

Cours 11 : Gradient conjugué

Christophe Gonzales

LIP6 – Université Paris 6, France

$$\varphi'(\tilde{\lambda}) = -\vec{\nabla}f(\tilde{x})^T \cdot \vec{\nabla}f(x) = 0$$

⇒ les gradients en x et \tilde{x} sont orthogonaux

⇒ à chaque pas on prend une direction orthogonale à la direction précédente

cheminement de la méthode du gradient : «en zigzag»

Point faible de la méthode du gradient (2/2)

⇒ pour éviter les zigzags et accélérer la convergence, on peut avoir recours à l'un des procédés suivants :

- **diminuer le pas** : ne pas aller jusqu'en \tilde{x} .

Polyak (66) : effectuer des pas prédéterminés en imposant une suite (λ^k) telle que $\lambda^k \downarrow 0$ et $\sum_k \lambda^k = +\infty$
⇒ (x^k) tend vers \hat{x}

- **utiliser d'autres directions que l'anti-gradient** :

Forsythe (1968), Luenberger (1973) :
toutes les m itérations, au lieu de partir dans la direction de l'anti-gradient en x^k , «couper» en partant dans la direction $\delta = x^k - x^{k-m}$

- **utiliser des directions «conjuguées»**

Matrices définies positives

Définition d'une matrice définie positive

- Matrice M carrée $n \times n$
- M est symétrique : $M = M^T$, i.e., $M_{jk} = M_{kj} \forall j, k$
- $x^T M x > 0 \forall x \neq 0$

$\implies M$ correspond à une matrice de changement de base dans un espace vectoriel de dimension n :

Propriété

- si $M =$ matrice définie positive
- alors $\exists Q$ matrice carrée
- $\exists P$ matrice diagonale à coeffs > 0 telles que :
$$M = Q^T P^T P Q$$
$$\implies x^T M x = x^T Q^T P^T P Q x = (P Q x)^T (P Q x)$$

Forme quadratique définie positive (QDP)

Définition d'une forme quadratique définie positive

- $f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ forme quadratique définie positive
- $f(x) = \frac{1}{2}x^T Cx + p^T x \quad \forall x \in \mathbb{R}^n$
- C : matrice définie positive ; p : vecteur de taille n

⇒ forme développée de f :

$$\begin{aligned} f(x_1, \dots, x_n) &= \frac{1}{2} \left[\sum_{j=1}^n x_j \left[\sum_{k=1}^n c_{jk} x_k \right] \right] + \sum_{j=1}^n p_j x_j \\ &= \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n c_{jj} x_j^2 + \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^{j-1} c_{jk} x_j x_k + \sum_{j=1}^n p_j x_j \end{aligned}$$

Une forme QDP est strictement convexe

Démonstration : Soit $x, y \in \mathbb{R}^n$, $y \neq x$, et $\lambda \in]0, 1[$

$$\begin{aligned} & f(\lambda x + (1 - \lambda)y) \\ &= \frac{1}{2}(\lambda x + (1 - \lambda)y)^T C(\lambda x + (1 - \lambda)y) + p^T(\lambda x + (1 - \lambda)y) \\ &= \frac{1}{2} [\lambda^2 x^T Cx + (1 - \lambda)^2 y^T Cy + \lambda(1 - \lambda) [x^T Cy + y^T Cx]] \\ &\quad + \lambda p^T x + (1 - \lambda)p^T y \\ &= \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y) \\ &\quad + \frac{1}{2}\lambda(1 - \lambda) [-x^T Cx + x^T Cy + y^T Cx - y^T Cy] \\ &= \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y) - \frac{1}{2}\lambda(1 - \lambda)(y - x)^T C(y - x) \end{aligned}$$

Or C définie positive $\implies (y - x)^T C(y - x) > 0$

$$\implies f(\lambda x + (1 - \lambda)y) < \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y)$$

Propriétés d'une forme QDP (2/3)

toute forme QDP est strictement convexe \implies cours de la semaine dernière :

