

TRAVAUX PRATIQUES : Applications numériques

Exercice 1 : estimation du rayon spectral

On définit la forme quadratique $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ par :

$$f(u) = {}^t u A u$$

avec A matrice symétrique inversible.

1) - Pour quels vecteurs dans la sphère unité $S(1) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x\| = 1\}$, la fonction f atteint-elle son minimum, son maximum ? Donner alors la valeur de f correspondante. Combien admet-elle de minima, de maxima ?

2) - Pour quels vecteurs dans la boule unité $B(1) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x\| \leq 1\}$ la fonction f admet-elle son minimum, son maximum ? Quelle est alors la valeur de f correspondante ?

3) - On donne la matrice :

$$A = \begin{pmatrix} 10 & -4 & -4 \\ -4 & 10 & -2 \\ -4 & -2 & 4 \end{pmatrix}$$

Donner pour la matrice A , les vecteurs demandés dans la question précédente. on dispose des commandes : `[a,b]=eig(H)` ; qui retourne valeurs propres et vecteurs propres, et `norm()` qui retourne la norme euclidienne d'un vecteur ; voir l'aide en ligne.

4)* - Pouvez vous proposer une méthode itérative de recherche de la plus grande valeur propre d'une matrice symétrique définie positive, ainsi que d'un vecteur propre correspondant ?

Exercice 2 : résolution approchée d'un système linéaire par la méthode de Gauss-Seidel

Un centre distribue en électricité quatre zones différentes à partir de l'énergie électrique provenant de 4 centrales. La distribution provenant de chaque centrale est allouée entre les diverses zones selon un pourcentage fixé. Le tableau suivant fournit ces pourcentages ainsi que la demande en électricité de chaque zone.

	1	2	3	4	Demande
1	70%	10%	15%	5%	6 GWh
2	10%	70%	5%	15%	4 GWh
3	15%	5%	70%	10%	8 GWh
4	5%	15%	10%	70%	12 GWh

Le problème consiste à déterminer la production (en GWh) de chaque centrale, qui satisfasse correctement aux demandes des différentes zones.

1) - Modélisez le problème de façon à le réduire à la résolution, sous les contraintes $x_1, x_2, x_3, x_4 \geq 0$, du système :

$$\begin{cases} 70.x_1 + 10.x_2 + 15.x_3 + 5.x_4 & = 600 \\ 10.x_1 + 70.x_2 + 5.x_3 + 15.x_4 & = 400 \\ 15.x_1 + 5.x_2 + 70.x_3 + 10.x_4 & = 800 \\ 5.x_1 + 15.x_2 + 10.x_3 + 70.x_4 & = 1200 \end{cases}$$

- 2) - On note le système sous la forme matricielle $A.u = b$. Montrez que A est définie positive ; pour cela on calculera ses valeurs propres sous matlab à l'aide de la commande $\text{eig}(A)$.
- 3) On admet que les solutions du système sont positives. Reformuler le problème comme recherche du minimum d'une fonction quadratique que l'on déterminera.
- 4) Appliquer la méthode de Gauss-Seidel pour approcher une solution.

Exercice 3 : étude d'une réaction chimique

Dans une réaction chimique, l'évolution de la concentration C d'une substance en fonction du temps est souvent modélisée par une équation différentielle :

$$\frac{dC}{dt} = -kC^n$$

où k est une constante positive appelée *constante de la réaction* et n un entier égal (dans cet exercice) à 0,1 ou 2 appelé *ordre de la réaction*.

- 1) Montrer que cette équation différentielle a pour solutions pour chacune des 3 valeurs de n avec une concentration initiale C_0 pour $t = 0$:

pour $n = 0$, $C(t) = -kt + C_0$ pour $n = 1$, $C(t) = C_0 e^{-kt}$ pour $n = 2$, $C(t) = \frac{C_0}{C_0 kt + 1}$.

- 2) On considère une réaction particulière pour laquelle on cherche à déterminer k et n . Pour cela, on mesure la concentration C à différents instants, on obtient :

temps	0	7	18	27	37	56	102
concentration	34.83	32.14	28.47	25.74	23.14	18.54	11.04

Déterminer les paramètres k et n qui modélisent le mieux la réaction observée. Utiliser pour cela la commande `lsqcurvefit` de Matlab.

