Développement: Algorithme du gradient à pas optimal

Adrien Fontaine

21 octobre 2013

Référence : Optimisation et Analyse convexe, Jean-Baptiste Hiriart-Urruty

Lemme 1 (*Inégalité de Kantorovitch*)

Soit A une matrice symétrique définie positive. Alors pour tout $x \in \mathbb{R}^n$,

$$< Ax, x >< A^{-1}x, x > \leq \frac{1}{4}\left(\sqrt{\frac{\lambda_1}{\lambda_n}} + \sqrt{\frac{\lambda_n}{\lambda_1}}\right)^2 \|x\|^4$$

où λ_1 et λ_n désignent respectivement la plus grande et la plus petite valeurs propre de A.

Démonstration : Par homogénéité, il suffit de démontrer l'inégalité de Kantorovitch pour $\|x\| = 1$. Rangeons les valeurs propres de A par ordre décroissant : $\lambda_1 \geq ... \geq \lambda_n$ et considérons une matrice orthogonale P diagonalisant A :

$$A = {}^tP\Delta P \text{ avec } \Delta = diag(\lambda_1, ..., \lambda_n)$$

Alors, on a :

$$A^{-1} = {}^tP\Delta^{-1}P \text{ ou } \Delta^{-1} = diag(\frac{1}{\lambda_1}, ..., \frac{1}{\lambda_n})$$

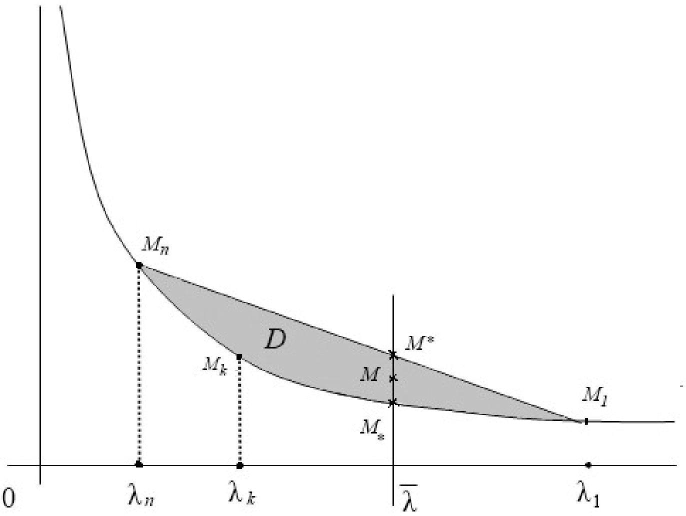
$$< Ax, x > =< \Delta(Px), (Px) >$$

$$< A^{-1}x, x >=< \Delta^{-1}(Px), Px >$$

La transformation $P : x \in S \mapsto y = Px \in S$, où S désigne la sphère unité euclidienne, est une bijection de S dans S. Il faut donc démontrer que pour tout $y \in \mathbb{R}^n$,

$$< \Delta y, y >< \Delta^{-1}y, y > \leq \frac{1}{4}\left(\sqrt{\frac{\lambda_1}{\lambda_n}} + \sqrt{\frac{\lambda_n}{\lambda_1}}\right)^2$$

Considérons pour cela le graphe de la fonction $\theta : x > 0 \mapsto \frac{1}{x}$ (on suppose $\lambda_n < \lambda_1$, sinon il n'y a rien à démontrer.).
Étant donné $y = (y_1, ..., y_n) \in \mathbb{R}^n$ de norme 1, posons $\alpha_i = y_i^2$. Ainsi, $< \Delta y, y >= \sum_{i=1}^n \alpha_i\lambda_i$ (resp. $< \Delta^{-1}y, y >= \sum_{i=1}^n \alpha_i \frac{1}{\lambda_i}$) est une combinaison convexe des λ_i (resp. des $\frac{1}{\lambda_i}$).
Pour $1 \leq k \leq n$, soit M_k le point du graphe de θ de coordonnées λ_k et $\frac{1}{\lambda_k}$.



