13 Méthode du gradient à pas conjugué

Étant donnés $A \in \mathrm{S}_n^{++}(\mathbb{R})$ et $b \in \mathbb{R}^n$, le but est de résoudre numériquement l'équation $Ax = b$.

On note x^* l'unique solution de l'équation, on cherche à construire une suite $(x_k)_{k\geqslant 0}$ qui converge le plus rapidement possible vers x^*.

Proposition. *Soit $J : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ la fonction définie par $J(x) = \frac{1}{2}{}^t xAx - {}^t xb$. Alors pour tout $x \in \mathbb{R}^n$, $J(x) = \frac{1}{2}\|x - x^*\|_A^2 + J(x^*)$. Ainsi, x^* est l'unique point qui minimise J.*

Preuve.
Rappelons que $\|.\|_A$ est une norme euclidienne associée au produit scalaire $\langle x, y\rangle_A = {}^t xAy$. On écrit que

$$\frac{1}{2}\|x - x^*\|_A^2 + J(x^*) = \frac{1}{2}{}^t(x - x^*)A(x - x^*) + \frac{1}{2}{}^t x^* Ax^* - {}^t x^* b$$

soit encore

$$\frac{1}{2}\|x - x^*\|_A^2 + J(x^*) = J(x) + {}^t x^* Ax^* - {}^t x^* b$$

Et comme $Ax^* = b$, il vient $\frac{1}{2}\|x - x^*\|_A^2 + J(x^*) = J(x)$, ce qu'il fallait.

□

Proposition. *Sur tout sous-espace affine $\mathcal{K}$ de $\mathbb{R}^n$, J atteint son minimum en un point unique $x_{\mathcal{K}}$. De plus, $x_{\mathcal{K}}$ est caractérisé par $b - Ax_{\mathcal{K}} \perp K$, où K désigne ici la direction de $\mathcal{K}$.*

On aurait pu simplement écrire $b - Ax_{\mathcal{K}} \perp \mathcal{K}$ (par définition de l'orthogonalité à un sous-espace affine), mais cela aurait pu prêter à confusion : $b - Ax_{\mathcal{K}}$ n'est pas orthogonal aux vecteurs de $\mathcal{K}$.

Preuve.
$\|.\|_A$ étant une norme euclidienne, il existe un unique point $x_{\mathcal{K}} \in \mathcal{K}$ qui réalise la distance de x^* à $\mathcal{K}$: il s'agit du projeté orthogonal (relativement à $\langle ., .\rangle_A$) de x^* sur $\mathcal{K}$. On en déduit immédiatement que $x_{\mathcal{K}}$ est l'unique point qui minimise J sur $\mathcal{K}$ en vertu de la proposition précédente.

De plus, on sait que ce point est caractérisé par $x^* - x_K \perp_A K$, soit encore $A(x^* - x_K) \perp K$, et comme $Ax^* = b$ on a le résultat voulu.

□

Proposition. *Soit $x_0 \in \mathbb{R}^n$, posons $r_0 = b - Ax_0$ et $K_k = Vect(r_0, Ar_0, ..., A^{k-1}r_0)$ pour $k \in \mathbb{N}^*$. Si on note x_k le point qui minimise J sur $x_0 + K_k$, alors la suite $(x_k)_{k\geqslant 1}$ stationne sur x^* en au plus n itérations.*

Preuve.
Si on note $r_k = b - Ax_k$, on a vu que x_k est caractérisé par $r_k \perp K_k$ pour $k \geqslant 1$. Par ailleurs, on remarque que $r_k \in K_{k+1}$ pour tout $k \geqslant 0$: $r_k = b - Ax_k = r_0 - A(x_k - x_0)$, et $x_k - x_0 \in K_k$ donc $A(x_k - x_0) \in K_{k+1}$.

