CY Cergy Paris Université **Modélisation**
Master 2 Mathématiques **2024-2025**

Corrigé de l'aspect théorique du devoir à la maison N°2

1 Existence des configurations minimales

1.a. En tant que fraction rationnelle dont le dénominateur ne s'annule qu'en $r = 0$, la fonction V est bien définie et de classe $\mathcal{C}^\infty$ sur $]0, +\infty[$, avec

$$\forall r > 0,\, V'(r) = \frac{12}{r^{13}}\big(r^6 - 1\big).$$

La dérivée V' est donc strictement négative sur $]0, 1[$, s'annule en $r = 1$, et devient strictement positive sur $]1, +\infty[$. La fonction V admet ainsi un unique minimum en $r = 1$, qui vaut

$$\min_{r>0} V(r) = V(1) = -1.$$

b. Notons

$$\forall 1 \leq i < j \leq N,\, P_{i,j}(X) = X_j - X_i.$$

En tant qu'applications linéaires, les fonctions $P_{i,j}$ sont continues sur $(\mathbb{R}^3)^N$, de sorte que les sous-ensembles

$$P_{i,j}^{-1}\big(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\}\big) = \big\{X \in (\mathbb{R}^3)^N \text{ t.q. } X_i \neq X_j\big\},$$

sont ouverts. Sachant que

$$\Omega_N = \bigcap_{1\leq i<j\leq N} P_{i,j}^{-1}\big(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\}\big),$$

est l'intersection finie de ces images réciproques, le sous-ensemble Ω_N est ouvert dans $(\mathbb{R}^3)^N$.

c. Lorsque $X \in \Omega_N$, nous savons que les normes euclidiennes $\|X_i - X_j\|$ sont strictement positives. Comme la fonction V est bien définie sur $]0, +\infty[$, nous déduisons de la définition

$$LJ_N(X) = \sum_{1\leq i<j\leq N} V\big(\|X_i - X_j\|\big),$$

de l'énergie potentielle qu'elle est bien définie sur Ω_N.

Rappelons alors que l'application

$$N(Y) = \|Y\|^2,$$

est polynomiale en les coefficients du vecteur $Y \in \mathbb{R}^3$, de sorte qu'elle est de classe $\mathcal{C}^\infty$ sur $\mathbb{R}^3$. Comme la fonction racine carrée et la fonction V sont de classe $\mathcal{C}^\infty$ sur $]0, +\infty[$, et puisque

$$LJ_N(X) = \sum_{1\leq i<j\leq N} V\Big(\sqrt{\|X_i - X_j\|^2}\Big),$$

par composition, l'énergie potentielle LJ_N est de classe $\mathcal{C}^\infty$ sur Ω_N.

Nous déduisons de plus de la formule précédente que

$$\begin{cases} \forall X \in \Omega_N, \\ \forall H \in (\mathbb{R}^3)^N, \end{cases} \quad \begin{aligned} dLJ_N(X)(H) &= \sum_{k=1}^N d_{X_k} LJ_N(X)(H_k) \\ &= \sum_{k=1}^N \Bigg(\sum_{k<j\leq N} \frac{V'\big(\sqrt{\|X_k - X_j\|^2}\,\big)}{2\sqrt{\|X_k - X_j\|^2}}\, dN(X_k - X_j)(H_k) \\ &\qquad - \sum_{1\leq i<k} \frac{V'\big(\sqrt{\|X_i - X_k\|^2}\,\big)}{2\sqrt{\|X_i - X_k\|^2}}\, dN(X_i - X_k)(H_k) \Bigg). \end{aligned}$$

