III.C Gradient à pas optimal

Proposition 29

Pour tout $x \in \mathbb{R}^n$, on a :
$$\nabla\phi(x) = Ax - b$$

Démonstration. On va calculer la différentielle de ϕ en $x \in \mathbb{R}^n$.

Soit $x \in \mathbb{R}^n$. Pour tout $h \in \mathbb{R}^n$, on a :

$$\begin{aligned}
\phi(x+h) &= \frac{1}{2}\langle x+h, x+h\rangle_A - {}^t xb - {}^t hb \\
&= \frac{1}{2}\langle x, x\rangle_A + \frac{1}{2}\langle x, h\rangle_A + \frac{1}{2}\langle h, x\rangle_A + \frac{1}{2}\langle h, h\rangle_A - {}^t xb - {}^t hb \\
&= \frac{1}{2}\|x\| + \langle x, h\rangle_A + \frac{1}{2}\|h\|_A - {}^t xb - {}^t hb \\
&= \phi(x) + \langle x, h\rangle_A - {}^t hb + \underset{\|h\|\to 0}{o}(\|h\|)
\end{aligned}$$

On en déduit la différentielle de ϕ en x appliquée à h :

$$d\phi_x(h) = \langle x, h\rangle_A - {}^t hb = \langle Ax, h\rangle - \langle h, b\rangle = \langle Ax - b, h\rangle$$

Or $d\phi_x$ est une forme linéaire continue sur $\mathbb{R}^n$ qui est un espace de Hilbert donc par théorème de représentation de Riesz, le gradient de ϕ en x est défini de manière unique et donc on peut l'identifier très simplement dans l'expression de $d\phi_x(h)$. ■

Lemme 30: Inégalité de Kantorovitch

$$\forall x \in \mathbb{R}^n \backslash \{0\} \qquad \frac{\|x\|^4}{\|x\|_A^2 \|x\|_{A^{-1}}^2} \geqslant 4\frac{\lambda_n \lambda_1}{(\lambda_n + \lambda_1)^2}$$

Démonstration. Soit $x \in \mathbb{R}\backslash\{0\}$. Par le théorème spectrale, A est diagonalisable en base orthonormée. Notons $(e_1, \dots, e_n)$ une base de vecteurs propres avec e_i vecteur propre pour λ_i. On a alors que e_i est vecteur propre de A^{-1} pour la valeur propre $\frac{1}{\lambda_i}$. On désigne par x_i la i^e coordonnée de x dans la base $(e_1, \dots, e_n)$. On a donc :

$$\begin{aligned}
\|x\|_A \|x\|_{A^{-1}} &= \sqrt{\sum_{i=1}^n \lambda_i x_i^2}\sqrt{\sum_{i=1}^n \frac{1}{\lambda_i} x_i^2} \\
&= \sqrt{\frac{\lambda_n}{\lambda_1}}\sqrt{\sum_{i=1}^n \frac{\lambda_i}{\lambda_n} x_i^2}\sqrt{\sum_{i=1}^n \frac{\lambda_1}{\lambda_i} x_i^2}
\end{aligned}$$

Donc en utilisant l'inégalité de Young trivialisée avec $p = q = 2$, on a :

$$\|x\|_A \|x\|_{A^{-1}} \leqslant \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\lambda_n}{\lambda_1}}\left(\sum_{i=1}^n \frac{\lambda_i}{\lambda_n} x_i^2 + \sum_{i=1}^n \frac{\lambda_1}{\lambda_i} x_i^2\right)$$

C'est-à-dire :

$$\|x\|_A \|x\|_{A^{-1}} \leqslant \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\lambda_n}{\lambda_1}}\sum_{i=1}^n \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_n} + \frac{\lambda_1}{\lambda_i}\right) x_i^2 \tag{3}$$

Or l'application $g\left\{\begin{array}{ccc}[\lambda_1,\lambda_n] & \to & \mathbb{R}\\ t & \mapsto & \frac{t}{\lambda_n}+\frac{\lambda_1}{t}\end{array}\right.$ est convexe comme somme de deux applications convexes. Or on a que :

$$g(\lambda_1) = 1 + \frac{\lambda_1}{\lambda_n} = g(\lambda_n).$$

Donc par convexité de g on obtient :

$$\forall t \in [\lambda_1, \lambda_n] \qquad g(x) \leqslant 1 + \frac{\lambda_1}{\lambda_n}.$$

Et comme toutes les valeurs propres sont dans l'intervalle $[\lambda_1, \lambda_n]$ on a donc :

$$\frac{\lambda_i}{\lambda_n} + \frac{\lambda_1}{\lambda_i} \leqslant 1 + \frac{\lambda_1}{\lambda_n}. \tag{4}$$

En réinjectant l'inégalité (4) dans l'inégalité (3), on obtient finalement :

$$\begin{aligned}\|x\|_A\|x\|_{A^{-1}} &\leqslant \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\lambda_n}{\lambda_1}}\left(1+\frac{\lambda_1}{\lambda_n}\right)\sum_{i=1}^{n} x_i^2\\ &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\lambda_n}{\lambda_1}}\left(1+\frac{\lambda_1}{\lambda_n}\right)\|x\|^2\end{aligned}$$

■

Théorème 31: Méthode du gradient à pas optimal

(i) L'application ϕ atteint son minimum en $\bar{x}$ et en $\bar{x}$ seulement.

