

Lösa ekvationssystem numeriskt med gradientmetod???

Clas Östman

april 2023

Lös ekvationssystemet,

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \quad (1)$$

där \mathbf{A} är en känd $n \times n$ matris och \mathbf{b} är en känd $n \times 1$ vektor. Låt $\tilde{\mathbf{x}}$ vara en gissning på lösningen. Sätt residualen \mathbf{r} till,

$$\mathbf{r} = \mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{b}$$

När \mathbf{r} går mot $\mathbf{0}$ går $\tilde{\mathbf{x}}$ mot lösningen. Det är det samma som att beloppet av \mathbf{r} går mot 0 och därmed att $\mathbf{r}^\top \mathbf{r}$ går mot 0. Låt $f = \mathbf{r}^\top \mathbf{r}$. Gradienten till f i en punkt $\boldsymbol{\xi}$, $\nabla f(\boldsymbol{\xi})$, pekar i den riktning där f växer snabbast men det betyder också att f avtar snabbast i riktningen $-\nabla f(\boldsymbol{\xi})$. Om jag hela tiden går steg i den riktning där f avtar snabbast borde jag i sinom tid komma till en punkt där $f = 0$ eller åtminstone tillräckligt nära 0.

$$\mathbf{r} = \mathbf{Ax} - \mathbf{b} \quad (2)$$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

$$r_i = \sum_{j=1}^n a_{ij}x_j - b_i$$

$$f = \mathbf{r}^\top \mathbf{r} = \sum_{i=1}^n r_i^2 =$$

$$= (a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n - b_1)(a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n - b_1) +$$

$$+ (a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n - b_2)(a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n - b_2) +$$

\vdots

$$+ (a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n - b_n)(a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n - b_n) =$$

$$\begin{aligned}
&= a_{11}^2 x_1^2 + a_{11} a_{12} x_1 x_2 + \dots + a_{11} a_{1n} x_1 x_n - a_{11} b_1 x_1 + \\
&+ a_{11} a_{12} x_1 x_2 + a_{12}^2 x_2^2 + \dots + a_{12} a_{1n} x_2 x_n - a_{12} b_1 x_2 + \\
&+ a_{11} a_{1n} x_1 x_n + a_{12} a_{1n} x_2 x_n + \dots + a_{1n}^2 x_n^2 - a_{1n} b_1 x_n + \\
&- a_{11} b_1 x_1 - a_{12} b_1 x_2 - \dots - a_{1n} b_1 x_n + b_1^2 \\
&+ \dots =
\end{aligned}$$

$$= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}^2 x_j^2 + 2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sum_{k=1, k \neq j}^n a_{ij} a_{ik} x_j x_k - 2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} b_i x_j + \sum_{i=1}^n b_i^2$$

$$\begin{aligned}
f_{x_i} &= \frac{\partial f}{\partial x_i} = \\
&= 2 \sum_{j=1}^n a_{ji}^2 x_i + 2 \sum_{j=1}^n \sum_{k=1, k \neq i}^n a_{ji} a_{jk} x_k - 2 \sum_{j=1}^n a_{ji} b_j = \\
&= 2 \sum_{j=1}^n a_{ji} \left(\sum_{k=1}^n a_{jk} x_k - b_j \right)
\end{aligned}$$

Det här är den i:te komponenten i vektorn som, med lämpligt vald koefficient, ska dras bort från \mathbf{x} . I komponenten kan man se termen,

$$\sum_{k=1}^n a_{jk} x_k - b_j$$

Den är ju lika med 0 när \mathbf{x} är lösningen. Det betyder att gradienten är $\mathbf{0}$ vid lösningen. Det kommer sig av att $\mathbf{r}^\top \mathbf{r} \geq 0$ och därför har minimum vid lösningen. Istället för att beskriva gradienten med den jobbiga summan kan man skriva,

$$\nabla f = 2\mathbf{A}^\top(\mathbf{Ax} - \mathbf{b}) = 2\mathbf{A}^\top \mathbf{r} \quad (3)$$

Nu har jag riktningen jag ska gå i men hur stora kliv ska jag ta? Jag definierar γ som den faktor som multipliceras med den normaliserade gradienten för att, förhoppningsvis, komma närmare lösningen.

$$\gamma = \frac{(\mathbf{r}^\top \mathbf{r})^{3/2}}{\mathbf{r}^\top \mathbf{A} \mathbf{r}} \quad (4)$$