Correction

Exercice 1

1) - On cherche :

$$\min_{u, \|u\|=1} {}^t u A u$$

Avec les conditions de Lagrange, en posant comme contrainte égalitaire

$$\varphi(x_1, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^n x_i^2 - 1 = 0,$$

on a nécessairement en un extremum u ,

$$\exists \lambda \in \mathbb{R} \quad \nabla f(u) + \lambda \nabla \varphi(u) = 0$$

soit,

$$2Au + 2\lambda u = 0$$

(Le vecteur $\nabla \varphi(u)$ est non nul sur $S(1)$ et on vérifie donc la condition \overline{QC}_u de qualification des contraintes en tout $u \in S(1)$).

Ainsi un extremum est nécessairement un vecteur propre v_i associé à une valeur propre $\lambda_i = -\lambda$. Et, en un vecteur propre v_i .

$$f(v_i) = \lambda_i \|v_i\|^2 = \lambda_i$$

Par compacité, f admet un minimum et un maximum sur le cercle unité. Ainsi :

– Un minimum est atteint en tout vecteur propre unitaire associé à la plus petite valeur λ_- propre de A . La valeur minimale de f est λ_- .

– Un maximum est atteint en tout vecteur propre unitaire associé à la plus grande valeur propre λ_+ de A . La valeur maximale de f est λ_+ .

Il y a 2 minima (resp. maxima) de f sur le cercle unité lorsque la multiplicité de la plus petite (resp. grande) valeur propre est 1, et une infinité autrement. (Remarquons que puisque A est symétrique elle est diagonalisable et donc la multiplicité des valeurs propres égale la dimension des sous-espaces propres).

2) On doit ici chercher les extrema de f sous la contrainte inégalitaire

$$\psi(x_1, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^n x_i^2 - 1 \leq 0.$$

En un minimum les conditions nécessaires de K.K.T. s'écrivent :

$$\exists \mu \in \mathbb{R}_+ \quad \nabla f(u) + \mu \nabla \psi(u) = 0$$

soit,

$$Au + \mu u = 0 \text{ avec } \mu \geq 0$$

($\nabla \psi(u) \neq 0$ lorsque $\psi(u) = 0$, i.e. lorsque $u \in S(1)$, et on vérifie donc la condition \overline{QC}_u de qualification des contraintes en tout point $u \in B(1)$).

Ainsi un minimum u vérifie nécessairement :

– $\mu = 0$ et $Au = 0 \implies u = 0$, ou

– $\mu > 0$ et u est un vecteur propre associé à la valeur propre $\lambda_i = -\mu \leq 0$

Par compacité il existe un minimum de f sur $B(1)$, et donc :

– Si toutes les valeurs propres de A sont positives, (A définie positive) le minimum est $u = 0$, la valeur minimale est 0,

– sinon un minimum est tout vecteur propre unitaire associé à la plus petite valeur propre λ_- de A ; la valeur minimale est alors λ_- .

En un maximum on vérifie les mêmes conditions avec cependant (attention !) $\mu \leq 0$. La même étude montre que :

– Si toutes les valeurs propres de A sont négatives, le maximum est $u = 0$, la valeur maximale est 0,

– sinon un maximum est tout vecteur propre unitaire associé à la plus grande valeur propre λ_+ de A ; la valeur maximale est alors λ_+ .

3) On saisit le code :

```
>>A=[10 -4 -4 ; -4 10 -2 ; -4 -2 4];
>>[v,l]=eig(A)
```

on obtient pour valeurs propres :

```
0.5491
9.2029
14.2480
```

et pour vecteurs propres (unitaires !) :

```
0.4913  0.4320  -0.7563
0.3744  0.6793  0.6312
0.7864  -0.5932  0.1720
```

Ainsi les minima de f sur $S(1)$ sont $\pm^t(0.4913, 0.3744, 0.7864)$ en lequel la valeur de f est 0.5491, et les maxima sont $\pm^t(-0.7563, 0.6312, 0.1720)$ en lequel la valeur de f est 14.2480. Sur $B(1)$, f a même maxima est pour minimum $^t(0, 0, 0)$.

