TP 4: Méthode du gradient conjugué, méthode de la puissance.

Exercice 1. On cherche à résoudre un système linéaire $Ax = b$, où A est une matrice symétrique définie positive par optimisation de la fonctionnelle

$$J(x) := \frac{1}{2}\langle Ax|x\rangle - \langle b|x\rangle.$$

L'idée principale est de choisir des directions de descentes qui soient orthogonales les unes aux autres pour le produit scalaire $\langle x|y\rangle_A = \langle x|Ay\rangle$ induit par la matrice A. La méthode du gradient conjugué prend la forme suivante : on fixe $x_0 = 0$, puis pour $k \geq 0$,

$$\begin{cases} g_k = -\nabla J(x_k) = b - Ax_k \\ p_k = g_k - \displaystyle\sum_{0\leq i<k} \frac{\langle p_i|g_k\rangle_A}{\langle p_i|p_i\rangle_A} p_i \\ t_k = \arg\min_{t\in\mathbb{R}} J(x_k + tp_k) \\ x_{k+1} = x_k + t_k p_k \end{cases} \tag{1}$$

On remarquera dans la définition de p_k une variante du procédé d'orthogonalisation de Gram-Schmidt. En particulier, cette construction implique que $\langle p_k|p_j\rangle_A = 0$ pour $j \neq k$ (en revanche, il n'y a aucune raison *a priori* pour que $\langle p_k|p_k\rangle > 0$).

1. En utilisant l'optimalité de t_k, démontrer que $\langle g_{k+1}|p_k\rangle = 0$. Montrer également que lorsque p_k est non nul on a

$$t_k = \arg\min_{t\in\mathbb{R}} J(x_k + tp_k) = \frac{\langle g_k|p_k\rangle}{\langle Ap_k|p_k\rangle}.$$

2. En utilisant la première partie de la question précédente démontrer que

$$\forall 0 \leq j < k,\ \langle g_k|p_j\rangle = 0 \tag{2}$$
$$\forall 0 \leq j < k,\ \langle g_k|g_j\rangle = 0 \tag{3}$$

On procédera par récurrence sur k, en démontrant que $(2)_k$ et $(3)_k$ simultanément impliquent $(2)_{k+1}$ et $(3)_{k+1}$ (dans cet ordre).
Indications : Traiter d'abord le cas $j < k$ en utilisant la relation $g_{k+1} = (g_{k+1} - g_k) + g_k = -t_k Ap_k + g_k$. Traiter le cas $j = k$ séparément

3. Déduire de la question précédente qu'il existe forcément un $k \leq n$ tel que $g_k = 0$, où n est la dimension de A. En d'autres termes, l'algorithme du gradient conjugué trouve le minimum de J (et donc la solution de $Ax = b$) en n itérations au plus !

4. En utilisant la question 2 et l'égalité $g_{i+1} - g_i = -t_i A p_i$, démontrer que $\langle p_i | g_k \rangle_A$ est nul si $i < k-1$ (on admet pour l'instant que $g_i \neq 0 \Longrightarrow t_i \neq 0$). En déduire que la relation de récurrence (1) peut être simplifiée de la manière suivante :

$$\begin{cases} g_k = b - Ax_k \\ p_k = g_k - \dfrac{\langle Ap_{k-1} | g_k \rangle}{\langle Ap_{k-1} | p_{k-1} \rangle} p_{k-1} \\ t_k = \dfrac{\langle p_k | g_k \rangle}{\langle Ap_k | p_k \rangle} \\ x_{k+1} = x_k + t_k p_k \end{cases} \tag{4}$$

5. Écrire une fonction Scilab `gradconj`(A, b) implémentant la méthode du gradient conjugué, et comparer sa vitesse de convergence avec celle du gradient à pas optimal sur la matrice du Laplacien discret (cf TP précédent), en traçant $\|Ax_k - b\|$ en fonction de k en échelle log-log.

6. Tracer les trajectoires obtenues par ces deux méthodes en dimension 2 pour la matrice $A = [2, 1; 1, 3]$.

7. Démontrer que si l'on note E_k l'espace engendré par $p_0, \ldots, p_k$, le point x_{k+1} est le minimum global de J sur l'espace E_k, en admettant le théorème suivant.

Théorème 1. *Soit $J : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ une fonction convexe lisse et propre, c'est-à-dire que $\lim_{\|x\| \to \infty} J(x) = +\infty$, et E un sous-espace vectoriel. Alors le minimum global de J sur E est atteint en l'unique point x de E tel que $\nabla J(x)$ est orthogonal à E.*

En déduire que $p_{k+1} = 0$ si et seulement si x_{k+1} est un minimum global sur $\mathbb{R}^n$ (en particulier, cela implique que si $g_{k+1} \neq 0$, alors $p_{k+1} \neq 0$ et $t_{k+1} > 0$).

Exercice 2. Dans cet exercice, on considère une matrice carrée symmétrique A, dont l'on suppose que la plus grande valeur propre (en valeur absolue) a pour multiplicité 1.

1. On note λ la plus grande valeur propre de A et u un vecteur propre associé. Montrer que, si $\langle u_0 | u \rangle > 0$, alors la suite $u_n = \frac{A^n u}{\|A^n u\|}$ converge vers le vecteur $\frac{u}{\|u\|}$.

2. En déduire un algorithme itératif pour calculer la plus grande valeur propre d'une matrice A. Programmer cet algorithme, et déterminer numériquement son ordre sur la matrice A de l'exercice précédent.