Le point M, barycentre des points M_k affectés des coefficients α_i, est dans le domaine convexe $\mathcal{D}$ délimité par le graphe de θ et la droite M_1M_n (et même plus précisément dans le polygone convexe de sommets $M_1, M_2, ..., M_n$). Deux points de même abscisse que M (abscisse notée $\overline{\lambda}$) jouent un rôle particulier :

– le premier, M_* est le point correspondant du graphe de θ.
– le second, M^*, est le point correspondant sur la droite M_1M_n.

Ainsi,

– M est d'ordonnée $\sum_{i=1}^n \alpha_i \frac{1}{\lambda_i}$.
– M_* est d'ordonnée $\frac{1}{\sum_{i=1}^n \alpha_i\lambda_i} = \frac{1}{\overline{\lambda}}$
– M^* est d'ordonnée $y(\overline{\lambda}) = \frac{1}{\lambda_1} + \frac{1}{\lambda_n} - \frac{\overline{\lambda}}{\lambda_1\lambda_n}$ (par un calcul algébrique facile).

Par convexité de $x \mapsto \frac{1}{x}$, l'ordonnée de M^* est supérieure à celle de M, d'où,

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i \frac{1}{\lambda_i} \leq y(\overline{\lambda})$$

D'où,

$$\left(\sum_{i=1}^n \alpha_i\lambda_i\right)\left(\sum_{i=1}^n \alpha_i \frac{1}{\lambda_i}\right) \leq \overline{\lambda} y(\overline{\lambda}) = \frac{\overline{\lambda}(\lambda_1 + \lambda_n - \overline{\lambda})}{\lambda_1\lambda_n}$$

Comme la fonction $u \mapsto \frac{u(\lambda_1+\lambda_n-u)}{\lambda_1\lambda_n}$ atteint son maximum pour $u = \frac{\lambda_1+\lambda_n}{2}$, l'expression $\overline{\lambda}y(\overline{\lambda})$ est majorée par

$$\left(\frac{\lambda_1 + \lambda_n}{2}\right)^2 \frac{1}{\lambda_1\lambda_n}$$

Soit encore

$$\frac{1}{4}\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_n} + \frac{\lambda_n}{\lambda_1} + 2\right) = \frac{1}{4}\left(\sqrt{\frac{\lambda_1}{\lambda_n}} + \sqrt{\frac{\lambda_n}{\lambda_1}}\right)^2$$

L'inégalité de Kantorovitch est donc démontrée. ■

Théorème 1 (*Algorithme du gradient à pas optimal*)

Soit

$$\begin{array}{cccc} f & : & \mathbb{R}^n & \to & \mathbb{R}^n \\ & & x & \mapsto & \frac{1}{2} < Ax, x > + < b, x > +c \end{array}$$

où $A \in S_n^{++}(\mathbb{R})$, $b \in \mathbb{R}^n$ *et* $c \in \mathbb{R}$.
On considère le problème d'optimisation suivant :

$$(\mathcal{P}) \quad \textit{Minimiser } f(x), \ x \in \mathbb{R}^n$$

Alors, il existe une unique solution $\overline{x}$ *de* $\mathcal{P}$, *et elle est caractérisée par* $\nabla f(\overline{x}) = 0$. *De plus, l'algorithme du gradient à pas optimal, 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* t_k *est l'unique réel minimisant* $t \mapsto f(x_k + t d_k)$, *converge vers* $\overline{x}$.

Démonstration : La matrice hessienne de f en x est A, qui est définie positive, donc f admet un minimum. Ce minimum est unique car il vérifie $\nabla f(x) = 0$, *i.e* $Ax = -b$ qui a une unique solution car A est inversible. On a donc $\overline{x} = -A^{-1}b$ et la valeur optimale est

$$\overline{f} = f(\overline{x}) = \frac{1}{2} < A^{-1}b, b > +c$$

Montrons désormais que l'on a les relations suivantes :

$$\begin{cases} t_{k+1} = \frac{\|d_k\|^2}{< Ad_k, d_k >} \\ d_{k+1} = d_k - t_k A d_k \\ < d_{k+1}, d_k >= 0 \\ f(x_{k+1}) - \overline{f} = \left[f(x_k) - \overline{f} \right] \left[1 - \frac{\|d_k\|^4}{< Ad_k, d_k >< A^{-1}d_k, d_k >} \right] \end{cases}$$