Sachant que

$$\forall Y \in \mathbb{R}^3, \forall h \in \mathbb{R}^3,\ N(Y+h) = \|Y\|^2 + 2\langle Y, h\rangle + \|h\|^2,$$

nous avons

$$dN(Y)(h) = 2\langle Y, h\rangle,$$

d'où l'expression finale

$$\begin{aligned} dLJ_N(X)(H) &= \sum_{k=1}^N \Bigg(\sum_{k<j\leq N} \frac{V'\big(\|X_k - X_j\|\big)}{\|X_k - X_j\|}\, \langle X_k - X_j, H_k\rangle \\ &\qquad - \sum_{1\leq i<k} \frac{V'\big(\|X_i - X_k\|\big)}{\|X_i - X_k\|}\, \langle X_i - X_k, H_k\rangle \Bigg) \\ &= \sum_{k=1}^N \sum_{i\neq k} \frac{V'\big(\|X_i - X_k\|\big)}{\|X_i - X_k\|}\, \langle X_k - X_i, H_k\rangle. \end{aligned}$$

2.a. Rappelons que

$$\forall r > 0,\ V(r) \geq -1,$$

de sorte que

$$\forall X \in \Omega_N,\ LJ_N(X) \geq \sum_{1\leq i<j\leq N} (-1) = -\sum_{i=1}^{N-1} \big(N - i\big).$$

Nous savons alors que

$$\sum_{i=1}^{N-1} i = \frac{(N-1)N}{2},$$

d'où la formule

$$LJ_N(X) \geq -(N-1)N + \frac{(N-1)N}{2} = -\frac{N(N-1)}{2}.$$

Comme cette inégalité est valable quel que soit le vecteur $X \in \Omega_N$, nous concluons que l'énergie potentielle est minorée sur Ω_N, et que sa borne inférieure satisfait

$$\mathcal{J}_N \geq -\frac{N(N-1)}{2}.$$

b. Pour $N = 2$, la formule précédente assure que

$$\mathcal{J}_2 \geq -1.$$

Nous pouvons alors poser

$$X_1^* = (0,0,0), \quad \text{et} \quad X_2^* = (1,0,0),$$

et vérifier que

$$LJ_2(X_1^*, X_2^*) = V\big(\|X_2^* - X_1^*\|\big) = V(1) = -1.$$

Cette propriété assure que

$$\mathcal{J}_2 = -1,$$

et que $(X_1^*, X_2^*) \in \Omega_2$ est un minimiseur de l'énergie potentielle LJ_2.

Nous remarquons de plus que ce minimiseur n'est pas unique, puisque tout couple de vecteurs $(X_1, X_2) \in \Omega_2$ tels que $\|X_2 - X_1\|$ est aussi un minimiseur.

c. Considérons les points

$$X_1^* = (0,0,0), \quad X_2^* = (1,0,0), \quad \text{et} \quad X_3^* = \Big(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, 0\Big),$$

qui forment un triangle équilatéral. Nous vérifions en effet que

$$\|X_3^* - X_1^*\| = \|X_2^* - X_1^*\| = \|X_3^* - X_2^*\| = 1.$$

Cette propriété permet d'établir que

$$LJ_3(X_1^*, X_2^*, X_3^*) = V\big(\|X_3^* - X_1^*\|\big) + V\big(\|X_2^* - X_1^*\|\big) + V\big(\|X_3^* - X_2^*\|\big) = 3V(1) = -3.$$

D'après la question 2.a, nous savons que

$$\mathcal{J}_3 \geq -3,$$

et nous concluons donc que

$$\mathcal{J}_3 = -3,$$

et que (X_1^*, X_2^*, X_3^*) est un minimiseur de l'énergie potentielle LJ_3. Nous observons également que les vecteurs Z_1, Z_2 et Z_3 qui minimisent cette énergie potentielle forment nécessairement un triangle équilatéral.

d. Considérons les points

$$X_1^* = \frac{1}{2\sqrt{2}}\big(1,1,1\big), \quad X_2^* = \frac{1}{2\sqrt{2}}\big(1,-1,-1\big), \quad X_3^* = \frac{1}{2\sqrt{2}}\big(-1,1,-1\big),$$

et

$$X_4^* = \frac{1}{2\sqrt{2}}\big(-1,-1,1\big),$$

qui forment un tétraèdre régulier. Nous pouvons en effet calculer

$$\|X_4^* - X_1^*\| = \|X_4^* - X_2^*\| = \|X_4^* - X_3^*\| = \|X_3^* - X_1^*\| = \|X_3^* - X_2^*\| = \|X_2^* - X_1^*\| = 1,$$

ce qui nous permet de vérifier que

$$LJ_4(X_1^*, X_2^*, X_3^*, X_4^*) = 6V(1) = -6.$$

Comme la question 2.b assure que

$$\mathcal{J}_4 \geq -6,$$

nous concluons que

$$\mathcal{J}_4 = -6,$$

et que $(X_1^*, X_2^*, X_3^*, X_4^*)$ est un minimiseur de l'énergie potentielle LJ_4. Nous vérifions aussi que les vecteurs Z_1, Z_2, Z_3 et Z_4 qui minimisent cette énergie forment nécessairement un tétraèdre régulier.

