
FEUILLE DE TD NUMÉRO 6

Optimisation L3 - Deuxième semestre 2009-2010 - Université Denis-Diderot

Gradient conjugué; Vitesse de convergence

Dans les exercices suivants, A désigne une matrice symétrique définie positive $N \times N$, de valeurs propres $0 < \lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_N$, et $b \in \mathbb{R}^N$. Pour $v \in \mathbb{R}^N$, on pose

$$J(v) = \frac{1}{2}(Av, v) - (b, v).$$

On notera u le point de minimum de J sur \mathbb{R}^N .

Le conditionnement de A est défini par $\kappa(A) := \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2$ et vaut $\frac{\lambda_N}{\lambda_1}$. On note aussi $\|v\|_A^2 = (Av, v)$ pour $v \in \mathbb{R}^N$. On notera enfin u le minimum de J sur \mathbb{R}^N .

Exercice 1. (Algorithme du gradient conjugué)

Il s'agit de l'algorithme de descente à pas optimal :

$$u^{n+1} = u^n + \rho^n d^n \tag{1}$$

avec

$$d^0 = -\nabla J(u^0), \quad d^n = -\nabla J(u^n) + \frac{\|\nabla J(u^n)\|^2}{\|\nabla J(u^{n-1})\|^2} d^{n-1}, \quad \rho^n = \frac{(-\nabla J(u^n), d^n)}{(Ad^n, d^n)}.$$

Rappelons que le principe de cette méthode est le suivant:

On part de $u^0 \in \mathbb{R}^N$, fixé.

Puis pour $n \geq 0$ on construit récursivement une suite (u^n) telle que :

$$u^{n+1} \in u^n + G^n \quad \text{et} \quad J(u^{n+1}) = \inf_{v \in u^n + G^n} J(v) \tag{2}$$

avec $G^n = \text{vect}(\nabla J(u^0), \dots, \nabla J(u^n))$.

1. Vérifier que

$$J(v) - J(u) = \frac{1}{2} \|v - u\|_A^2 \quad \forall v \in \mathbb{R}^N. \tag{3}$$

2. Montrer que l'espace G^n est inclu dans l'espace H^n défini par :

$$H^n := \text{Vect}(\nabla J(u^0), A\nabla J(u^0), \dots, A^n \nabla J(u^0)).$$

3. Réciproquement, supposons que les $\nabla J(u^k)$ sont non nuls pour $0 \leq k \leq n$ (on notera que si $\nabla J(u^n) = 0$ alors u^n est la solution cherchée et on peut arrêter l'algorithme). Montrer que les $\nabla J(u^k)$ sont deux à deux orthogonaux. En déduire que $G^n = H^n$.

4. Pour $k \geq 0$, on pose $e^k = u^k - u$.

(a) Soit $v \in u^n + G^n$. Montrer qu'il existe un polynôme Q de degré n tel que: $v = u^0 + Q(A)\nabla J(u^0)$.

(b) En utilisant (2) et (3), montrer que:

$$\|e^{n+1}\|_A = \min\{\|P(A)e^0\|_A, P \in \mathcal{P}_{n+1}\} \quad (4)$$

où et \mathcal{P}_n désigne l'ensemble des polynômes P de degré n tels que $P(0) = 1$.

5. Montrer que

$$\|P(A)e^0\|_A^2 \leq \|e^0\|_A^2 \max_i P^2(\lambda_i) \quad \forall P \in \mathcal{P}_k.$$

6. En déduire que

$$\|e^n\|_A \leq 2 \left(\frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} \right)^n \|e^0\|_A, \quad \text{avec } \kappa = \frac{\lambda_N}{\lambda_1}.$$

(On pourra utiliser sans le démontrer le fait que $\min\{\|p\|_{L^\infty([a,b])} : p \in \mathcal{P}_k\} = 1/T_k \left(\frac{b+a}{b-a} \right)$, où T_k désigne le polynôme de Tchebychev de degré k , ainsi que l'inégalité suivante, valable lorsque $b > a$:

$$T_k \left(\frac{b+a}{b-a} \right) = T_k \left(\frac{\frac{b}{a} + 1}{\frac{b}{a} - 1} \right) > \frac{1}{2} \left(\frac{\sqrt{\frac{b}{a} + 1}}{\sqrt{\frac{b}{a} - 1}} \right)^k.$$

Corrigé 1.