Då kan jag iterera mig fram till lösningen på följande vis:

$$\mathbf{x}_0 = \tilde{\mathbf{x}}$$

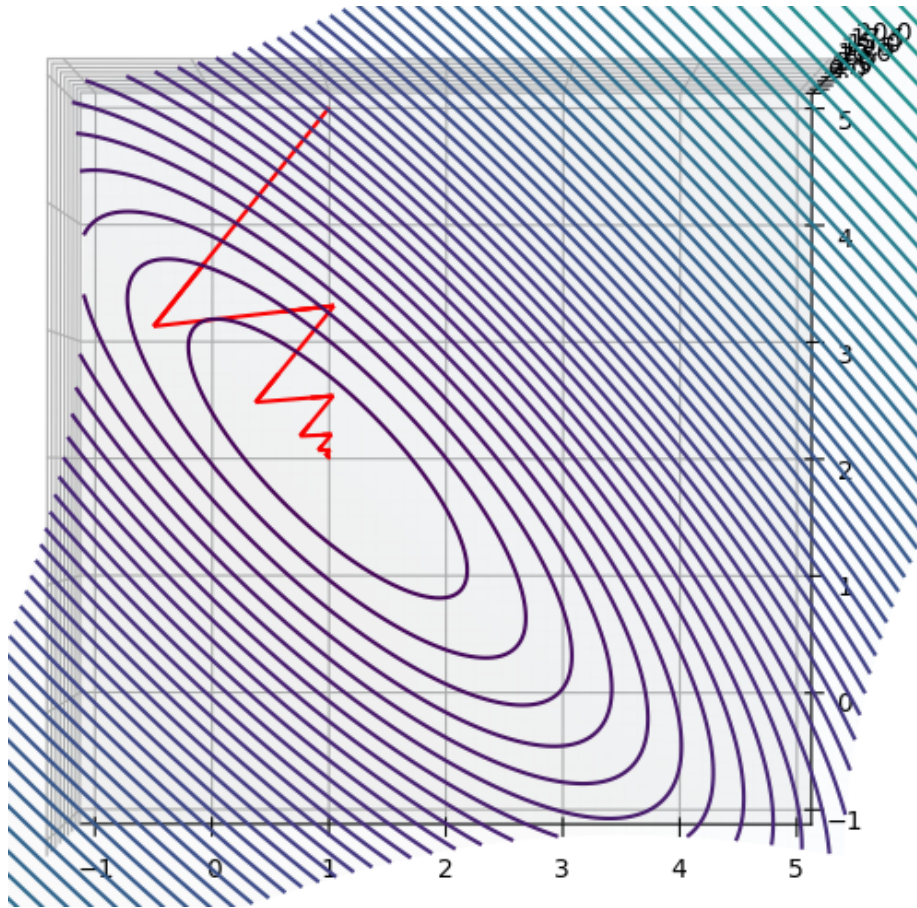
Repetera:

$$\mathbf{r} = \mathbf{Ax}_i - \mathbf{b}$$

Beräkna γ enligt (4)

Beräkna ∇f enligt (3)

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i - \gamma \frac{\nabla f}{|\nabla f|}$$



Ett 2-dimensionellt exempel med lösningen, $x_1 = 1, x_2 = 2$.

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 5 \end{pmatrix}$$

```

import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

# function definition to compute magnitude of a vector
def magnitude(vector):
    return np.sqrt(sum(pow(element, 2) for
        element in vector))

def fun(x, y):
    return 5*x**2 + 5*y**2 + 8*x*y - 26*x - 28 *y + 41

# function to calculate the gradient of f
def grad(a, r):
    return 2*np.matmul(np.transpose(a), r)

# function to calculate the multiplier gamma
def gamma(a, r):
    rtr = np.sqrt(np.matmul(np.transpose(r),r))
    return rtr**3/np.matmul(np.transpose(r),np.matmul(a, r))

#Plot setup
ax = plt.figure().add_subplot(projection='3d')
# Customize the axis.
ax.set_xlim(-1, 5)
ax.set_ylim(-1, 5)
ax.set_zlim(0, 20)
# Make data.
x = np.arange(-1, 5, 0.01)
y = np.arange(-1, 5, 0.01)
x, y = np.meshgrid(x, y)
z = fun(x, y)

# Plot the surface.
#surf = ax.plot_surface(x, y, z, cmap=cm.coolwarm,
#                        linewidth=0, antialiased=False)
surf = ax.plot_surface(x, y, z, alpha = 0.02)

CS = ax.contour(x, y, z, 100)
ax.clabel(CS, inline=True, fontsize=10)

#Define the arrays
a = 1.0*np.array([[2, 1],
                  [1, 2]])

b = 1.0*np.array([4, 5])

