Algorithme du gradient à pas optimal

Leçons : 232, *215, 219, 226, 229*

[HU], exercice II.8
[X-ENS Al3], exercice 2.35

Théorème

Soient $A \in \mathcal{S}_n^{++}(\mathbb{R})$ et $b \in \mathbb{R}^n$; on veut minimiser $f : x \mapsto \frac{1}{2}\langle Ax, x\rangle + \langle b, x\rangle$, quand x parcourt $\mathbb{R}^n$.
Il existe une unique solution à ce problème, et elle est caractérisée par $\nabla f(\overline{x}) = 0$.
De plus, l'algorithme défini par $\begin{cases} x_0 \in \mathbb{R}^n \\ \forall k \in \mathbb{N}, x_{k+1} = x_k + t_k d_k \end{cases}$, où $d_k = -\nabla f(x_k)$ et où t_k est l'unique réel minimisant la fonction $t \mapsto f(x_k + td_k)$, converge vers $\overline{x}$.

Démonstration :

1. Soit $\overline{x}$ un point minimal, alors nécessairement $\nabla f(\overline{x}) = 0$.
Or, pour tous $x, h \in \mathbb{R}^n$:
$$\begin{aligned} f(x+h) &= \frac{1}{2}\langle A(x+h), x+h\rangle + \langle b, x+h\rangle \\ &= \frac{1}{2}\langle Ax, x\rangle + \frac{1}{2}\langle Ah, x\rangle + \frac{1}{2}\langle Ax, h\rangle + \frac{1}{2}\langle Ah, h\rangle + \langle b, x\rangle + \langle b, h\rangle \\ &= f(x) + \langle Ax, h\rangle + \langle b, h\rangle + \frac{1}{2}\langle Ah, h\rangle \quad \text{(car } A \text{ est symétrique)} \\ &= f(x) + \langle Ax + b, h\rangle + o(\|h\|) \end{aligned}$$
De ce calcul, il vient notamment que f est différentiable [1] et que $\forall x \in \mathbb{R}^n, \nabla f(x) = Ax + b$.
Mais A étant symétrique définie positive, f est strictement convexe et on en déduit : $\overline{x} = -A^{-1}b$.
Procédons alors au calcul de la valeur optimale :
$$\overline{f} := f(\overline{x}) = \frac{1}{2}\langle -b, -A^{-1}b\rangle + \langle b, -A^{-1}b\rangle = \frac{1}{2}\langle A^{-1}b, b\rangle - \langle A^{-1}b, b\rangle = -\frac{1}{2}\langle A^{-1}b, b\rangle$$
2. Soit $k \in \mathbb{N}$; on suppose que $d_k \neq 0$, car sinon $Ax_k = -b$ et alors l'algorithme a convergé en temps fini, et on n'a plus rien à dire.
3. On va maintenant calculer t_k.
Pour $t \in \mathbb{R}$, on pose $g(t) := f(x_k + td_k) = f(x_k) + \langle \underbrace{Ax_k + b}_{=-d_k}, td_k\rangle + \frac{1}{2}\langle Atd_k, td_k\rangle$.
Et donc, $g(t) = f(x_k) - t\|d_k\|^2 + \frac{t^2}{2}\langle Ad_k, d_k\rangle$.
Ainsi [2], g atteint son minimum en $t_k = \frac{\|d_k\|^2}{\langle Ad_k, d_k\rangle}$ (on rappelle que $d_k \neq 0$, assurant que $\langle Ad_k, d_k\rangle \neq 0$, étant donné que A est symétrique définie positive).
4. Calculons l'erreur commise entre $f(x_k)$ et $\overline{f}$.
$$f(x_{k+1}) = f(x_k + t_k d_k) = f(x_k) - \frac{\|d_k\|^4}{\langle Ad_k, d_k\rangle} + \frac{1}{2}\frac{\|d_k\|^4}{\langle Ad_k, d_k\rangle} = f(x_k) - \frac{1}{2}\frac{\|d_k\|^4}{\langle Ad_k, d_k\rangle}$$
$$f(x_{k+1}) - \overline{f} = \left(f(x_k) - \overline{f}\right) - \frac{1}{2}\frac{\|d_k\|^4}{\langle Ad_k, d_k\rangle} = \left(f(x_k) - \overline{f}\right)\left(1 - \frac{1}{2\left(f(x_k) - \overline{f}\right)}\frac{\|d_k\|^4}{\langle Ad_k, d_k\rangle}\right)$$
Mais en fait, $\langle A^{-1}d_k, d_k\rangle = \langle A^{-1}(Ax_k + b), Ax_k + b\rangle = \langle x_k, Ax_k\rangle + \langle x_k, b\rangle + \underbrace{\langle A^{-1}b, Ax_k\rangle}_{=\langle b, x_k\rangle} + \langle A^{-1}b, b\rangle$
$$= 2\left(\frac{1}{2}\langle Ax_k, x_k\rangle + \langle b, x_k\rangle - \overline{f}\right) = 2\left(f(x_k) - \overline{f}\right)$$