4) On peut adapter la méthode du gradient projeté à pas optimal en prenant :

$$u_{n+1} = P\left(u_n + \frac{\|\nabla f(u_n)\|^2}{\langle 2A \cdot \nabla f(u_n), \nabla f(u_n) \rangle} \nabla f(u_n)\right)$$

(on a changé le signe $-$ en $+$!!), et où $P : \mathbb{R}^2 \rightarrow B(1)$ est l'opérateur de projection sur la boule unité (fermé convexe non vide),

$$P(u) = u \text{ si } \|u\| = 1 \text{ et } P(u) = \frac{u}{\|u\|} \text{ sinon}$$

Le code matlab s'écrit :

```
N=100;
A=[10 -4 -4;-4 10 -2;-4 -2 4];
u=[0.5;0.5;0.5];
for i=1:N
    d=2*A*u;
    r=d'*d/((2*A*d)'*d);
    u=u+r*d;
    if norm(u)>1
        u=u/norm(u);
    end
end
u
u'*A*u
```

et nous retourne un vecteur propre unitaire associé à la plus grande valeur propre ainsi que cette dernière.

Exercice 3

- 1) La modélisation vient immédiatement en posant x_i la production de la centrale i (en GWh).
 - 2) Les valeurs propres sont : 50, 60, 70, 100. A est donc définie positive (en particulier A est inversible et le système admet une unique solution dans \mathbb{R}^4).
 - 3) Puisque A est symétrique définie positive la résolution du système est équivalente à la recherche du minimum de la fonction quadratique $f(u) = \frac{1}{2}u^t \cdot A \cdot u - b^t \cdot u$.
 - 4) Méthode de Gauss-Seidel :
- Sous Matlab taper dans un fichier `GS.m` :

```
b=[600 ; 400 ; 800 ; 1200];
u=[1,1,1,1];
N=6;
for i=1:N
    u(1)=(600-10*u(2)-15*u(3)-5*u(4))/70;
    u(2)=(400-10*u(1)-5*u(3)-15*u(4))/70;
    u(3)=(800-15*u(1)-5*u(2)-10*u(4))/70;
    u(4)=(1200-5*u(1)-15*u(2)-10*u(3))/70;
end
u
```

On obtient pour résultat ${}^t(5.6190, 1.0476, 7.9524, 15.3810)$ qui coïncide avec le résultat donné par matlab par la commande `inv(A)*b`.

Exercice 3

- 1) L'équation différentielle $C' = -k C^n$ est à variables séparables et s'écrit aussi $\frac{C'}{C^n} = -k$. Son intégration donne :

- pour $n = 0$, $C' = -k$ d'où $C = -kt + C_0$
- pour $n = 1$, $\frac{C'}{C} = -k$ d'où $\ln C = -kt + \ln C_0$ donc $C = C_0 e^{-kt}$
- pour $n = 2$, $\frac{C'}{C^2} = -k$ d'où $\frac{1}{C} = kt + \frac{1}{C_0}$ donc $C = \frac{C_0}{C_0 kt + 1}$

- 2) Utilisation de la fonction `lsqcurvefit`

```
t=[0 7 18 27 37 56 102] C=[34.83 32.14 28.47 25.74 23.14 18.54 11.04]
%% première hypothèse
[x1,resnorm,residual,exitflag]=lsqcurvefit(@C1,[0,0],t,C)
%% deuxième hypothèse
[x2,resnorm,residual,exitflag]=lsqcurvefit(@C2,[0,0],t,C)
%% troisième hypothèse
[x3,resnorm,residual,exitflag]=lsqcurvefit(@C3,[0,0],t,C)
```

Les fonction $C1$, $C2$ et $C3$ sont définies par :

```
function f=C1(x,t) f=-x(1)*t+x(2);
function f=C2(x,t) f=x(2)*exp(-x(1)*t);
```

```
function f=C3(x,t) f=x(2)./(1+x(1)*x(2)*t);
```

La deuxième hypothèse est la plus vraisemblable. En effet, c'est dans ce cas que la norme du vecteur "résidu" (donnée par `resnorm`) est la plus faible. La concentration est liée au temps par la relation :

$$C = 34.83 e^{-0.0112t}$$

Copyright : Jean-Philippe Préaux