Méthode du gradient à pas optimal

Arnaud Girand

17 juin 2012

Référence :
- [HU98], p. 66–69

Prérequis :
- inégalité de Kantorovitch.

Soit $A \in S_n^{++}(\mathbb{R})$.
Soit $b \in \mathbb{R}^n$.
Soit $c \in \mathbb{R}$.
On considère l'application suivante :

$$\begin{aligned} f : \mathbb{R}^n &\to \mathbb{R} \\ x &\mapsto \frac{1}{2}\langle Ax, x\rangle + \langle b, x\rangle \end{aligned}$$

☞ *On cherche à minimiser f sur $\mathbb{R}^n$* ; en effet on a $Ax = -b \Leftrightarrow x = \min(f)$.

f est strictement convexe et coercive définie sur un fermé, donc il existe un unique $\overline{x} \in \mathbb{R}^n$ minimisant f. De plus, comme f est différentiable, $\overline{x}$ est l'unique solution de l'équation $\nabla f(x) = 0$. Or :

$$\begin{aligned} \forall x, h \in \mathbb{R}^n, \quad df(x)(h) &= \frac{1}{2}(\langle Ax, h\rangle + \langle Ah, x\rangle) + \langle b, h\rangle \\ &= \langle Ax + b, h\rangle \text{ car } A \text{ est symétrique} \end{aligned}$$

Donc $\nabla f(x) = Ax + b$ d'où :

$$\overline{x} = -A^{-1}b \text{ et } \overline{f} := f(\overline{x}) = -\frac{1}{2}\langle A^{-1}b, b\rangle + c$$

On se propose à présent d'étudier l'algorithme de minimisation suivant :

Algorithme 1 (Gradient à pas optimal)
Soit $x_0 \in \mathbb{R}^n$.
On cherche à approcher $\overline{x}$ à l'aide de la suite récurrente $(x_k)_k$ construite comme suit : pour $k \geq 0$ on pose $x_{k+1} := x_k + t_k d_k$, où :

$$\begin{cases} d_k := -\nabla f(x_k) \\ t_k \textit{ est l'unique réel minimisant } t \mapsto f(x_k + td_k) \textit{ sur } \mathbb{R} \end{cases}$$

Dans toute la suite on fait l'hypothèse suivante :

$$\forall k \geq 0, \quad d_k = -\nabla f(x_k) \neq 0 \tag{1}$$

Cette hypothèse est justifiée par le fait qu'elle est équivalente au fait que $\forall k \geq 0$, $f(x_k) > \overline{f}$. Ainsi, si (1) n'est pas vérifiée l'algorithme converge en temps fini.

Vérifions tout d'abord que $(t_k)_k$ est bien définie. Pour $k \geq 0$ et $t \in \mathbb{R}$ on a :

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

Une brève étude de fonction nous montre alors que sous l'hypothèse (1) cette fonction est minimisée en un unique point t_k vérifiant :

$$t_k := \frac{\|d_k\|^2}{\langle Ad_k, d_k\rangle} \tag{2}$$

De plus :

$$\begin{aligned}\forall k \geq 0,\ d_{k+1} &= -\nabla f(x_{k+1}) \\ &= -(Ax_{k+1} + b) \\ &= -A_k x_k - b - t_k A d_k \\ &= d_k - t_k A d_k\end{aligned}$$

D'où, d'après (2) :

$$\forall k \geq 0,\ \langle d_{k+1}, d_k \rangle = \langle d_k, d_k \rangle - t_k \langle A d_k d_{,k} \rangle = 0 \tag{3}$$

De plus :

$$\begin{aligned}\forall k \geq 0,\ f(x_{k+1}) &= f(x_k + t_k d_k) \\ &= f(x_k) + \frac{1}{2} t_k^2 \langle A d_k, d_k \rangle + t_k \langle A x_k + b, d_k \rangle\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}&f(x_k) + \frac{1}{2} t_k^2 \langle A d_k, d_k \rangle + t_k(-\|d_k\|^2) \text{ d'après (3)} \\ &= f(x_k) + \frac{1}{2} \frac{\|d_k\|^4}{\langle A d_k, d_k \rangle} - \frac{\|d_k\|^4}{\langle A d_k, d_k \rangle} \\ &= f(x_k) - \frac{1}{2} \frac{\|d_k\|^4}{\langle A d_k, d_k \rangle}\end{aligned}$$

De fait :

$$\begin{aligned}\forall k \geq 0,\ f(x_{k+1}) - \overline{f} &= f(x_k) - \frac{1}{2} \frac{\|d_k\|^4}{\langle A d_k, d_k \rangle} - \overline{f} \\ &= (f(x_k) - \overline{f}) \left(1 - \frac{1}{2 f(x_k) - \overline{f})} \frac{\|d_k\|^4}{\langle A d_k, d_k \rangle} \right)\end{aligned}$$

