0.1 Méthode de gradient à pas optimal

Difficulté : Moyenne et long
Thèmes : Théorème de point fixe, théorème spectral, calcul différentiel
Leçons concernées : **219**, **226**, **162**, **229**
Références : Bernis, Analyse pour l'agrégation de mathématiques

Enoncé 1. *Soit $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ une matrice symétrique définie positive, b un élément non nul de $\mathbb{R}^n$. On note Φ la fonctionnelle quadratique:*

$$\forall x \in \mathbb{R}^n, \quad \Phi(x) = \frac{1}{2}\|x\|_A - {}^t xb.$$

Alors l'application Φ atteint son minimum en $\bar{x}$, l'unique solution du système $Ax = b$, et seulement en ce point. De plus, si $a \in \mathbb{R}^n$, $a \neq \bar{x}$, la suite $(x_k)_{k\in\mathbb{N}}$ définie par

$$\begin{cases} x_0 = a \\ \alpha_k = \frac{\|\nabla\Phi(x_k)\|^2}{\|\nabla\Phi(x_k)\|_A^2}, & \text{si } x_k \neq x_0 \\ \alpha_k = 0, & \text{sinon} \\ x_k + 1 = x_k - \alpha_k \nabla\Phi(x_k). \end{cases}$$

converge vers $\bar{x}$. De plus, pour tout entier k,

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

où λ_{max} et λ_{min} sont respectivement la plus grande et la plus petite valeur propre de A

Lemme 1 (Lemme de Kantorovich)**.** *Pour tout élément x non nul de $\mathbb{R}^n$, on a*

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

Démonstration du lemme. Soit x un élément non nul de $\mathbb{R}^n$. D'après le théorème spectral, la matrice A admet une base orthornormée $(e_1, \ldots, e_n)$ de vecteurs propres. On note λ_i la valeur propre associée au vecteur propre e_i. Remarquons que e_i est aussi un vecteur propre associé de A^{-1} associé à la valeur propre $\frac{1}{\lambda_i}$. Ainsi, en désignant par x_i la i-ème coordonnée de x dans la base $(e_1, \ldots, e_n)$, on a :

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

D'après l'inégalité $ab \leq \frac{1}{2}(a^2 + b^2)$, on a alors

$$\|x\|_A\|x\|_{A^{-1}} \leq \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}}\sum_{i=1}^n \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_{\max}} + \frac{\lambda_{\min}}{\lambda_i}\right) x_i^2.$$

Mais l'application définie par

$$\forall t \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}], \quad g(t) = \frac{t}{\lambda_{\max}} + \frac{\lambda_{\min}}{t}.$$

est convexe. donc puisque $g(\lambda_{\min}) = g(\lambda_{\max}) = 1 + \frac{\lambda_{\min}}{\lambda_{\max}}$, on a pour tout $t \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$, $g(t) \leq 1 + \frac{\lambda_{\min}}{\lambda_{\max}}$. En reprenant l'inégalité précédente, il vient alors

$$\|x\|_A\|x\|_{A^{-1}} \leq \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}}\left(1 + \frac{\lambda_{\min}}{\lambda_{\max}}\right)\|x\|^2.$$

En élevant au carré, on trouve

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

ou encore, puisque x est non nul

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

□

Démonstration. Passons à la preuve de l'énoncé. Montrons que Φ est différentiable. Soit $h \in \mathbb{R}^n$

$$\begin{aligned}
\Phi(x+h) &= \frac{1}{2}\|x+h\|_A^2 - \langle b, x+h\rangle \\
&= \frac{1}{2}\|x\|_A^2 + \langle x, h\rangle + \frac{1}{2}\|h\|_A^2 - \langle b, x\rangle - \langle b, h\rangle \\
&= \Phi(x) + \langle Ax-b, h\rangle + \frac{1}{2}\|h\|_A^2 \\
&= \Phi(x) + \langle Ax-b, h\rangle + o_{\|h\|\to 0}(\|h\|).
\end{aligned}$$

puisque en dimension finie toutes les normes sont équivalentes. Donc $\nabla\Phi(x) = Ax - b = A(x-\bar{x})$. Ainsi, puisque un extremum annule nécessairement le gradient de Φ et $\nabla\Phi(\bar{x}) = 0$, on peut conclure que Φ atteint son minimum en ce point puisque pour tout $h \in \mathbb{R}^n$, $\Phi(\bar{x}+h) = \Phi(\bar{x}) + \frac{1}{2}\|h\|_A^2$.
Il reste à montrer la convergence de la suite. Commençons par montrer que α_k est la direction de plus forte descente vers $\bar{x}$. Posons

$$\forall t \in \mathbb{R}, \quad f(t) = \Phi(x_k - t\nabla\Phi(x_k)).$$

En développant, on trouve $f(t) = \Phi(x_k) - t\|\nabla\Phi(x_k)\|^2 + \frac{t^2}{2}\|\nabla\Phi(x_k)\|_A^2$. L'étude de ce polynôme du second degré donne que f atteint son minimum en α_k et donc que c'est la direction de plus faible montée. Notons par ailleurs que cela implique que la dérivée de f s'annule en α_k, ce qui signifie que

$$\begin{aligned}
f'(\alpha_k) &= -\|\nabla\Phi(x_k)\|^2 + \alpha_k\|\nabla\Phi(x_k)\|_A^2 \\
&= -\langle\nabla\Phi(x_k), \nabla\Phi(x_k)\rangle + \alpha_k\langle\nabla\Phi(x_k), A\nabla\Phi(x_k)\rangle \\
&= -\langle\nabla\Phi(x_k) - \alpha_k A\nabla\Phi(x_k), \nabla\Phi(x_k)\rangle \\
&= -\langle A(x_k - \alpha_k\nabla\Phi(x_k)) - b, \nabla\Phi(x_k)\rangle \\
&= -\langle\nabla\Phi(x_k - \alpha_k\Phi(x_k)), \nabla\Phi(x_k)\rangle \\
&= -\langle\nabla\Phi(x_{k+1}), \nabla\Phi(x_k)\rangle = 0
\end{aligned}$$

Donc deux itérés consécutifs de la suite ont des gradients orthogonaux. Pour alléger les notations, on notera désormais $g_k = \nabla\Phi(x_k)$. Soit $p \in \mathbb{N}$. Evaluons l'erreur entre x_{p+1} et $\bar{x}$:

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

D'après ce qui précède,

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

Par symétrie de A, il vient alors

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

Par ailleurs, on a aussi

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

et donc

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

D'après le lemme de Kantorovich, on a

$$\left(1 - \frac{\|g_p\|^4}{\|g_p\|_A^2 \|g_p\|_{A^{-1}}^2}\right) \leq 1 - 4\frac{\lambda_{\max}\lambda_{\min}}{(\lambda_{\max} + \lambda_{\min})^2} = \left(\frac{(\lambda_{\max} - \lambda_{\min})^2}{(\lambda_{\max} + \lambda_{\min})^2}\right).$$

Ce qui conclut enfin la démonstration car

$$\|x_{p+1} - \bar{x}\|_A \leq \left(\frac{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}}{\lambda_{\max} + \lambda_{\min}}\right) \|x_p - \bar{x}\|_A$$

□