La suite de sous-espaces vectoriels $(K_k)_{k \geqslant 1}$ est croissante, elle est donc stationnaire. De plus, si $K_{k_0} = K_{k_0+1}$ alors on voit que nécessairement la suite stationne sur K_{k_0}. On en déduit que cela arrive en au plus n étapes pour des raisons de dimension. Enfin, on a dans ce cas $r_{k_0} \perp K_{k_0}$ et $r_{k_0} \in K_{k_0+1} = K_{k_0}$, on en déduit que $r_{k_0} = 0$ *i.e.* $b = Ax_{k_0}$ puis $x_{k_0} = x^*$ par unicité. □

Deuxième preuve.
On se convaincra sans mal que $x \in x_0 + K_k$ si et seulement si il existe un polynôme P de degré $\leqslant k$ et de terme constant 1 tel que $x^* - x = P(A)(x_0 - x^*)$. On en déduit que $x^* \in K_n$ en prenant par exemple $P = \frac{\chi_A}{\det A}$ (où χ_A désigne le polynôme caractéristique de A).

□

Proposition. *On note $d_k = x_{k+1} - x_k$ et $r_k = b - Ax_k$ pour $k \geqslant 0$. On a alors $K_k = Vect(r_0, ..., r_{k-1}) = Vect(d_0, ..., d_{k-1})$ pour tout $k \geqslant 1$. De plus, les vecteurs $r_0, ..., r_{k-1}$ sont orthogonaux et les vecteurs $d_0, ..., d_{k-1}$ sont A-orthogonaux.*

Preuve.
Le résultat est trivial si $r_0 = 0$, on suppose désormais $r_0 \neq 0$. Soit $k_0 \leqslant n$ le plus petit entier non nul tel que $K_{k_0} = K_{k_0+1}$. Si on montre le résultat pour $k \leqslant k_0$, il sera évidemment vrai pour $k > k_0$ (dans ce cas, $r_{k-1} = d_{k-1} = 0$).

On a vu que $r_k \in K_{k+1}$ pour tout $k \geqslant 0$ et $r_k \perp K_k$ pour tout $k \geqslant 1$. Les r_k sont donc orthogonaux, de plus $r_{k-1} \neq 0$ pour $1 \leqslant k \leqslant k_0$, on en déduit que $K_k = \mathrm{Vect}(r_0, ..., r_{k-1})$ pour des raisons de dimension. D'autre part, il est clair que $d_k = x_{k+1} - x_k \in K_{k+1}$ pour tout $k \geqslant 0$, de plus $d_{k-1} \neq 0$ pour tout $1 \leqslant k \leqslant k_0$. De nouveau, il nous suffit de montrer que les d_k sont A-orthogonaux. Soient $0 \leqslant l < k$, on a $\langle d_k, d_l \rangle_A = \langle Ad_k, d_l \rangle$, or $Ad_k = Ax_{k+1} - Ax_k = -r_{k+1} + r_k$ et $d_l \in K_{l+1} \subset K_k$, d'où $\langle d_k, d_l \rangle_A = 0$.

□

Algorithme du gradient conjugué. La proposition précédente montre que l'on peut explicitement calculer d_k, et donc x_k, de manière itérative.

En effet, supposons connus r_k et d_k. On calcule alors $r_{k+1} = b - Ax_{k+1} = b - A(d_k + x_k)$, soit $r_{k+1} = r_k - Ad_k$. Si $r_{k+1} = 0$, c'est terminé. Sinon, on détermine d_{k+1} à un scalaire non nul près grâce au procédé d'orthogonalisation de Gram-Schmidt (pour le produit scalaire $\langle ., . \rangle_A$). Ce scalaire est ensuite déterminé grâce à la relation $\langle d_{k+1}, r_{k+1} \rangle_A = \|r_{k+1}\|^2$, obtenue en prenant le produit scalaire usuel avec r_{k+1} dans la relation $r_{k+2} = r_{k+1} - Ad_{k+1}$.

Reste à initialiser l'algorithme : r_0 est connu mais ce n'est pas le cas de $d_0 = x_1 - x_0$ *a priori*. En fait, $d_0 \in \mathrm{Vect}(r_0)$ est connu à un scalaire non nul près, et le raisonnement ci-dessus s'applique.