1. L'égalité (3) s'obtient par des calculs directs.

2. Nous allons raisonner par récurrence. Pour $n = 0$, l'assertion est évidente. Supposons que l'hypothèse de récurrence

$$(HR_{n-1}) \quad G^{n-1} \subset \text{Vect} \left(\nabla J(u^0), A \nabla J(u^0), \dots, A^{n-1} \nabla J(u^0) \right)$$

soit vraie à l'ordre $n - 1$ et montrons que (HR_n) .

Notons d'abord que, d'après (2), l'itéré $u^n \in u^{n-1} + G^{n-1}$ et s'écrit donc sous la forme $u^n = u^0 + \sum_{i=0}^{n-1} \gamma_i \nabla J(u^i)$, avec $\gamma_i \in \mathbb{R}$. Comme on a supposé (HR) vraie à l'ordre $n-1$, pour tout $i \leq n-1$ $\nabla J(u^i)$ s'écrit sous la forme d'une combinaison linéaire de $\{\nabla J(u^0), A \nabla J(u^0), \dots, A^{n-1} \nabla J(u^0)\}$. Donc il existe $\alpha_1, \dots, \alpha_{n-1}$ tels que

$$u^n = u^0 + \sum_{i=0}^{n-1} \alpha_i A^i \nabla J(u^0),$$

$$\begin{aligned} \text{et } \nabla J(u^n) &= A u^n - b = A u^0 - b + \sum_{i=0}^{n-1} \alpha_i A^{i+1} \nabla J(u^0) \\ &= \nabla J(u^0) + \sum_{i=1}^n \alpha_{i-1} A^i \nabla J(u^0). \end{aligned}$$

On en déduit que G^n est bien engendré par $\{\nabla J(u^0), A \nabla J(u^0), \dots, A^n \nabla J(u^0)\}$.

3. Argument de dimension ($\dim(G_n) = n + 1$ force à avoir $G_n = H_n$)

4. (a) Soit $v \in u^n + G^n$. De la question précédente, on sait qu'ils existent $(\alpha_i)_{i=0}^n \in \mathbb{R}$ et $(\beta_i)_{i=0}^n \in \mathbb{R}$ tels que:

$$u^n = u^0 + \sum_{i=0}^{n-1} \alpha_i A^i \nabla J(u^0) \quad \text{et} \quad v = u^0 + \left(\sum_{i=0}^{n-1} \alpha_i A^i \right) \nabla J(u^0) + \left(\sum_{i=0}^n \beta_i A^i \right) \nabla J(u^0).$$

On en déduit alors qu'il existe un polynôme de degré n : $Q(x) = \sum_{i=0}^{n-1} (\alpha_i + \beta_i) x^i + \beta_n x^n$ tel que

$$v = u^0 + Q(A) \nabla J(u^0).$$

- (b) Remarquons d'abord que $\nabla J(u^0) = Au^0 - b = Au^0 - Au = Ae^0$. D'autre part, tenant compte de (2), (3) et de la question (a), il vient (on notera \mathbf{P}_n l'ensemble des polynômes de degré n) :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \|e^{n+1}\|_A^2 = J(u^{n+1}) - J(u) &= \min_{v \in u^n + G^n} \{J(v) - J(u)\} \\ &= \frac{1}{2} \min_{v \in u^n + G^n} \|v - u\|_A^2 \\ &= \frac{1}{2} \min_{Q \in \mathbf{P}_n} \|u^0 - u + Q(A) \nabla J(u^0)\|_A^2 \\ &= \frac{1}{2} \min_{Q \in \mathbf{P}_n} \|(I + Q(A)A)e^0\|_A^2. \\ &= \frac{1}{2} \min_{P \in \mathcal{P}_{n+1}} \|P(A)e^0\|_A^2. \end{aligned}$$