(ii) Soit $a \in \mathbb{R}^n \backslash \{\bar{x}\}$ et soit $(x_k)_{k\in\mathbb{N}}$ la suite définie par :

$$\begin{cases} x_0 = a \\ \alpha_k = \begin{cases} \dfrac{\|\nabla\phi(x_k)\|^2}{\|\nabla\phi(x_k)\|_A^2} & \text{si } x_k \neq \bar{x} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \\ x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla\phi(x_k) \end{cases}$$

converge vers $\bar{x}$ et

$$\forall k \in \mathbb{N} \qquad \|x_{k+1} - \bar{x} \leqslant \sqrt{\frac{\lambda_n}{\lambda_1}}\left(\frac{\lambda_n - \lambda_1}{\lambda_n + \lambda_1}\right)^{k+1}\|x_0 - \bar{x}\|.$$

Cette méthode est appelée méthode du gradient à pas optimal.

Remarque 32

On remarquera que le premier item justifie l'intérêt de considérer le gradient de l'application ϕ. En effet la résolution du système linéaire $Ax = b$ revient à minimiser ϕ (c'est ce premier item qui nous le dit). Or en un point $y \in \mathbb{R}^n$, si $\nabla\phi(y) \neq 0$ alors il indique le sens dans lequel ϕ croit le plus vite.

Étant donné le point x_k, il est donc naturel de chercher le terme x_{k+1} sur la droite affine dirigée par $\nabla\phi(x_k)$ et passant par x_k (on notera que si le gradient est nul alors $x_k = \bar{x_k}$ et on prend alors $x_{k+1} = x_k$). En fait l'application $f : \begin{array}{ccc}\mathbb{R} & \to & \mathbb{R}\\ t & \mapsto & \phi(x_k - t\nabla\phi(x_k))\end{array}$ atteint son minimum en $\alpha_k = \frac{\|\nabla\phi(x_k)\|^2}{\|\nabla\phi(x_k)\|_A^2}$.

Démonstration de la remarque. On démontre l'assertion

"En fait l'application $f : \begin{array}{ccc}\mathbb{R} & \to & \mathbb{R}\\ t & \mapsto & \phi(x_k - t\nabla\phi(x_k))\end{array}$ atteint son minimum en $\alpha_k = \frac{\|\nabla\phi(x_k)\|^2}{\|\nabla\phi(x_k)\|_A^2}$."

Soit $t \in \mathbb{R}$ toujours en invoquant la démonstration de la proposition III.C, on a :

$$\begin{aligned} f(t) &= \phi(x_k) - t\langle Ac_k - b, \nabla\phi(x_k)\rangle + \frac{t^2}{2}\|\nabla\phi(x_k)\|_A^2 \\ &= \phi(x_k) - t\|\nabla\phi(x_k)\|^2 + \frac{t^2}{2}\|\nabla\phi(x_k)\|_A^2 \end{aligned}$$

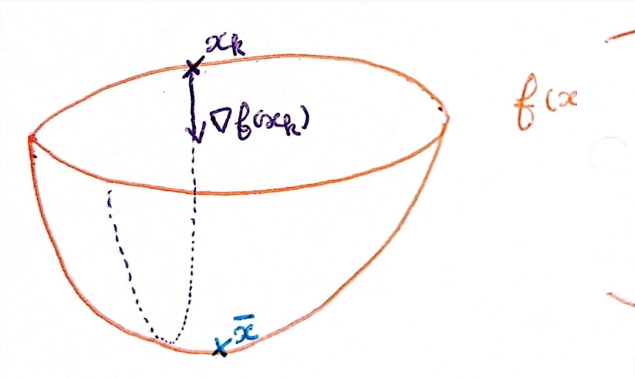
et le résultat provient de l'étude de ce trinôme du degré deux. Ceci explique la définition de x_{k+1}. Enfin, on notera que la dérivée de f s'annule en α_k par minimalité de f. Donc on obtient la relation d'orthogonalité :

$$\langle\nabla\phi(x_{k+1}), \nabla\phi(x_k)\rangle = 0. \tag{5}$$

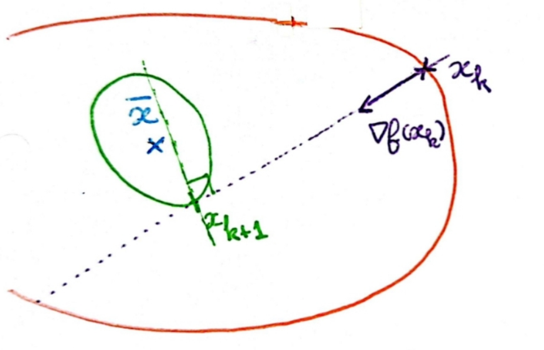
■

Remarque 33

On représente ce qu'il se passe géométriquement dans la méthode du gradient à pas optimal :



Et une "vue du-dessus" donne :



La droite (x_k, x_{k+1}) est tangente à la ligne de niveau de ϕ en x_{k+1}.
<u>NB</u> : les lignes de niveau de ϕ sont des sphères pour la norme $\|\cdot\|_A$.