Rentrons maintenant un petit peu plus dans les calculs. On écrit que d_{k+1} est colinéaire à d'_{k+1} avec $d'_{k+1} = r_{k+1} + \sum_{i=1}^{k} \alpha_i d_i$. α_i est donné par $0 = \langle r_{k+1}, d_i \rangle_A + \alpha_i \|d_i\|_A^2$. Or $\langle r_{k+1}, d_i \rangle_A = \langle r_{k+1}, Ad_i \rangle$ avec $d_i \in K_{i+1}$ donc $Ad_i \in K_{i+2}$. On en déduit que $\langle r_{k+1}, d_i \rangle_A = 0$ sauf si $i = k$. Dans ce cas, $\langle r_{k+1}, d_k \rangle_A = \langle r_{k+1}, Ad_k \rangle = \langle r_{k+1}, r_k - r_{k+1} \rangle$ soit $\langle r_{k+1}, d_k \rangle_A = -\|r_{k+1}\|^2$. Par ailleurs, $\|d_k\|_A^2 = \langle Ad_k, d_k \rangle = \langle r_k - r_{k+1}, d_k \rangle = \langle r_k, d_k \rangle$. Finalement, peut choisir $d'_{k+1} = \langle r_k, d_k \rangle r_{k+1} + \|r_{k+1}\|^2 d_k$. Enfin, on détermine λ tel que $d_{k+1} = \lambda d'_{k+1}$ en écrivant que $\langle d_{k+1}, r_{k+1} \rangle_A = \|r_{k+1}\|^2$ soit $\lambda = \frac{\|r_{k+1}\|^2}{\langle Ad'_{k+1}, r_{k+1} \rangle}$.

On peut donc écrire l'algorithme de la manière suivante :

** *Initialisation* **
$x \in \mathbb{R}^n$ quelconque.
$r := b - Ax$
$d := r$

tant que $\|r\| > \varepsilon$
    $d := \frac{\|r\|^2}{\langle Ad, r \rangle} d$
    $x := x + d$
    $r' := r - Ad$
    $d := \langle r, d \rangle r' + \|r'\|^2 d$
    $r := r'$
fin tant que

On sait que l'algorithme converge en au plus n étapes. Dans la pratique, n peut être grand et la précision machine est atteinte en beaucoup moins d'itérations. On a en particulier le résultat suivant :

Proposition. *La méthode du gradient à pas conjugué converge mieux que toutes les méthodes dites de gradient. En particulier, la convergence est au moins géométrique.*

Preuve.
Dans les méthodes de gradient, on pose $x_{k+1} = x_k - \rho_k(Ax_k - b)$, où $\rho_k > 0$. On peut mentionner ici que $Ax_k - b$ est en fait le gradient de la fonction J, d'où le nom de la méthode (l'idée est que J diminue le plus fortement dans la demi-direction $-\vec{\nabla} J$). Par une récurrence immédiate, on voit que $x_k \in x_0 + K_k$. Or dans la méthode du gradient à pas conjugué, x_k minimise J sur $x_0 + K_k$, d'où le résultat.

On peut démontrer rapidement que la méthode du gradient à pas constant converge géométriquement : si on choisit $\rho_k = \rho$ suffisamment petit pour que le rayon spectral r de $I - \rho A$ soit < 1, on a $x_{k+1} - x^* = x_k - x^* - \rho(Ax_k - Ax^*)$ soit $x_{k+1} - x^* = (I - \rho A)(x - x^*)$. On en déduit que $\|x_{k+1} - x^*\|_2 \leqslant r \|x_k - x^*\|_2$, d'où le résultat annoncé.

□

Leçons possibles
212 Méthodes hilbertiennes en dimension finie et infinie.
219 Problèmes d'extremums.
223 Convergence des suites numériques. Exemples et applications.
224 Comportement asymptotique des suites numériques. Rapidité de convergence. Exemples.
226 Comportement d'une suite réelle ou vectorielle définie par une itération $u_{n+1} = f(u_n)$. Exemples.
232 Méthodes d'approximation des solutions d'une équation $F(X) = 0$. Exemples.

Références
[AK02].
[Pel].