5. On va traduire (4) dans la base orthonormée $(v_l)_{l=1}^N$ des vecteurs propres de A . Cette base est A -orthogonale puisque $(Av_l, v_k) = \lambda_l (v_l, v_k)$, avec en particulier $\|v_l\|_A^2 = \lambda_l$. On pose $e^0 = \sum_{i=1}^N \alpha_i v_i$, on a:

$$P(A)e^0 = \sum_{i=1}^N \alpha_i P(\lambda_i) v_i, \quad \|e^0\|_A^2 = \sum_{i=1}^N \alpha_i^2 \|v_i\|_A^2 = \sum_{i=1}^N \lambda_i \alpha_i^2$$

et

$$\|P(A)e^0\|_A^2 = \sum_{i=1}^N \alpha_i^2 P^2(\lambda_i) \|v_i\|_A^2 = \sum_{i=1}^N \lambda_i \alpha_i^2 P^2(\lambda_i).$$

D'où

$$\begin{aligned} \|P(A)e^0\|_A^2 &\leq \left(\sum_{i=1}^N \lambda_i \alpha_i^2 \right) \max_i P^2(\lambda_i) \\ &= \|e^0\|_A^2 \max_i P^2(\lambda_i). \end{aligned}$$

Et d'après (4)

$$\|e^{n+1}\|_A \leq \min \left\{ \max_{1 \leq i \leq N} |P(\lambda_i)| : P \in \mathcal{P}_{n+1} \right\} \|e^0\|_A.$$

Il en découle que pour tout $n \geq 0$:

$$\|e^n\|_A \leq \min \left\{ \|P\|_{L^\infty([\lambda_1, \lambda_N])} : P \in \mathcal{P}_n \right\} \|e^0\|_A,$$

où on a noté $\|P\|_{L^\infty([\lambda_1, \lambda_N])} = \max_{x \in [\lambda_1, \lambda_N]} |P(x)|$.

En utilisant le résultat donné en indication, le min ci dessus est égal à $1/T_n \left(\frac{\lambda_N + \lambda_1}{\lambda_N - \lambda_1} \right)$, et

$$\begin{aligned} \|e^n\|_A &\leq 1/T_n \left(\frac{\lambda_N + \lambda_1}{\lambda_N - \lambda_1} \right) \|e^0\|_A, \\ &\leq 1/T_n \left(\frac{\kappa + 1}{\kappa - 1} \right) \|e^0\|_A, \\ &\leq 2 \left(\frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} \right)^n \|e^0\|_A. \end{aligned}$$

Exercice 2. (Comparaison de méthodes itératives) On suppose maintenant que la matrice A est donnée par :

$$A = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \dots & \ddots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix},$$

où $h = \frac{1}{N+1}$. Le but de cet exercice est de comparer sur cet exemple, les méthodes de descente de gradient et de gradient conjugué.

1. Montrer que les valeurs propres de la matrice A sont les:

$$\lambda^k = \frac{4}{h^2} \sin^2\left(\frac{k\pi h}{2}\right) \quad 1 \leq k \leq N,$$

associées aux vecteurs propres φ^k

$$\varphi^k = [\sin(k\pi h) \quad \sin(2k\pi h) \quad \dots \quad \sin((N-1)k\pi h) \quad \sin(Nk\pi h)]^T.$$

(Indication : on pourra calculer directement $(A\varphi^k)_j$.)

2. En déduire un équivalent de λ_1 , λ_N puis de $\kappa(A)$ pour h petit (c'est dire pour N grand).
3. Evaluer la vitesse de convergence du gradient à pas optimal pour h petit (on rappelle l'estimation d'erreur $\|e^{n+1}\|_A \leq \frac{\lambda_N - \lambda_1}{\lambda_N + \lambda_1} \|e^n\|_A$.)
4. Qu'en est t-il pour le gradient à pas fixe, avec le choix optimal du pas ?
5. Evaluer la vitesse de convergence du gradient conjugué pour h petit.
6. Estimer le nombre d'itérations nécessaires pour obtenir la convergence à une précision ε donnée pour la méthode du gradient à pas optimal (par exemple).

