cf. cours) que la fonctionnelle J admet un minimum global sur $\mathbb{R}^n$, atteint en un unique point $x \in \mathbb{R}^n$ solution de l'équation $\nabla J(x) = 0$ où $\nabla J(x) := Ax - b$.

a. On considère pour premier exemple les données suivantes :

$$b = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{20} \end{pmatrix}.$$

Calculer les premiers itérés $(x_k)_{0\leq k\leq 100}$ obtenus par la *méthode du gradient à pas fixe* (décrite à la fin du sujet), partant de l'initialisation $x_0 = {}^t(1,1) \in \mathbb{R}^2$. Représenter les itérations successives dans le plan $\mathbb{R}^2$. Pour le pas ρ, on choisira par exemple successivement les valeurs parmi $\{0.10, 1, 1.98\}$. Sur une autre figure on tracera également l'évolution du résidu $\|Ax_k - b\|_2$ en fonction de k pour chacun des cas.

b. Dans cette question et les suivantes, on se place en dimension $n = 20$ avec les données suivantes :

$$b = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad A = (n+1)^2 \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Tester de nouveau la convergence de l'algorithme du *gradient à pas fixe* en fonction de la valeur du pas ρ. Vérifier numériquement que la valeur du pas pour laquelle la vitesse de convergence semble maximale est

$$\rho_c = \tfrac{2}{\lambda_{\min}+\lambda_{\max}}, \text{ avec } \lambda_{\min} = \min(\operatorname{spec}(A)) \text{ et } \lambda_{\max} = \max(\operatorname{spec}(A)).$$

c. Retenir le choix $\rho = \rho_c$ et vérifier numériquement que la convergence est alors au plus géométrique, de raison $\frac{\kappa-1}{\kappa+1}$, où κ est le conditionnement de A en norme 2, à savoir ici $\kappa = \operatorname{cond}_2(A) = \lambda_{\max}/\lambda_{\min}$.

d. Dans la *méthode du gradient à pas optimal*, démontrer que le pas optimal ρ_k, solution d'un problème de minimisation monodimensionnel, est :

$$\rho_k = \frac{\langle R_k, R_k\rangle}{\langle AR_k, R_k\rangle}, \qquad \text{où } R_k = Ax_k - b.$$

e. Programmer la *méthode du gradient à pas optimal* pour le problème **b.**

f. Vérifier que l'algorithme converge au plus géométriquement, avec une raison égale à $\frac{\kappa-1}{\kappa+1}$.

g. Programmer la *méthode du gradient conjugué* pour le problème de la question **b.**

h. Vérifier numériquement que la méthode converge en réalité en au plus n itérations.

Catalogue d'algorithmes

Méthode du gradient à pas fixe $\rho > 0$

$$x_0 \in \mathbb{R}^n$$
$$x_{k+1} = x_k - \rho \nabla J(x_k).$$

Méthode du gradient à pas optimal

$$x_0 \in \mathbb{R}^n$$
$$\rho_k = \operatorname{argmin}_{\rho \in \mathbb{R}} J(x_k - \rho \nabla J(x_k)),$$
$$x_{k+1} = x_k - \rho_k \nabla J(x_k).$$

Méthode du gradient conjugué pour une fonctionnelle quadratique

Initialisation : $x_0 \in \mathbb{R}^n$
$r_0 = b - A \cdot x_0$ *(résidu initial)*
$p_0 = r_0$ *(direction de descente initiale)*
$\theta_0 = \langle p_0, r_0 \rangle$

Itérations : $k \geq 0$ $\alpha_k = \theta_k / \langle A p_k \, , \, p_k \rangle$ *(pas de descente)*
$x_{k+1} = x_k + \alpha_k \, p_k$ *(mise à jour de la solution)*
$r_{k+1} = r_k - \alpha_k \, A p_k$ *(résidu à l'itération $k+1$)*
$\theta_{k+1} = \langle r_{k+1}, r_{k+1} \rangle$
$\beta_{k+1} = \theta_{k+1} / \theta_k$
$p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_{k+1} \, p_k$ *(nouvelle direction de descente)*

Résultats

$$\cos^5(x)(1+\sin^3(x)) = \frac{1}{128}\Big[80\cos(x) + 40\cos(3x) + 8\cos(5x) + 6\sin(2x) + 2\sin(4x) - 2\sin(6x) - \sin(8x)\Big]$$

$$\begin{aligned}(1+\cos^3(2x)+\sin^3(2x))\cos^{10}(x) = \frac{1}{4096}\Big[&1683 + 2926\cos(2x) + 1936\cos(4x) + 1002\cos(6x) + 428\cos(8x) + 158\cos(10x) + 48\cos(12x) + 10\cos(14x) + \cos(16x)\\ &+ 286\sin(2x) + 286\sin(4x) + 78\sin(6x) - 78\sin(8x) - 90\sin(10x) - 42\sin(12x) - 10\sin(14x) - \sin(16x)\Big]\end{aligned}$$