On justifie le choix d'obtenir x_{k+1} à partir de x_k en déplaçant le point dans le sens opposé à celui donné par le gradient car la première manière d'interpréter le gradient est que géométriquement, il donne le sens de plus grande augmentation.

Démonstration du théorème.

1. Pour démontrer ce premier point on convoque directement la démonstration de la proposition III.C. Dans le cas particulier où $x = \bar{x}$, pour $h \neq 0$ on a :

$$\phi(\bar{x} + h) = \phi(\bar{x}) + \frac{1}{2}\|h\|_A^2 > \phi(\bar{x})$$

2. On laisse de côté le cas trivial où pour un entier p on a $x_p = \bar{x}$. Pour alléger les notations, on pose $g_k = \nabla\phi(x_k)$.

   Soit $p \in \mathbb{N}$. On a :

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

   Or $A(x_{p+1} - \bar{x}) = Ax_{p+1} - b = g_{p+1}$ et $x_{p+1} - x_p = -\alpha_p g_p$. Donc en utilisant la relation 5 on obtient :

$$\langle A(x_{p+1} - \bar{x}), x_{p+1} - x_p\rangle = 0.$$

En utilisant la symétrie de A, il s'en suit :

$$\begin{aligned}
\|x_{p+1}-\bar{x}\|_A &= \langle A(x_{p+1}-x_p), x_p-\bar{x}\rangle + \langle A(x_p-\bar{x}), x_p-\bar{x}\rangle \\
&= \langle x_{p+1}-x_p, A(x_p-\bar{x})\rangle + \|x_p-\bar{x}\|_A^2 \\
&= \langle -\alpha_p g_p, g_p\rangle + \|x_p-\bar{x}\|_A^2 \\
&= -\frac{\|g_p\|^4}{\|g_p\|_A^2} + \|x_p-\bar{x}\|_A^2.
\end{aligned}$$

Mais par ailleurs

$$\|x_p-\bar{x}\|_A^2 = \langle A(x_p-\bar{x}), x_p-\bar{x}\rangle = \langle A(x_p-\bar{x}), A^{-1}A(x_p-\bar{x})\rangle = \|g_p\|_{A^{-1}}^2$$

et donc

$$\|x_{p+1}-\bar{x}\|_A^2 = \left(1-\frac{\|g_p\|^4}{\|g_p\|_A^2\|g_p\|_{A^{-1}}^2}\right)\|x_p-\bar{x}\|_A^2. \tag{6}$$

L'heure est venu d'utiliser notre lemme technique III.C : l'inégalité de Kantorovitch à $\frac{\|g_p\|^4}{\|g_p\|_A^2\|g_p\|_{A^{-1}}^2}$.
On obtient ainsi :

$$\frac{\|g_p\|^4}{\|g_p\|_A^2\|g_p\|_{A^{-1}}^2} \geqslant 4\frac{\lambda_n\lambda_1}{(\lambda_1+\lambda_n)^2}$$

Il en résulte (en utilisant les identités remarquables

$$\left(1-\frac{\|g_p\|^4}{\|g_p\|_A^2\|g_p\|_{A^{-1}}^2}\right) \leqslant \left(1-4\frac{\lambda_n\lambda_1}{(\lambda_1+\lambda_n)^2}\right) = \frac{(\lambda_n-\lambda_1)^2}{(\lambda_n+\lambda_1)^2}$$

En réinjectant dans (6), il vient :

$$\|x_{p+1}-\bar{x}\|_A \leqslant \frac{\lambda_n-\lambda_1}{\lambda_n+\lambda_1}\|x_p-\bar{x}\|_A. \tag{7}$$

et en itérant (7), on a donc :

$$\|x_{p+1}-\bar{x}\|_A \leqslant \left(\frac{\lambda_n-\lambda_1}{\lambda_n+\lambda_1}\right)^{p+1}\|x_0-\bar{x}\|_A.$$

Enfin en utilisant que l'on a $\sqrt{\lambda_1}\|\cdot\| \leqslant \|\cdot\|_A \leqslant \sqrt{\lambda_n}\|\cdot\|$, il vient :

$$\|x_{p+1}-\bar{x}\| \leqslant \sqrt{\frac{\lambda_n}{\lambda_1}}\left(\frac{\lambda_n-\lambda_1}{\lambda_n+\lambda_1}\right)^{p+1}\|x_0-\bar{x}\|.$$

Et cette dernière inégalité assure la convergence géométrique de la suite $(x_k)_k$ vers$\bar{x}$ et conclut ainsi la preuve.

■