Une forme QDP a un unique point stationnaire
= minimum global

point stationnaire $\implies \vec{\nabla} f(x) = 0$

$$\vec{\nabla} f(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(x)}{\partial x_1} \\ \dots \\ \frac{\partial f(x)}{\partial x_j} \\ \dots \\ \frac{\partial f(x)}{\partial x_n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11}x_1 + \sum_{k \neq 1} c_{1k}x_k + p_1 \\ \dots \\ c_{jj}x_j + \sum_{k \neq j} c_{jk}x_k + p_j \\ \dots \\ c_{nn}x_n + \sum_{k \neq n} c_{nk}x_k + p_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_1x + p_1 \\ \dots \\ C_jx + p_j \\ \dots \\ C_nx + p_n \end{bmatrix}$$

$$\vec{\nabla} f(x) = Cx + p$$

$\implies f$ atteint son minimum en \hat{x} :

unique solution du système linéaire $Cx + p = 0$:

$$f \text{ minimal en } \hat{x} = -C^{-1}p$$

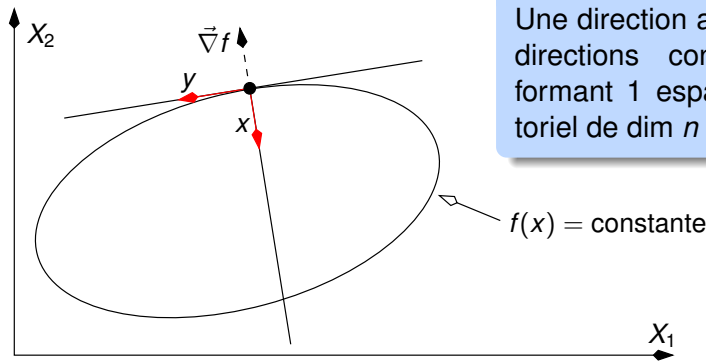
méthode des directions conjuguées

appliquée à une fonction quadratique, c'est une méthode itérative de calcul de la solution \hat{x} du système $Cx + p = 0$

Directions conjuguées (1/2)

Directions conjuguées

- 2 vecteurs $x, y \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$
- f : forme quadratique (C matrice définie positive)
- x et y définissent des directions conjuguées si $x^T C y = 0$



Une direction a 1 ∞ de directions conjuguées formant 1 espace vectoriel de dim $n - 1$

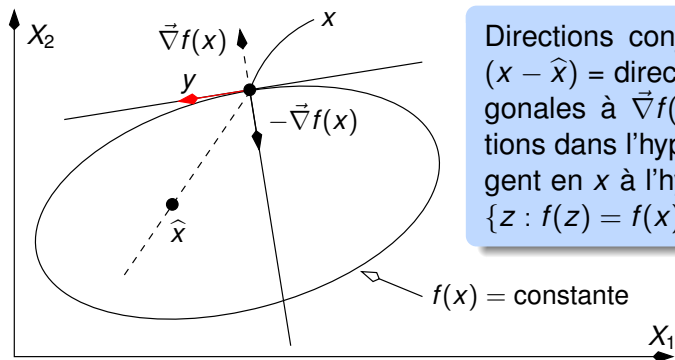
Directions conjuguées (2/2)

Cas particulier de direction conjuguée :

direction $\vec{\nabla}f(x) = Cx + p$

⚠ minimum de f atteint en \hat{x} tel que $p = -C\hat{x}$

$$\Rightarrow y^T \vec{\nabla}f(x) = y^T (Cx + p) = y^T Cx + y^T p = y^T C(x - \hat{x})$$



Directions conjuguées de $(x - \hat{x})$ = directions orthogonales à $\vec{\nabla}f(x)$ = directions dans l'hyperplan tangent en x à l'hyper-surface $\{z : f(z) = f(x)\}$

Changement de repère pour gradient conjugué

Lemme 1

- C une matrice définie positive
- $y^1, \dots, y^k, \dots, y^n = n$ vecteurs linéairement indépendants

Alors, on peut construire n vecteurs $\delta^1, \dots, \delta^k, \dots, \delta^n$ tels que :

- $\delta^1, \dots, \delta^n$ linéairement indépendants
- les δ^j conjugués deux à deux
- $\delta^1 = y^1$

$$\delta^2 = y^2 - \left(\frac{y^{2T} C \delta^1}{\delta^{1T} C \delta^1} \right) \delta^1$$

...

$$\delta^k = y^k - \sum_{l=1}^{k-1} \left(\frac{y^{kT} C \delta^l}{\delta^{lT} C \delta^l} \right) \delta^l$$

...