1. En même temps, f est polynomiale, donc la différentiabilité était déjà évidente.
2. Je trouvais que le fait d'invoquer directement la formule bien connue des polynômes du 2nd degré était préférable à la dérivation, car cela permet d'aller plus vite, ce qui n'est pas négligeable sur ce développement.

On en déduit alors que : $f(x_{k+1}) - \overline{f} = \left(f(x_k) - \overline{f}\right)\left(1 - \dfrac{\|d_k\|^4}{\langle A^{-1}d_k, d_k\rangle\langle Ad_k, d_k\rangle}\right)$.

Lemme (*Inégalité de Kantorovitch*[3])

Soit $A \in \mathcal{S}_n^{++}(\mathbb{R})$, dont λ_1 et λ_n sont les plus petite et grande valeurs propres.

Alors $\forall x \in \mathbb{R}^n, \langle Ax, x\rangle\langle A^{-1}x, x\rangle \leqslant \dfrac{1}{4}\left(\sqrt{\dfrac{\lambda_1}{\lambda_n}} + \sqrt{\dfrac{\lambda_n}{\lambda_1}}\right)\|x\|^4$.[4]

Démonstration du lemme :

En notant $x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$ dans une base orthonormée de vecteurs propres de A[5], on fait les calculs suivants :

$$\langle Ax, x\rangle\langle A^{-1}x, x\rangle = \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i x_i^2\right)\left(\sum_{i=1}^n \frac{1}{\lambda_i} x_i^2\right) \underset{\substack{\text{Cauchy-}\\\text{Schwarz}}}{\geqslant} \left(\sum_{i=1}^n \frac{\sqrt{\lambda_i}}{\sqrt{\lambda_i}} x_i^2\right)^2 = \left(\sum_{i=1}^n x_i^2\right)^2 \geqslant 0$$

Mais comme on sait[6] que $\sqrt{ab} \leqslant \dfrac{1}{2}(a+b)$:

$$\sqrt{\langle Ax, x\rangle\langle A^{-1}x, x\rangle} = \sqrt{\frac{\lambda_1}{\lambda_n}}\sqrt{\left(\sum_{i=1}^n \frac{\lambda_i}{\lambda_1} x_i^2\right)\left(\sum_{i=1}^n \frac{\lambda_n}{\lambda_i} x_i^2\right)} \leqslant \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\lambda_1}{\lambda_n}}\sum_{i=1}^n \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} + \frac{\lambda_n}{\lambda_i}\right) x_i^2$$

On peut montrer que $\alpha : x \mapsto \dfrac{x}{\lambda_1} + \dfrac{\lambda_n}{x}$ est décroissante sur $\left(\lambda_1, \sqrt{\lambda_1\lambda_n}\right)$ et croissante sur $\left(\sqrt{\lambda_1\lambda_n}, \lambda_n\right)$.[7]

Toujours est-il que α admet son maximum en λ_1 ou en λ_n ; mais $\alpha(\lambda_1) = \alpha(\lambda_n) = 1 + \dfrac{\lambda_n}{\lambda_1}$.

D'où : $\sqrt{\langle Ax, x\rangle\langle A^{-1}x, x\rangle} \leqslant \dfrac{1}{2}\sqrt{\dfrac{\lambda_1}{\lambda_n}}\displaystyle\sum_{i=1}^n \left(1 + \dfrac{\lambda_n}{\lambda_1}\right) x_i^2 = \dfrac{1}{2}\left(\sqrt{\dfrac{\lambda_1}{\lambda_n}} + \sqrt{\dfrac{\lambda_n}{\lambda_1}}\right)\displaystyle\sum_{i=1}^n x_i^2$.