3.a. D'après la question 1.a, la dérivée V' de la fonction V est strictement positive sur l'intervalle $]1, +\infty[$. Sachant que

$$V(r) \underset{r \to +\infty}{\to} 0,$$

nous déduisons de la stricte croissance de la fonction V sur $[1, +\infty[$ que

$$\forall r \geq 1,\ V(r) < 0.$$

Pour $p = 1$, il découle de la formule de l'énergie potentielle LJ_N que

$$LJ_N\big(U_1, V_1, \ldots, V_{N-1}\big) = \sum_{j=1}^{N-1} V\big(\|V_j - U_1\|\big) + LJ_{N-1}\big(V_1, \ldots, V_{N-1}\big).$$

Comme

$$\forall 1 \leq j \leq N-1,\ \|V_j - U_1\| \geq 1,$$

nous savons que

$$\forall 1 \leq j \leq N-1,\ V\big(\|V_j - U_1\|\big) < 0,$$

ce qui suffire à établir que

$$LJ_N\big(U_1, V_1, \ldots, V_{N-1}\big) < LJ_{N-1}\big(V_1, \ldots, V_{N-1}\big) = LJ_{N-1}(V).$$

Pour $p = N-1$, nous avons de même

$$LJ_N\big(U_1, \ldots, U_{N-1}, V_1\big) = LJ_{N-1}\big(U_1, \ldots, U_{N-1}\big) + \sum_{j=1}^{N-1} V\big(\|U_j - V_1\|\big) < LJ_{N-1}(U),$$

puisque

$$\forall 1 \leq j \leq N-1,\ \|U_j - V_1\| \geq 1.$$

Enfin pour $1 < p < N-1$, nous écrivons

$$LJ_N\big(U, V\big) = LJ_p\big(U_1, \ldots, U_p\big) + \sum_{j=1}^{p} \sum_{k=1}^{N-p} V\big(\|U_j - V_k\|\big) + LJ_{N-p}\big(V_1, \ldots, V_{N-p}\big),$$

de sorte que, comme pour $p = 1$ et $p = N-1$,

$$LJ_N\big(U_1, \ldots, U_p, V_1, \ldots, V_{N-p}\big) < LJ_p(U) + LJ_{N-p}(V).$$

b. Quels que soient $X \in \Omega_N$ et $Z \in \mathbb{R}^3$, nous vérifions que

$$\forall i \neq j,\ X_i - Z - \big(X_j - Z\big) = X_i - X_j \neq 0,$$

de sorte que le vecteur $T_Z(X)$ appartient à l'ouvert Ω_N. De plus, nous calculons

$$LJ_N\big(T_Z(X)\big) = \sum_{1 \leq i < j \leq N} V\big(\|X_i - Z - (X_j - Z)\|\big) = \sum_{1 \leq i < j \leq N} V\big(\|X_i - X_j\|\big) = LJ_N(X),$$

ce qui signifie que l'énergie potentielle LJ_N est bien invariante par translation.

c. Nous savons qu'il existe un vecteur $U \in \mathbb{R}^3$ tel que

$$\forall 1 \leq j \leq N-1,\ \big\|Y_j^{(N-1)} - U\big\| \geq 1.$$

Nous déduisons donc de la question 3.a que

$$\mathcal{J}_N \leq LJ_N\big(U, Y_1^{(N-1)}, \ldots, Y_{N-1}^{(N-1)}\big) < LJ_{N-1}(Y^{(N-1)}).$$

