Méthode du gradient conjugué

26 avril 2013

Soit $n \geq 1$. On se place dans la suite dans $(\mathbb{R}^n, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ où $\langle \cdot, \cdot \rangle$ est le produit scalaire usuel.

Soit à résoudre le système $Ax = b$ avec $A \in \mathrm{M}_n(\mathbb{R})$ symétrique définie positive et $b \in \mathbb{R}^n$. Il existe une unique solution du système que l'on note x^*. On pose $\begin{array}{cccc} J : & \mathbb{R}^n & \to & \mathbb{R} \\ & x & \mapsto & \frac{1}{2}\langle x, Ax \rangle - \langle x, b \rangle \end{array}$.

$$\begin{aligned} J(x+h) &= \frac{1}{2}\langle x, Ax \rangle - \langle x, b \rangle + \frac{1}{2}\left(\langle x, Ah \rangle + \langle h, A \rangle\right) - \langle h, b \rangle + \frac{1}{2}\langle h, Ah \rangle \\ &= J(x) + \langle Ax - b, h \rangle + \frac{1}{2}\langle h, Ah \rangle \end{aligned}$$

J est donc différentiable avec $\nabla J(x) = Ax - b$. J est une fonctionnelle quadratique strictement convexe donc J atteint son minimum en un unique point et $J(x) = \min\{J(y) \mid y \in \mathbb{R}^n\} \Leftrightarrow \nabla J(x) = 0 \Leftrightarrow x = x^*$.

Algorithme du gradient conjugué :

1. `On pose` $x_0 \in \mathbb{R}^n$ `et` $p_0 = r_0 := b - Ax_0$`. Pour` $k = 0, 1, \ldots$ `faire`
2. `Si` $p_k = 0$`, on pose` $m := k$ `et arrêt :` x_k `est la solution de` $Ax = b$`. Sinon,`
3. $a_k := \frac{\langle r_k, r_k \rangle}{\langle p_k, Ap_k \rangle}$, $x_{k+1} := x_k + a_k p_k$, $r_{k+1} := r_k - a_k A p_k$, $b_k := \frac{\langle r_{k+1}, r_{k+1} \rangle}{\langle r_k, r_k \rangle}$, $p_{k+1} := r_{k+1} + b_k p_k$

Théorème. *Soit $A \in \mathrm{M}_n(\mathbb{R})$ une matrice définie positive et $b \in \mathbb{R}^n$. Alors, pour tout $x_0 \in \mathbb{R}^n$, il existe un entier l avec $l \leq n$, tel que $p_l = 0$. On pose m le plus petit entier vérifiant cette condition. Les vecteurs x_k p_k r_k pour $k \leq m$ vérifient les propriétés suivantes :*

a. $Ax_m = b$
b. $\langle r_j, p_i \rangle = 0$ *pour* $0 \leq i < j \leq m$
c. $\langle r_i, p_i \rangle = \langle r_i, r_i \rangle$ *pour* $i \leq m$
d. $\langle p_i, Ap_j \rangle = 0$ *pour* $0 \leq i < j \leq m$, $\langle p_j, Ap_j \rangle > 0$ *pour* $j < m$
e. $\langle r_i, r_j \rangle = 0$ *pour* $0 \leq i < j \leq m$, $\langle r_j, r_j \rangle > 0$ *pour* $j < m$
f. $r_i = b - Ax_i$, *pour* $i \leq m$
En particulier, la méthode converge en au plus n itérations.

Démonstration. On montre par récurrence sur $0 \leq k \leq m$ les propositions 1 à 5 où $m = \min\{i \in \mathbb{N} \mid p_i = 0\}$ éventuellement égal à $+\infty$ et :

1. $\langle r_j, p_i\rangle = 0$ pour $0 \leq i < j \leq k$
2. $\langle r_i, r_i\rangle > 0$ et $\langle r_i, p_i\rangle = \langle r_i, r_i\rangle$pour $0 \leq i < k$
3. $\langle p_i, Ap_j\rangle = 0$ pour $0 \leq i < j \leq k$
4. $\langle r_i, r_j\rangle = 0$ pour $0 \leq i < j \leq k$
5. $r_i = b - Ax_i$ pour $0 \leq i \leq k$

Pour $k = 0$, le résultat est trivialement vérifié.