Ce qui donne finalement, en élevant au carré : $\langle Ax, x\rangle\langle A^{-1}x, x\rangle \leqslant \dfrac{1}{4}\left(\sqrt{\dfrac{\lambda_1}{\lambda_n}} + \sqrt{\dfrac{\lambda_n}{\lambda_1}}\right)^2 \|x\|^4$. ■

Utilisons l'inégalité de Kantorovitch :

$$\begin{aligned} f(x_{k+1}) - \overline{f} &\leqslant \left(f(x_k) - \overline{f}\right)\left(1 - \frac{4}{\left(\sqrt{c(A)} + \frac{1}{\sqrt{c(A)}}\right)^2}\right) = \left(f(x_k) - \overline{f}\right)\left(1 - \frac{4c(A)}{(c(A)+1)^2}\right) \\ &\leqslant \left(f(x_k) - \overline{f}\right)\left(\frac{c(A)-1}{c(A)+1}\right)^2 \end{aligned}$$

Et donc $\forall k \in \mathbb{N}, f(x_k) - \overline{f} \leqslant \left(f(x_0) - \overline{f}\right)\left(\dfrac{c(A)-1}{c(A)+1}\right)^{2k}$.

3. Dites juste que vous admettez l'inégalité de Kantorovitch et utilisez-la sans l'énoncer. Gardez un œil sur le chrono...
4. Comme $A \in \mathcal{S}_n^{++}(\mathbb{R})$, $\|A\|_2 = \sqrt{\rho\left({}^t\!AA\right)} = \rho(A) = \lambda_n$ (dites "décomposition polaire") et aussi $\left\|A^{-1}\right\|_2 = \dfrac{1}{\lambda_1}$. Ainsi, on fait apparaître le conditionnement en norme 2 de A : $\mathrm{cond}_2(A) = \dfrac{\lambda_n}{\lambda_1}$, qu'on notera par la suite (pour plus de simplicité) $c(A)$.
5. Rappelez-vous le théorème spectral : toute matrice symétrique est diagonalisable dans une base orthonormée.
6. En fait, c'est une application toute bête des identités remarquables : comme $(a-b)^2 \geqslant 0$, on sait que $a^2 + b^2 \geqslant 2ab$. Ainsi, $\left(\dfrac{1}{2}(a+b)\right)^2 = \dfrac{1}{4}\left(a^2 + b^2\right) + \dfrac{1}{2}ab \geqslant ab$.
7. On peut, mais là, j'ai la flemme.

5. Pour finir, on va calculer l'erreur sur $\|x_k - \overline{x}\|$.

   On a : $\|x_k - \overline{x}\|^2 \underset{8}{\leqslant} \frac{1}{\lambda_1} \langle A\left(x_k - \overline{x}\right), x_k - \overline{x} \rangle = \frac{1}{\lambda_1} \left(\langle Ax_k, x_k \rangle - \langle Ax_k, \overline{x} \rangle - \langle A\overline{x}, x_k \rangle + \langle A\overline{x}, \overline{x} \rangle \right)$

   $$= \frac{1}{\lambda_1} \left(\langle Ax_k, x_k \rangle - 2\langle x_k, A\overline{x} \rangle - 2\overline{f} \right) = \frac{1}{\lambda_1} \left(2f\left(x_k\right) - 2\overline{f} \right)$$

   $$= \frac{2}{\lambda_1} \left(f\left(x_k\right) - \overline{f} \right)$$

   En fin de compte, $\|x_k - \overline{x}\| \leqslant \sqrt{\frac{2}{\lambda_1}} \sqrt{f\left(x_k\right) - \overline{f}} \leqslant \sqrt{\frac{2}{\lambda_1} \left(f\left(x_0\right) - \overline{f} \right)} \left(\frac{c(A) - 1}{c(A) + 1} \right)^k$.

   Comme $\left| \frac{c(A) - 1}{c(A) + 1} \right| < 1$, on en déduit que la suite $(x_k)_{k \in \mathbb{N}}$ converge vers $\overline{x}$.[9] ■

Références

[HU] J.-B. HIRIART-URRUTY – *Optimisation et analyse convexe*, EDP Sciences, 2009.

[X-ENS Al3] S. FRANCINOU, H. GIANELLA et S. NICOLAS – *Oraux X-ENS Algèbre 3*, 2e éd., Cassini, 2013.

8. Vous souvenez-vous du quotient de Rayleigh ?
9. Ouf !