Nous raisonnons de même pour $2 \leq p \leq N-2$. Nous savons qu'il existe un vecteur $Z \in \mathbb{R}^3$ tel que

$$\forall 1 \leq j \leq p, \forall 1 \leq k \leq N-p,\ \big\|Y_j^{(p)} - (Y_k^{(N-p)} - Z)\big\| \geq 1,$$

de sorte que par la question 3.a,

$$\mathcal{J}_N \leq LJ_N\big(Y_1^{(p)}, \ldots, Y_p^{(p)}, Y_1^{(N-p)} - Z, \ldots, Y_{N-p}^{(N-p)} - Z\big) < LJ_p\big(Y^{(p)}\big) + LJ_{N-p}\big(T_Z(Y^{(p)})\big).$$

Il résulte donc de la question 3.b que

$$\mathcal{J}_N < LJ_p(Y^{(p)}) + LJ_{N-p}(Y^{(N-p)}).$$

d. Sachant que

$$\forall 2 \leq p \leq N-1,\ \mathcal{J}_p = LJ_p\big(Y^{(p)}\big),$$

nous déduisons de la question 3.c que

$$\mathcal{J}_N < \mathcal{J}_p + \mathcal{J}_{N-p},$$

lorsque $2 \leq p \leq N-2$. Pour $p = 1$, nous avons de même

$$\mathcal{J}_N < \mathcal{J}_{N-1} = \mathcal{J}_{N-1} + \mathcal{J}_1,$$

avec la convention que $\mathcal{J}_1 = 0$.

4.a. Par définition de la borne inférieure $\mathcal{J}_N$, nous savons qu'il existe une suite $(Y^{(n)})_{n\geq 0}$ de Ω_N telle que

$$\forall n \geq 0,\ \mathcal{J}_N \leq LJ_N\big(Y^{(n)}\big) \leq \mathcal{J}_N + \frac{1}{2^n}.$$

Nous posons alors

$$\forall n \geq 0,\ \forall 1 \leq i \leq N,\ X_i^{(n)} = Y_i^{(n)} - Y_1^{(n)},$$

de sorte que le vecteur $X^{(n)} = (X_1^{(n)}, \ldots, X_N^{(n)})$ est égal à

$$X^{(n)} = T_{Y_1^{(n)}}\big(Y^{(n)}\big).$$

La question 3.b assure donc que le vecteur $X^{(n)}$ reste dans l'ouvert Ω_N, et que

$$\forall n \geq 0,\ \mathcal{J}_N \leq LJ_N\big(X^{(n)}\big) \leq \mathcal{J}_N + \frac{1}{2^n}.$$

De plus, ce vecteur satisfait par définition

$$\forall n \geq 0,\ X_1^{(n)} = 0.$$

b. Nous avons

$$\forall n \geq 0, \sum_{1 \leq k < \ell < N} V\big(\|X_\ell^{(n)} - X_k^{(n)}\|\big) = LJ_N\big(X^{(n)}\big) \leq \mathcal{J}_N + \frac{1}{2^n} \leq \mathcal{J}_N + 1.$$

Sachant que

$$\forall 1 \leq k < \ell < N, V\big(\|X_\ell^{(n)} - X_k^{(n)}\|\big) \geq -1,$$

par la question 1.a, nous obtenons

$$\forall 1 \leq i < j \leq N, V\big(\|X_j^{(n)} - X_i^{(n)}\|\big) \leq \mathcal{J}_N + 1 + \sum_{\substack{1 \leq k < \ell < N \\ i \neq k, j \neq \ell}} 1 = \mathcal{J}_N + \sum_{1 \leq k < \ell \leq N} 1.$$

