DVP : Méthode du gradient à pas optimal

Antoine Dequay

21 septembre 2022

Notes

- Prof : .
- Leçons : 162, 219, 223, 226, 229, 233.
- Références :
  - Bernis.

Notation On munit $\mathbb{R}^n$ du produit scalaire usuel $\langle \cdot | \cdot \rangle$ et de la norme associée $\|\cdot\|$.

On considère $A \in \mathcal{S}_n^{++}(\mathbb{R})$, $b \in \mathbb{R}^n$, $\overline{x} \in \mathbb{R}^n$ l'unique (car A est inversible) solution de $Ax = b$ et $\lambda_u = \mathrm{m}\,(\mathrm{Spec}(A))$, $\mathrm{m} \in \{\min, \max\}$.

On notera $\langle \cdot | \cdot \rangle_A$ le produit scalaire associé à A et $\|\cdot\|_A$ la norme associée :

$$\langle x | y \rangle_A = {}^t x A y = \langle x | Ay \rangle .$$

On note $\Phi : \begin{pmatrix} \mathbb{R}^n & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ x & \longmapsto & \frac{1}{2}\|x\|_A^2 - {}^t x b \end{pmatrix}$ et on a, par équivalence des normes en dimension finie, pour $(x, h) \in (\mathbb{R}^n)^2$:

$$\begin{aligned} \Phi(x+h) &= \frac{1}{2}\|x+h\|_A^2 - \langle b | x+h \rangle = \frac{1}{2}\|x\|_A^2 + \langle x | h \rangle_A + \frac{1}{2}\|h\|_A^2 - \langle b | x \rangle - \langle b | h \rangle \\ &= \Phi(x) + \langle \underbrace{A(x-\overline{x})}_{=\nabla\Phi(x)} | h \rangle + \underbrace{\frac{1}{2}\|h\|_A^2}_{=o(\|h\|)}. \end{aligned}$$

Proposition 1 L'application Φ atteint son minimum uniquement en $\overline{x}$.

Preuve. Le calcul du gradient permet d'écrire :

$$\Phi(\overline{x}+h) = \Phi(\overline{x}) + \frac{1}{2}\|h\|_A^2,$$

ce qui prouve le résultat.

□

Théorème 2 (Méthode du gradient à pas optimal)Pour $a \neq \overline{x} \in \mathbb{R}^n$ et

$$\begin{cases} x_0 = a, \\ \alpha_k = \dfrac{\|\nabla\Phi(x_k)\|^2}{\|\nabla\Phi(x_k)\|_A^2} \text{ si } x_k \neq \overline{x},\ 0 \text{ sinon, pour } k \in \mathbb{N}, \\ x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla\Phi(x_k),\ \text{pour } k \in \mathbb{N}, \end{cases}$$

la suite $(x_k)_{k\in\mathbb{N}}$ converge vers $\overline{x}$ et :

$$\forall k \in \mathbb{N},\ \|x_{k+1} - \overline{x}\| \leq \sqrt{\frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}} \left(\frac{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}}{\lambda_{\max} + \lambda_{\min}}\right)^{k+1} \|x_0 - \overline{x}\|.$$

Commençons par comprendre pourquoi cette suite a été définie ainsi.

Remarque Par la proposition précédente, la résolution du système $Ax = b$ revient à la recherche de minimisation de Φ. Le vecteur $\nabla\Phi(y)$ indiquant la direction de la plus forte croissance de Φ localement autour de $y \in \mathbb{R}^n$, cela justifie le retranchement selon $\nabla\Phi(x_k)$.

De plus, si on pose

$$f : \begin{pmatrix} \mathbb{R} & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ t & \longmapsto & \Phi(x_k - t\nabla\Phi(x_k)) \end{pmatrix},$$

alors on a, pour $t \in \mathbb{R}$:

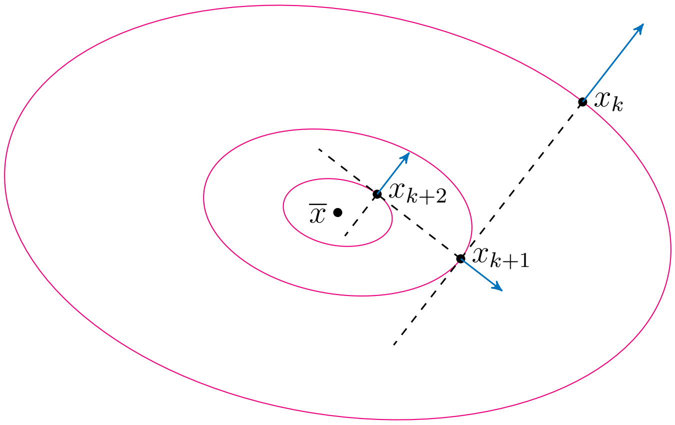
$$f(t) = \Phi(x_k) - t\,\langle Ax_k - b|\, \nabla\Phi(x_k)\rangle + \frac{t^2}{2}\|\nabla\Phi(x_k)\|_A^2 = \Phi(x_k) - t\|\nabla\Phi(x_k)\|^2 + \frac{t^2}{2}\|\nabla\Phi(x_k)\|_A^2,$$