On suppose le résultat vrai au rang k.

1 : $\langle p_k, Ap_k\rangle > 0$ car A est définie positive et $p_k \neq 0$. On obtient donc

$$\langle r_{k+1}, p_k\rangle = \langle r_k - a_k Ap_k, p_k\rangle = \langle r_k, p_k\rangle - \frac{\langle r_k, r_k\rangle}{\langle p_k, Ap_k\rangle}\langle p_k, Ap_k\rangle = 0$$

car 2 est vérifiée. Pour $j < k$, de manière analogue,

$$\langle r_{k+1}, p_j\rangle = \langle r_k - a_k Ap_k, p_j\rangle = 0$$

car 1 et 3 sont vérifiées. On a donc prouvé 1.

2 : $\langle r_k, r_k\rangle > 0$. En effet, supposons le contraite. Comme $p_k = \begin{cases} r_0 & si\ k = 0 \\ b_{k-1}p_{k-1} & si\ k > 0 \end{cases}$ $k > 0$ (car sinon $p_0 = r_0 = 0$ et on a fini) et $p_k \neq 0$ (car $k < m$), on obtient d'après 3 que $0 < \langle p_k, Ap_k\rangle = b_{k-1}\langle p_{k-1}, Ap_k\rangle = 0$. Ainsi, $\langle r_k, r_k\rangle > 0$ et b_k et p_{k+1} sont bien définis. On alors

$$\langle r_{k+1}, p_{k+1}\rangle = \langle r_{k+1}, r_{k+1} + b_k p_k\rangle = \langle r_{k+1}, r_{k+1}\rangle$$

ce qui prouve 2.

3 : D'après ce qui précède, $r_k \neq 0$ donc a_j^{-1} est bien définie pour $j \leq k$. On obtient donc pour $j \leq k$:

$$\begin{aligned}
\langle p_{k+1}, Ap_j\rangle &= \langle r_{k+1}, Ap_j\rangle + b_k\langle p_k, Ap_j\rangle \\
&= a_j^{-1}\langle r_{k+1}, r_j - r_{j+1}\rangle + b_k\langle p_k, Ap_j\rangle \\
&= a_j^{-1}\langle r_{k+1}, p_j - b_{j-1}p_{j-1} - p_{j+1} + b_j p_j\rangle + b_k\langle p_k, Ap_j\rangle \\
&= \begin{cases} 0 & \text{pour } j < k \text{car 3 est vérifiée au rang k et 1 au rang } k+1 \\ 0 & \text{pour } j = k \text{par définition de } a_k \text{et } b_k \text{et car 1 et 2 sont vraies au rang } k+1 \end{cases}
\end{aligned}$$

ce qui prouve 3.

4 : 1 est vérifiée au rang $k + 1$ donc pour $i \leq k$ (en posant $p_{-1} = 0$), on a

$$\langle r_i, r_{k+1}\rangle = \langle p_i - b_{i-1}p_{i-1}, r_{k+1}\rangle = 0$$

5 : Comme f est vérifiée au rang k, on a

$$b - Ax_{k+1} = b - A(x_k + a_k p_k) = r_k - a_k Ap_k = r_{k+1}$$

ce qui prouve 5. Par récurrence, on a bien démontré le résultat annoncé.

D'après ce qui précède, $r_i \neq 0$ pour tout $i < m$ et ces vecteurs forment un système orthogonal dans $\mathbb{R}^n$. On obtient donc $m \leq n$. Comme $p_m = 0$, ob obtient $\langle r_m, r_m\rangle = \langle r_m, p_m\rangle = 0$ et donc $r_m = 0$ ce qui prouve que $Ax_m = b$. □

Leçons concernées :

158 Matrices symétriques réelles, matrices hermitiennes.

162 Système d'équations linéaires. Opérations, aspects algorithmiques et conséquences théoriques.

170 Formes quadratiques sur un espace vectoriel de dimension finie. Orthogonalité, isotropie. Applications.

171 Formes quadratiques réelles. Exemples et applications.

219 Problèmes d'extremums.

226 Suites réelles définies par une itération $f(u_n) = u_{n+1}$.

232 Méthodes d'approximation d'une équation $F(X) = 0$.

Références

[1] Stoer, Bulirsch. Introduction to numerical analysis. Springer