Sachant que

$$\sum_{1 \leq k < \ell \leq N} 1 = \frac{(N-1)N}{2},$$

d'après la question 2.a, nous concluons que

$$V\big(\|X_j^{(n)} - X_i^{(n)}\|\big) \leq \mathcal{J}_N + \frac{N(N-1)}{2}.$$

c. D'après la question 1.a, la fonction V est strictement décroissante sur $]0, 1[$. Sachant que

$$V(r) = \frac{1}{r^{12}} - \frac{2}{r^6} \underset{r \to 0}{\to} +\infty,$$

il existe un nombre strictement positif ρ_N tel que

$$\forall 0 < r < \rho_N, V(r) > \mathcal{J}_N + \frac{N(N-1)}{2}.$$

Nous déduisons donc de la question 4.b que

$$\forall 1 \leq i < j \leq N, \big\|X_j^{(n)} - X_i^{(n)}\big\| \geq \rho_N.$$

5.a. Nous raisonnons par récurrence sur $2 \leq k \leq N$. Au rang $k = 2$, soit la suite $(X_2^{(n)})_{n \geq 0}$ est bornée, soit elle n'est pas bornée. Dans le premier cas, il existe une extraction $\phi_2 : \mathbb{N} \to \mathbb{N}$ et un vecteur $X_2^\infty \in \mathbb{R}^3$ tels que

$$X_2^{(\phi_2(n))} \underset{n \to +\infty}{\to} X_2^\infty.$$

Dans le second cas, il existe une extraction $\phi_2 : \mathbb{N} \to \mathbb{N}$ telle que

$$\big\|X_2^{(\phi_2(n))}\big\| \underset{n \to +\infty}{\to} +\infty.$$

Supposons alors avoir construit les extractions $\phi_j : \mathbb{N} \to \mathbb{N}$ jusqu'au rang $j = k - 1$. Au rang k, soit la suite $(X_k^{(\phi_2 \circ \phi_3 \circ \ldots \circ \phi_{k-1}(n))})_{n \geq 0}$ est bornée, soit elle n'est pas bornée. Dans le premier cas, il existe à nouveau une extraction $\phi_k : \mathbb{N} \to \mathbb{N}$ et un vecteur $X_k^\infty \in \mathbb{R}^3$ tels que

$$X_k^{(\phi_2 \circ \phi_3 \circ \ldots \circ \phi_k(n))} \underset{n \to +\infty}{\to} X_k^\infty,$$

tandis que, dans le second cas, il existe une extraction $\phi_k : \mathbb{N} \to \mathbb{N}$ telle que

$$\big\| X_k^{(\phi_2 \circ \phi_3 \circ \ldots \circ \phi_k(n))} \big\| \underset{n \to +\infty}{\to} +\infty.$$

Par récurrence sur $2 \leq k \leq N$, nous pouvons donc construire les extractions ϕ_k qui satisfont les propriétés recherchées.

b. Par construction, chacune des extractions $\phi_2 \circ \phi_3 \circ \ldots \circ \phi_k$ pour $2 \leq k \leq N$ est une extraction de l'extraction φ. Il résulte donc de la question 5.a que, quel que soit $2 \leq k \leq N$, ou bien

$$X_k^{(\varphi(n))} \underset{n \to +\infty}{\to} X_k^\infty,$$

ou bien

$$\big\| X_k^{(\varphi(n))} \big\| \underset{n \to +\infty}{\to} +\infty.$$

Dans le premier cas, l'entier k est dans I ; dans le second cas, il est dans J, de sorte que les cardinaux de ces ensembles satisfont

$$p + q = \mathrm{Card}\big\{2, \ldots, N\big\} = N - 1.$$

c. Par définition de l'énergie potentielle LJ_N, nous avons

$$\begin{aligned} LJ_N\big(X^{(\varphi(n))}\big) = & LJ_{p+1}\big(0, X_{i_1}^{(\varphi(n))}, \ldots, X_{i_p}^{(\varphi(n))}\big) + LJ_{N-p-1}\big(X_{j_1}^{(\varphi(n))}, \ldots, X_{j_{N-p-1}}^{(\varphi(n))}\big) \\ & + \sum_{k=1}^{p} \sum_{\ell=1}^{N-p-1} V\big(\| X_{i_k}^{(\varphi(n))} - X_{j_\ell}^{(\varphi(n))} \|\big) + \sum_{\ell=1}^{N-p-1} V\big(\| X_{j_\ell}^{(\varphi(n))} \|\big). \end{aligned}$$