\implies tout vecteur = combinaison linéaire des directions
conjuguées fonction de $\vec{\nabla} f$

Expression de l'optimum de f

Lemme 2

- f = forme quadratique définie positive
 $f(x) = \frac{1}{2}x^T Cx + p^T x$
- x^0 = un point quelconque
- n vecteurs $\delta^1, \dots, \delta^n$ linéairement indépendants et conjugués deux à deux

Alors le minimum de f est atteint en $\hat{x} = x^0 + \sum_{k=1}^n \hat{\lambda}_k \delta^k$ où :

- $\forall k, \hat{\lambda}_k = -\frac{\vec{\nabla} f(x^0)^T \delta^k}{\delta^{kT} C \delta^k}$
- $\hat{\lambda}_k$ minimise $\varphi_k(\lambda_k) = f(x^0 + \lambda_k \delta^k)$
- $\hat{\lambda}_k$ minimise $\psi_k(\lambda_k) = f(x^{k-1} + \lambda_k \delta^k)$ où $x^{k-1} = x^0 + \sum_{l=1}^{k-1} \lambda_l \delta^l$
- en fait on a aussi $\hat{\lambda}_k = -\frac{\vec{\nabla} f(x^{k-1})^T \delta^k}{\delta^{kT} C \delta^k}$

Méthode du gradient conjugué

1 Initialisation :

Choix de x^0 point initial et d'une direction $\delta^1 = -\vec{\nabla}f(x^0)$

2 $k^{\text{ème}}$ étape :

1 Calcul de $\hat{\lambda}_k$ minimisant $\varphi_k(\lambda_k) = f(x^{k-1} + \lambda_k \delta^k)$:

$$\hat{\lambda}_k = -\frac{\vec{\nabla}f(x^{k-1})^T \delta^k}{\delta^{kT} C \delta^k} = \frac{\vec{\nabla}f(x^{k-1})^T \vec{\nabla}f(x^{k-1})}{\delta^{kT} C \delta^k}$$

2 $x^k = x^{k-1} + \hat{\lambda}_k \delta^k$

3 calcul de $\vec{\nabla}f(x^k)$

4 si $\vec{\nabla}f(x^k) = 0$ alors x^k est optimal **fin** ; sinon :

$\delta^{k+1} = -\vec{\nabla}f(x^k) + \beta^k \delta^k$, avec :

$$\beta^k = \frac{\vec{\nabla}f(x^k)^T C \delta^k}{\delta^{kT} C \delta^k} = \frac{\|\vec{\nabla}f(x^k)\|^2}{\|\vec{\nabla}f(x^{k-1})\|^2}$$

3 $k \leftarrow k + 1$

proposition

La méthode du gradient conjugué pour les fonctions quadratiques atteint le minimum en n itérations.

Extension aux fonctions quelconques

Fletcher et Reeves (1964)

Adaptation l'algorithme du gradient conjugué à une fonction différentiable quelconque

Méthode du gradient conjugué pour les fonctions quelconques

1 **Initialisation :**

Choix de x^0 point initial et d'une direction $\delta^1 = -\vec{\nabla}f(x^0)$

2 **$k^{\text{ème}}$ étape :**

1 Calcul de $\hat{\lambda}_k$ minimisant $\varphi_k(\lambda_k) = f(x^{k-1} + \lambda_k \delta^k)$

2 $x^k = x^{k-1} + \hat{\lambda}_k \delta^k$

3 calcul de $\vec{\nabla}f(x^k)$

4 si $\|\vec{\nabla}f(x^k)\| < \varepsilon$ alors **fin** ; sinon :

$$\delta^{k+1} = -\vec{\nabla}f(x^k) + \beta^k \delta^k \text{ avec } \beta^k = \frac{\|\vec{\nabla}f(x^k)\|^2}{\|\vec{\nabla}f(x^{k-1})\|^2}$$

3 $k \leftarrow k + 1$

Convergence de l'algorithme de Fletcher et Reeves

La convergence de l'algorithme de Fletcher et Reeves n'est assurée que si on le rapplique à partir du point ① périodiquement en prenant comme nouveau point de départ le dernier x^k calculé, e.g., toutes les n itérations.