qui est minimal (racine de la dérivée, car la fonction est coercive) en $\alpha_k = \dfrac{\|\nabla\Phi(x_k)\|^2}{\|\nabla\Phi(x_k)\|_A^2}$ si $x_k \neq \overline{x}$, et en 0 sinon. D'où le coefficient apparaissant dans la suite !

On remarque enfin que, comme f' s'annule en α_k (par minimalité), et que :

$$f'(\alpha_k) = -\,\langle \nabla\Phi(x_k - \alpha_k\nabla\Phi(x_k))|\, \nabla\Phi(x_k)\rangle\,, \text{ on a : } \langle \nabla\Phi(x_{k+1})|\, \nabla\Phi(x_k)\rangle = 0.$$

Pour $k \in \mathbb{N}$, les droites (x_k, x_{k+1}) sont tangentes en x_{k+1} aux lignes de niveau de Φ passant par ces points. Ces lignes de niveau sont des ellipsoïdes associées à A et centrées en $\overline{x}$.



Représentation des lignes de niveaux de Φ, points de la suite et gradients associés.

Preuve.

Lemme 3 (Inégalité de KANTOROVITCH). Pour tout $x \in \mathbb{R}^n$, on a :

$$\frac{\|x\|^4}{\|x\|_{A^{-1}}^2\|x\|_A^2} \geq 4\frac{\lambda_{\max}\lambda_{\min}}{(\lambda_{\max} + \lambda_{\min})^2}.$$

(l'écriture est bien licite car $A^{-1} \in \mathcal{S}_n^{++}$).

Preuve. Soit $x \in \mathbb{R}^n \backslash \{0\}$, par le théorème spectral, A admet une base orthonormée $(e_i)_{i\in[\![1,n]\!]}$ de vecteurs propres. On note λ_i les valeurs propres associées et on remarque que les e_i sont également vecteurs propres de A^{-1} pour les valeurs propres λ_i^{-1}. On a donc, avec $x = \displaystyle\sum_{i=1}^{b} x_i e_i \in$

$\mathbb{R}^n$:

$$
\begin{aligned}
\|x\|_A \|x\|_{A^{-1}} &= \sqrt{\sum_{i=1}^n \lambda_i x_i^2}\sqrt{\sum_{i=1}^n \lambda_i^{-1} x_i^2} = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}}\sqrt{\sum_{i=1}^n \frac{\lambda_i}{\lambda_{\max}} x_i^2}\sqrt{\sum_{i=1}^n \frac{\lambda_{\min}}{\lambda_i} x_i^2} \\
&\leq \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}}\sum_{i=1}^n \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_{\max}} + \frac{\lambda_{\min}}{\lambda_i}\right) x_i^2 \ \text{ car } ab \leq \frac{1}{2}(a^2+b^2), \text{ pour } (a,b) \in \mathbb{R}^2, \\
&\leq \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}}\left(1 + \frac{\lambda_{\min}}{\lambda_{\max}}\right)\|x\|^2,
\end{aligned}
$$

Car $g : t \mapsto \dfrac{t}{\lambda_{\max}} + \dfrac{\lambda_{\min}}{t}$ est convexe (caractérisation par la dérivée seconde), que $g(\lambda_{\min}) = g(\lambda_{\max}) = 1 + \dfrac{\lambda_{\min}}{\lambda_{\max}}$ et que pour tout $i \in [\![1,n]\!]$, $\lambda_i \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$ et est donc combinaison convexe de $\lambda_{\max}$ et $\lambda_{\min}$. D'où le résultat :

$$
\frac{\|x\|^4}{\|x\|_{A^{-1}}^2 \|x\|_A^2} \geq 4\frac{\lambda_{\max}\lambda_{\min}}{(\lambda_{\max}+\lambda_{\min})^2}.
$$

□

Pour $k \in \mathbb{N}$, on note $g_k = \nabla\Phi(x_k)$. Pour $p \in \mathbb{N}$, on a :

$$
\|x_{p+1} - \overline{x}\|_A^2 = \langle A(x_{p+1} - \overline{x}) |\, x_{p+1} - x_p\rangle + \langle A(x_{p+1} - \overline{x}) |\, x_p - \overline{x}\rangle .
$$