Rappelons alors que

$$V(r) \underset{r \to +\infty}{\to} 0.$$

Sachant que

$$\forall 1 \leq \ell \leq N-p-1,\ \| X_{j_\ell}^{(\varphi(n))} \| \underset{n \to +\infty}{\to} +\infty, \text{ et } \forall 1 \leq k \leq p,\ \| X_{i_k}^{(\varphi(n))} - X_{j_\ell}^{(\varphi(n))} \| \underset{n \to +\infty}{\to} +\infty,$$

nous obtenons

$$LJ_N\big(X^{(\varphi(n))}\big) - LJ_{p+1}\big(0, X_{i_1}^{(\varphi(n))}, \ldots, X_{i_p}^{(\varphi(n))}\big) - LJ_{N-p-1}\big(X_{j_1}^{(\varphi(n))}, \ldots, X_{j_p}^{(\varphi(n))}\big) \underset{n \to +\infty}{\to} 0.$$

d. Par définition des bornes inférieures $\mathcal{J}_N$, nous pouvons écrire

$$LJ_{p+1}\big(0, X_{i_1}^{(\varphi(n))}, \ldots, X_{i_p}^{(\varphi(n))}\big) + LJ_{N-p-1}\big(X_{j_1}^{(\varphi(n))}, \ldots, X_{j_p}^{(\varphi(n))}\big) \geq \mathcal{J}_{p+1} + \mathcal{J}_{N-p-1},$$

de sorte que

$$\begin{aligned} LJ_N\big(X^{(\varphi(n))}\big) \geq & \mathcal{J}_{p+1} + \mathcal{J}_{N-p-1} + LJ_N\big(X^{(\varphi(n))}\big) - LJ_{p+1}\big(0, X_{i_1}^{(\varphi(n))}, \ldots, X_{i_p}^{(\varphi(n))}\big) \\ & - LJ_{N-p-1}\big(X_{j_1}^{(\varphi(n))}, \ldots, X_{j_p}^{(\varphi(n))}\big). \end{aligned}$$

Comme

$$LJ_N\big(X^{(\varphi(n))}\big) \underset{n \to +\infty}{\to} \mathcal{J}_N,$$

par la question 4.a, nous déduisons de la question 5.c que

$$\mathcal{J}_N \geq \mathcal{J}_{p+1} + \mathcal{J}_{N-p-1}.$$

e. Nous avons établi à la question 3.d que, lorsque $0 \leq q \leq N-2$,

$$\mathcal{J}_N < \mathcal{J}_{q+1} + \mathcal{J}_{N-q-1}.$$

Sachant que $0 \leq p \leq N-1$, il résulte donc de l'inégalité de la question 5.d que

$$p = N-1.$$

f. Nous déduisons des questions 5.a, 5.b et 5.e qu'il existe des vecteurs $(X_k^\infty)_{2\leq k\leq N}$ tels que

$$\forall 2 \leq k \leq N,\ X_k^{(\varphi(n))} \underset{n\to+\infty}{\to} X_k^\infty.$$

Sachant que

$$\forall n \geq 0,\ \forall 2 \leq k \leq N,\ \big\|X_k^{(\varphi(n))}\big\| \geq \rho_N,$$

et

$$\forall n \geq 0,\ \forall 2 \leq i < j \leq N,\ \big\|X_j^{(\varphi(n))} - X_i^{(\varphi(n))}\big\| \geq \rho_N,$$

par la question 4.c, nous obtenons

$$\forall 1 \leq i < j \leq N,\ \big\|X_j^\infty - X_i^\infty\big\| \geq \rho_N > 0,$$

où nous avons posé $X_1^\infty = 0$, de sorte que le vecteur $X^\infty = (X_1\infty, \dots, X_N^\infty)$ appartient à l'ouvert Ω_N. Comme

$$\forall n \geq 0,\ \mathcal{J}_N \leq LJ_N\big(X^{(\varphi(n))}\big) \leq \mathcal{J}_N + \frac{1}{2^{\varphi(n)}},$$