Comme

$$f(x_k + t d_k) = f(x_k) + \frac{1}{2} t^2 < Ad_k, d_k > + t < Ax_k + b, d_k >$$

, la fonction $t \in \mathbb{R} \mapsto f(x_k + t d_k)$ est minimisée sur $\mathbb{R}$ en un seul point qui est,

$$t_k = \frac{\|d_k\|^2}{< Ad_k, d_k >}$$

Ensuite,

$$\begin{aligned} d_{k+1} &= -\nabla f(x_{k+1}) \\ &= -(Ax_k + b) \\ &= -Ax_k - b - t_k A d_k \\ &= d_k - t_k A d_k \end{aligned}$$

et

$$< d_{k+1}, d_k >= \|d_k\|^2 - t_k < Ad_k, d_k >= 0$$

d'après l'expression de t_k.
En développant,

$$f(x_{k+1}) = f(x_k + t_k d_k)$$

$$f(x_k) - \frac{1}{2} \frac{\|d_k\|^4}{< Ad_k, d_k >}$$

soit encore,

$$f(x_{k+1}) - \overline{f} = \left[f(x_k) - \overline{f}\right] \left[1 - \frac{\|d_k\|^4}{2(f(x_k) - \overline{f}) < A^{-1}d_k, d_k >}\right]$$

(toujours sous l'hypothèse $\nabla f(x_k) \neq 0$, qui est équivalente à $f(x_k) - \overline{f} > 0$.).
Un simple calcul montre à présent que

$$\begin{aligned} < A^{-1}d_k, d_k > &=< A^{-1}(Ax_k + b), Ax_k + b > \\ &= 2\left[\frac{1}{2} < Ax_k, x_k > + < b, x_k > + \frac{1}{2} < A^{-1}b, b >\right] \\ &= 2\left[f(x_k) - \overline{f}\right] (\text{ car } \frac{1}{2} < A^{-1}b, b >= c - \overline{f}) \end{aligned}$$

D'où,

$$f(x_{k+1}) - \overline{f} = \left[f(x_k) - \overline{f}\right] \left[1 - \frac{\|d_k\|^4}{< Ad_k, d_k >< A^{-1}d_k, d_k >}\right]$$

On pose alors $c_2(A) = \frac{\lambda_1}{\lambda_n}$ (conditionnement de A). Par l'inégalité de Kantorovitch, on a :

$$\begin{aligned} f(x_{k+1}) - \overline{f} &\leq (f(x_k) - \overline{f}) \left[1 - 4\frac{c_2(A)}{(c_2(A) + 1)^2}\right] \\ &\leq (f(x_k) - \overline{f}) \left[\frac{c_2(A) - 1}{c_2(A) + 1}\right]^2 \end{aligned}$$

D'où,

$$(f(x_k) - \overline{f}) \leq (f(x_0) - \overline{f}) \left(\frac{c_2(A) - 1}{c_2(A) + 1}\right)^{2k}$$

De plus, on a :

$$\begin{aligned} f(x_k) - \overline{f} &= \frac{1}{2} < Ax_k, x_k > + < b, x_k > + c - \overline{f} \\ &= \frac{1}{2} < A(x_k - \overline{x}), x_k - \overline{x} > \\ &\geq \frac{1}{2}\lambda_n \|x_k - \overline{x}\|^2 \end{aligned}$$

D'où,

$$\|x_k - \overline{x}\| \leq \left(\frac{2(f(x_0) - \overline{f})}{\lambda_n}\right)^{1/2} \left(\underbrace{\frac{c_2(A) - 1}{c_2(A) + 1}}_{<1}\right)^k$$

Donc,

$$x_k \to \overline{x}$$

De plus, plus $c_2(A)$ est proche de 1, plus la méthode converge rapidement. Le cas limite serait celui où $c_2(A) = 1$, ce qui suppose $f(x) = \lambda\|x - \overline{x}\|^2$ pour un certain $\lambda > 0$, auquel cas on atteint $\overline{x}$ dès la première itération.
Par contre, lorsque $c_2(A)$ est grand, la méthode est lente. $\blacksquare$