De plus, sous l'hypothèse (1), on a :

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

Et donc :

$$\forall k \geq 0,\ f(x_{k+1}) - \overline{f} = (f(x_k) - \overline{f}) \left(1 - \frac{\|d_k\|^4}{\langle A d_k, d_k \rangle \langle A^{-1} d_k, d_k \rangle} \right) \tag{4}$$

Notons $\lambda_1 \geq \ldots \geq \lambda_n$ les valeurs propres de A et posons la quantité suivante, appelée conditionnement de A :

$$c_2(A) := \frac{\lambda_1}{\lambda_n}$$

Par inégalité de Kantorovitch (lemme 1, cf. infra) on a alors :

$$\begin{aligned}\frac{\|d_k\|^4}{\langle A d_k, d_k \rangle \langle A^{-1} d_k, d_k \rangle} &\geq 4 \left(\sqrt{c_2(A)} + \frac{1}{\sqrt{c_2(A)}} \right)^{-2} \\ &= 4 \frac{c_2(A)}{(1 + c_2(A))^2}\end{aligned}$$

En appliquant cette minoration à l'équation (4) on obtient :

$$\begin{aligned}
\forall k \geq 0,\ f(x_{k+1}) - \overline{f} &\leq (f(x_k) - \overline{f}) \left(1 - 4\frac{c_2(A)}{(1+c_2(A))^2}\right) \\
&= (f(x_k) - \overline{f}) \left(\frac{1 + 2c_2(A) + c_2(A)^2}{(1+c_2(A))^2} - 4\frac{c_2(A)}{(1+c_2(A))^2}\right) \\
&= (f(x_k) - \overline{f}) \left(\frac{1 - 2c_2(A) + c_2(A)^2}{(1+c_2(A))^2}\right) \\
&= (f(x_k) - \overline{f}) \left(\frac{c_2(A) - 1}{c_2(A) + 1}\right)^2
\end{aligned}$$

On montre alors par récurrence que :

$$\forall k \geq 0,\ f(x_k) - \overline{f} \leq (f(x_0) - \overline{f}) \left(\frac{c_2(A) - 1}{c_2(A) + 1}\right)^{2k} \tag{5}$$

En outre :

$$\begin{aligned}
\forall k \geq 0,\ f(x_k) - \overline{f} &= \frac{1}{2}\langle Ax_k, x_k\rangle + \langle b, x_k\rangle + c - f(\overline{x}) \\
&= \frac{1}{2}\langle A(x_k - \overline{x}), x_k - \overline{x}\rangle \\
&\geq \frac{1}{2}\lambda_n \|x_k - \overline{x}\|^2 \text{ car } \lambda_n = \inf_{x \neq 0} \frac{\langle Ax, x\rangle}{\|x\|^2}
\end{aligned}$$

In fine :

$$\forall k \geq 0, \quad \|x_k - \overline{x}\| \leq \sqrt{2\frac{f(x_0) - \overline{f}}{\lambda_n}} \left(\frac{c_2(A) - 1}{c_2(A) + 1}\right)^k \tag{6}$$

En conclusion il apparaît que si $c_2(A)$ est proche de 1 la méthode converge rapidement, alors que dans le cas contraire elle converge très lentement.

Détails supplémentaires :

- *f est strictement convexe.* La matrice hessienne de f est A, qui est définie positive.
- *f est coercive.* Soit $x \in \mathbb{R}^n$. Alors :

$$\begin{aligned}
|f(x)| &= |\frac{1}{2}\langle Ax, x\rangle + \langle b, x\rangle + c| \\
&\geq |\frac{1}{2}\langle Ax, x\rangle + \langle b, x\rangle| \\
&\geq \frac{1}{2}|\langle Ax, x\rangle| - |\langle b, x\rangle| \\
&\geq \frac{1}{2}|\langle Ax, x\rangle| - \|b\|\|x\| \\
&\geq \frac{1}{2}\lambda_n \|x\|^2 - \|b\|\|x\| \\
&\xrightarrow[\|x\| \to \infty]{} \infty
\end{aligned}$$

- On rappelle le lemme suivant :

  Lemme 1 (Inégalité de Kantorovitch)
  Soit $A \in S_n^{++}(\mathbb{R})$ de valeurs propres $\lambda_1 \geq \ldots \geq \lambda_n > 0$.
  Soit $x \in \mathbb{R}^n$.
  Alors :

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

Références

[HU98] Jean-Baptiste Hiriart-Urruty. *Optimisation et analyse convexe*. Presses Universitaires de France, 1998.