la continuité de l'énergie potentielle LJ_N sur cet ouvert garantit que

$$LJ_N\big(X^\infty\big) = \mathcal{J}_N,$$

soit que le vecteur X^∞ est une configuration minimale pour cette énergie potentielle. Par récurrence, nous concluons que, quel que soit l'entier $N \geq 2$, il existe une configuration minimale $Y^{(N)} \in \Omega_N$ telle que

$$\mathcal{J}_N = LJ_N\big(Y^{(N)}\big).$$

2 Méthode de la plus forte pente

1.a. Étant donné un nombre $\alpha > 0$, considérons la fonction Φ définie par

$$\forall t \in \mathbb{R},\ \Phi(t) = F\big(Z - \alpha t \nabla F(Z)\big).$$

Par composition, cette fonction est bien définie et de classe $\mathcal{C}^1$ sur $\mathbb{R}$, et elle satisfait

$$\forall t \in \mathbb{R},\ \Phi'(t) = -\alpha\big\langle \nabla F\big(Z - \alpha t \nabla F(Z)\big), \nabla F(Z)\big\rangle.$$

Comme

$$\Phi(1) = \Phi(0) + \int_0^1 \Phi'(t)\,dt = \Phi(0) + \Phi'(0) + \int_0^1 \big(\Phi'(t) - \Phi'(0)\big)\,dt,$$

nous obtenons

$$\begin{aligned} F\big(Z - \alpha\nabla F(Z)\big) =& F(Z) - \alpha\big\langle \nabla F(Z), \nabla F(Z)\big\rangle \\ & - \alpha\int_0^1 \Big(\big\langle \nabla F\big(Z - \alpha t\nabla F(Z)\big), \nabla F(Z)\big\rangle - \big\langle \nabla F(Z), \nabla F(Z)\big\rangle\Big)\,dt, \end{aligned}$$

soit

$$F\big(Z-\alpha\nabla F(Z)\big)=F(Z)-\alpha\big\|\nabla F(Z)\big\|^2 \\ -\alpha\int_0^1\big\langle\nabla F\big(Z-\alpha t\nabla F(Z)\big)-\nabla F(Z),\nabla F(Z)\big\rangle\,dt.$$

b. Nous combinons l'inégalité de Cauchy Schwarz et le fait que le gradient ∇F est globalement lipschitzien sur $\mathbb{R}^M$ pour arriver à l'inégalité

$$\forall\alpha>0,\forall 0\le t\le 1,\ \Big|\big\langle\nabla F\big(Z-\alpha t\nabla F(Z)\big)-\nabla F(Z),\nabla F(Z)\big\rangle\Big| \\ \le\big\|\nabla F\big(Z-\alpha t\nabla F(Z)\big)-\nabla F(Z)\big\|\,\big\|\nabla F(Z)\big\|\le C\alpha t\big\|\nabla F(Z)\big\|^2,$$

de sorte que

$$\int_0^1\big\langle\nabla F\big(Z-\alpha t\nabla F(Z)\big)-\nabla F(Z),\nabla F(Z)\big\rangle\,dt\le C\alpha\big\|\nabla F(Z)\big\|^2\int_0^1 t\,dt=\frac{C\,\alpha}{2}\big\|\nabla F(Z)\big\|^2.$$

Il découle donc de la question 1.a que

$$F\big(Z-\alpha\nabla F(Z)\big)\le F(Z)+\alpha\Big(\frac{C\,\alpha}{2}-1\Big)\big\|\nabla F(Z)\big\|^2,$$

d'où, pour $0<C\alpha/2<1-\beta$,

$$F\big(Z-\alpha\nabla F(Z)\big)<F(Z)-\beta\alpha\big\|\nabla F(Z)\big\|^2.$$

Cette inégalité est donc bien valable lorsque $0<\alpha<2(1-\beta)/C$.

c. Nous raisonnons par récurrence sur $p\ge 0$. Au rang $p=0$, le vecteur Z_0 est bien défini. Supposons alors que les vecteurs Z_q soient bien définis pour $0\le q\le p$. Au rang $p+1$, deux cas se présentent. Si $\nabla F(Z_p)=0$, alors le vecteur $Z_{p+1}=Z_p$ est bien défini. Sinon, il résulte de la question 1.b que

$$\forall 0<\alpha<\frac{2(1-\beta)}{C},\ F\big(Z_p-\alpha\nabla F(Z_p)\big)<F(Z_p)-\beta\alpha\big\|\nabla F(Z_p)\big\|^2.$$