Application: $n = 99$, $\varepsilon = 10^{-3}$.

Corrigé 2.

1. Pour répondre à cette question, définissons v^k comme l'image de φ^k par A et calculons sa $l^{\text{ème}}$ coordonnée v_l^k :

$$v_l^k = -\frac{1}{h^2} \sin((l-1)k\pi h) + \frac{2}{h^2} \sin(lk\pi h) - \frac{1}{h^2} \sin((l+1)k\pi h), \quad \forall l \in \llbracket 2, N-1 \rrbracket$$

Il est encore licite d'écrire cette relation pour $l=1$ et $l=N$; en effet comme $(N+1)h=1$, nous avons:

$$\sin(0k\pi h) = 0 \text{ et } \sin((N+1)k\pi h) = 0.$$

Ainsi, des formules trigonométriques, nous tirons:

$$v_l^k = \frac{2}{h^2} (1 - \cos(k\pi h)) \sin(lk\pi h) = \frac{4}{h^2} \sin^2\left(\frac{k\pi h}{2}\right) \sin(lk\pi h).$$

Nous venons de montrer que les φ^k sont les vecteurs propres de A associés aux valeurs propres λ^k .

$$A \varphi^k = \lambda^k \varphi^k.$$

Le cardinal de cet ensemble étant égal à N , nous venons d'exhiber l'ensemble des valeurs propres de A .

2. Commençons par expliciter la plus petite et la plus grande valeur propre de A , elles correspondent à $k=1$ et $k=N$

$$\begin{cases} \lambda_1 = \frac{4}{h^2} \sin^2\left(\frac{\pi h}{2}\right) = \pi^2 + O(h^2) \simeq \pi^2, \\ \lambda_N = \frac{4}{h^2} \sin^2\left(\frac{N\pi h}{2}\right) = \frac{4}{h^2} \cos^2\left(\frac{\pi h}{2}\right) = \frac{4}{h^2} - \pi^2 + O(h^2) \simeq \frac{4}{h^2}. \end{cases}$$

Le conditionnement de la matrice A est donc :

$$\kappa := \frac{\lambda_N}{\lambda_1} \sim \frac{4}{\pi^2 h^2}.$$

3. Ainsi, les vitesses de convergence pour les méthodes de gradient à pas fixe et optimal sont données par:

$$-\ln\left(\frac{\kappa-1}{\kappa+1}\right) = -\ln\left(\frac{1-\frac{1}{\kappa}}{1+\frac{1}{\kappa}}\right) \simeq \frac{2}{\kappa} \simeq \frac{\pi^2 h^2}{2}. \quad (5)$$

Et la vitesse de convergence du gradient conjugué est donnée par:

$$-\ln\left(\frac{1-1/\sqrt{\kappa}}{1+1/\sqrt{\kappa}}\right) \simeq \frac{2}{\sqrt{\kappa}} \simeq \pi h. \quad (6)$$

4. Considérons la méthode du gradient à pas fixe. Nous avons la majoration d'erreur:

$$\|e^n\|_2 \leq \left(\frac{\lambda_N - \lambda_1}{\lambda_N + \lambda_1}\right)^n \|e^0\|_2. \quad (7)$$

Pour assurer $\|e^n\|_2 \leq \varepsilon$, il suffit d'imposer

$$\left(\frac{\lambda_N - \lambda_1}{\lambda_N + \lambda_1}\right)^n \|e^0\|_2 \leq \varepsilon \quad (8)$$

C'est à dire:

$$n \geq \frac{\ln \|e^0\|_2 - \ln \varepsilon}{-\ln \frac{\lambda_N - \lambda_1}{\lambda_N + \lambda_1}} \simeq \frac{-\ln \varepsilon}{\frac{\pi^2 h^2}{2}} = \frac{-2 \ln \varepsilon}{\pi^2 h^2}. \quad (9)$$

Application numérique:

$$n \geq 1,4 \times 10^4. \quad (10)$$