Par orthogonalité des vecteurs construits (voir la remarque plus haut), on a :

$$
\langle A(x_{p+1} - \overline{x}) |\, x_{p+1} - x_p\rangle = -\alpha_p \langle g_{p+1} |\, g_p\rangle = 0,
$$

et, par symétrie de A, il vient :

$$
\begin{aligned}
\|x_{p+1} - \overline{x}\|_A^2 &= \langle A(x_{p+1} - x_p) |\, x_p - \overline{x}\rangle + \langle A(x_p - \overline{x}) |\, x_p - \overline{x}\rangle \\
&= \langle x_{p+1} - x_p |\, A(x_p - \overline{x})\rangle + \|x_p - \overline{x}\|_A^2 = -\alpha_p \langle g_p |\, g_p\rangle + \|x_p - \overline{x}\|_A^2 \\
&= -\frac{\|g_p\|^4}{\|g_p\|_A^2} + \underbrace{\|x_p - \overline{x}\|_A^2}_{= \langle A(x_p - \overline{x}) |\, A^{-1}A(x_p - \overline{x})\rangle = \|g_p\|_{A^{-1}}^2} \\
&= \left(1 - \frac{\|g_p\|^4}{\|g_p\|_A^2 \|g_p\|_{A^{-1}}^2}\right)\|x_p - \overline{x}\|_A^2 \\
&\leq \left(1 - 4\frac{\lambda_{\max}\lambda_{\min}}{(\lambda_{\max}+\lambda_{\min})^2}\right)\|x_p - \overline{x}\|_A^2 \text{ par l'inégalité de } \textsc{Kantorovitch}, \\
&= \frac{(\lambda_{\max}-\lambda_{\min})^2}{(\lambda_{\max}+\lambda_{\min})^2}\|x_p - \overline{x}\|_A^2, \ \text{ donc il vient :}
\end{aligned}
$$

$$
\|x_{p+1} - \overline{x}\|_A \leq \frac{\lambda_{\max}-\lambda_{\min}}{\lambda_{\max}+\lambda_{\min}}\|x_p - \overline{x}\|_A.
$$

Ce qui prouve la convergence à vitesse géométrique. Grâce à la preuve de l'inégalité de KANTOROVITCH (expression de $\|\cdot\|_A$ via les coordonnées), on a : $\sqrt{\lambda_{\min}}\|\cdot\| \leq \|\cdot\|_A \leq \sqrt{\lambda_{\max}}\|\cdot\|$. Par récurrence immédiate avec la dernière inégalité, on a :

$$\|x_{k+1} - \overline{x}\|_A \leq \left(\frac{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}}{\lambda_{\max} + \lambda_{\min}}\right)^{k+1} \|x_0 - \overline{x}\|_A,$$

d'où

$$\|x_{k+1} - \overline{x}\| \leq \sqrt{\frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}} \left(\frac{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}}{\lambda_{\max} + \lambda_{\min}}\right)^{k+1} \|x_0 - \overline{x}\|.$$

□

Remarque Dans le cas où la suite atteint $\overline{x}$ (et est donc stationnaire), montrons qu'elle l'est à partir du rang 1. Supposons donc la suite stationnaire, et qu'on a, par l'absurde, $k \in \mathbb{N}\backslash\{0,1\}$ tel que $x_k = \overline{x}$, $x_{k-1} \neq x_k$ (et donc que $x_{k-2} \neq x_{k-1}$). Alors, par définition de la suite, $x_{k-1} - \overline{x}$ est colinéaire à $\nabla\Phi(x_{k-1})$, c'est-à-dire à $A(x_{k-1} - \overline{x})$. Or, $A(x_{k-1} - \overline{x})$ et $A(x_{k-2} - \overline{x})$ sont orthogonaux et donc $0 = \langle x_{k-1} - \overline{x} | \, A(x_{k-2} - \overline{x}) \rangle = \langle A(x_{k-1} - \overline{x}) | \, x_{k-2} - \overline{x} \rangle$ donc

$$0 = \langle x_{k-1} - \overline{x} | \, x_{k-2} - \overline{x} \rangle = \langle x_{k-1} - \overline{x} | \, x_{k-2} - x_{k-1} + (x_{k-1} - \overline{x}) \rangle .$$

Or, $x_{k-1} - \overline{x}$ et $x_{k-2} - x_{k-1}$ sont orthogonaux, donc $0 = \langle x_{k-1} - \overline{x} | \, x_{k-1} - \overline{x} \rangle$. C'est absurde car $x_{k-1} \neq x_k = \overline{x}$. D'où $k = 1$ (Ce cas arrive quand $a - \overline{x}$ est un vecteur propre de A).