Lorsque $a<2(1-\beta)/C$, $\ell=0$ est donc le plus petit entier $k\ge 0$ tel que le nombre $a\,\rho^k$ satisfait la condition d'Armijo. Nous posons donc $\alpha_p=a$ et le vecteur Z_{p+1} est bien défini par

$$Z_{p+1}=Z_p-\alpha\nabla F(Z_p).$$

Si $a\ge 2(1-\beta)/C$, il existe un entier $k\ge 1$ tel que

$$a\,\rho^{k-1}\ge\frac{2(1-\beta)}{C},\quad\text{et}\quad\frac{2(1-\beta)}{C}>a\,\rho^k\ge\frac{2\rho(1-\beta)}{C},$$

auquel cas, d'après la question 1.b, la condition d'Armijo est satisfaite pour

$$\alpha_p=a\,\rho^{\ell},$$

avec $0\le\ell\le k$. Le vecteur Z_{p+1} est alors bien défini par l'expression

$$Z_{p+1}=Z_p-\alpha\nabla F(Z_p),$$

ce qui conclut la récurrence sur $p\ge 0$. Dans tous les cas, nous vérifions de plus que

$$\alpha_p\ge\min\Big\{a,\frac{2\rho(1-\beta)}{C}\Big\}.$$

2.a. Soit $p \geq 0$. Par définition de la suite $(Z_p)_{p\geq 0}$, deux cas se présentent. Lorsque $\nabla F(Z_p) = 0$, nous avons $Z_{p+1} = Z_p$, d'où l'égalité

$$F(Z_{p+1}) = F(Z_p).$$

Sinon le vecteur Z_{p+1} satisfait par définition la condition d'Armijo

$$F\big(Z_{p+1}\big) < F\big(Z_p\big) - \beta\alpha_p\big\|\nabla F(Z_p)\big\|^2,$$

ce qui induit que

$$F(Z_{p+1}) < F(Z_p),$$

puisque $\alpha_p > 0$ et $\beta > 0$. Dans les deux cas, nous avons donc

$$F(Z_{p+1}) \leq F(Z_p),$$

ce qui assure la décroissance de la suite $(F(Z_p))_{p\geq 0}$.

b. La fonction F est supposée minorée sur $\mathbb{R}^M$, donc la suite $(F(Z_p))_{p\geq 0}$ est-elle aussi minorée. D'après la question 2.a, elle est décroissante, ce qui garantit qu'elle est convergente.

c. Par définition de la suite $(Z_p)_{p\geq 0}$, deux cas se présentent. Ou bien il existe un entier $p_0 \geq 0$ telle que

$$\nabla F(Z_{p_0}) = 0,$$

auquel cas

$$\forall p \geq p_0,\ Z_p = Z_{p_0},$$

d'où la convergence

$$\nabla F(Z_p) \underset{p\to+\infty}{\to} \nabla F(Z_{p_0}) = 0.$$

Sinon tous les termes de la suite $(Z_p)_{p\geq 0}$ satisfont la condition d'Armijo

$$\forall p \geq 0,\ F\big(Z_{p+1}\big) < F\big(Z_p\big) - \beta\alpha_p\big\|\nabla F(Z_p)\big\|^2.$$

Comme la suite $(F(Z_p))_{p\geq 0}$ est convergente, il s'ensuit que

$$\limsup_{p\to+\infty} \beta\alpha_p\big\|\nabla F(Z_p)\big\|^2 \leq 0.$$

Sachant que $\beta > 0$, et que

$$\forall p \geq 0,\ \alpha_p \geq \min\Big\{a, \frac{2\rho(1-\beta)}{C}\Big\} > 0,$$

nous concluons que

$$\big\|\nabla F(Z_p)\big\|^2 \underset{p\to+\infty}{\to} 0,$$

soit que

$$\nabla F(Z_p) \underset{p\to+\infty}{\to} 0.$$