```

```

# initial guess
x = 1.0*np.array([1, 5])

for i in range(12):
    r = np.matmul(a, x) - b
    gradienten = grad(a, r)
    g = gamma(a, r)*gradienten/magnitude(gradienten)

    # draw vectors
    ax.quiver(x[0], x[1], 0, -g[0], -g[1], 0,
              length=1, color = 'r')

    x -= g
    print("x = ", x)

plt.show()

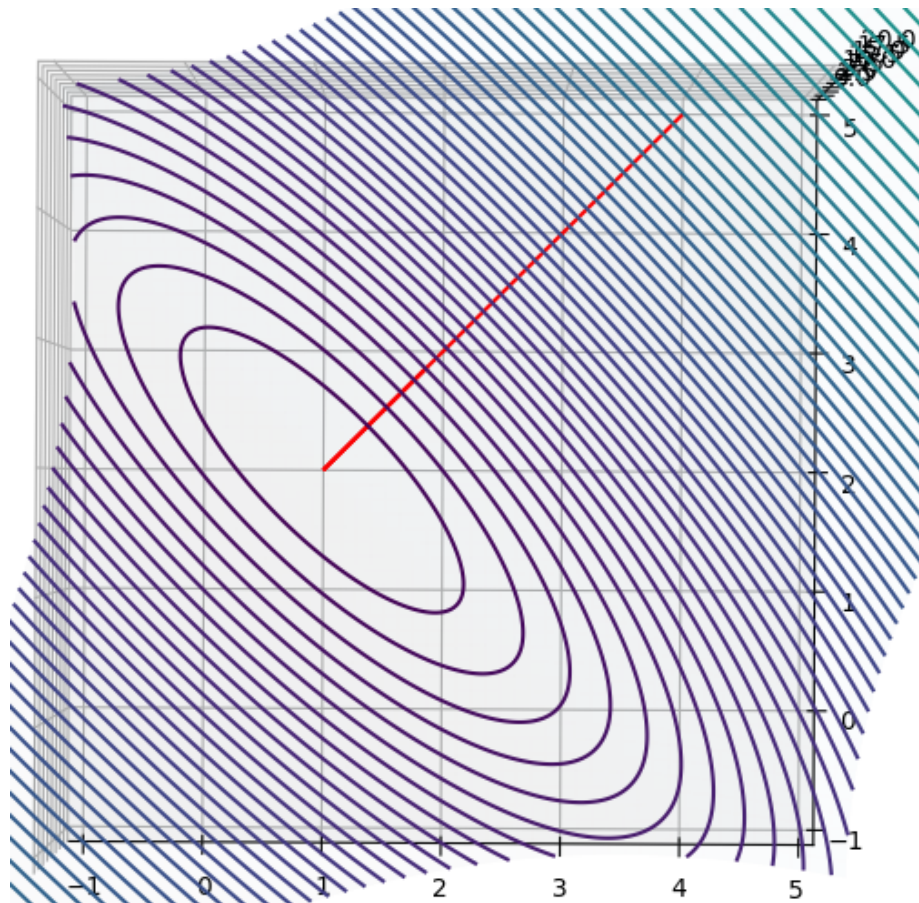
```

Output:

```

x = [-0.49663635  3.12920456]
x = [1.04269474  3.30591149]
x = [0.37358494  2.48134609]
x = [1.03538137  2.53560304]
x = [0.75340786  2.19281458]
x = [1.02054343  2.20571459]
x = [0.90924198  2.0721461 ]
x = [1.00984636  2.07354768]
x = [0.96895199  2.02506783]
x = [1.00408531  2.02433466]
x = [0.99018339  2.00804235]
x = [1.00149442  2.00741015]

```

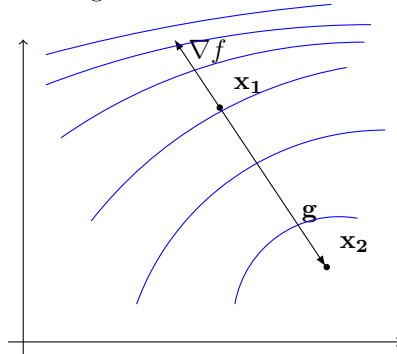


Om jag har tur med startgissningen hittas lösningen med bara en iteration!!
 Måste betyda att jag hittat rätt i beräkandet av faktorn γ . Tyvärr kan jag inte ta åt mig äran av den uträkningen. Hittade en formel som jag modifierade lite.

Output:

```
x = [1. 2.]
x = [1. 2.]
/Users/clasostman/misc/gradeq2d.py:18: RuntimeWarning: invalid
value encountered in scalar divide
  return rtr**3/np.matmul(np.transpose(r),np.matmul(a, r))
```

Jag vill se om jag kan lista ut ett eget värde på γ . När jag såg att kom direkt till lösningen vid lämpligt vald startpunkt började jag fundera på om jag kan utgå från det. Låt \mathbf{x}_1 vara en punkt sådan att, $-\nabla f(\mathbf{x}_1)$ pekar i riktning mot lösningen \mathbf{x}_2 .



Då får jag följande relationer från (2), (3) och ur figur.

$$\begin{aligned}\mathbf{g} &= \gamma \nabla f = 2\gamma \mathbf{A}^T \mathbf{r} \\ \mathbf{x}_2 - \mathbf{g} - \mathbf{x}_1 &= \mathbf{0} \\ \mathbf{x}_2 &= \mathbf{g} + \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{r} &= \mathbf{A}\mathbf{x}_1 - \mathbf{b} \\ \mathbf{r}_2 &= \mathbf{A}\mathbf{x}_2 - \mathbf{b} = \mathbf{0} \\ \mathbf{r}_2 &= \mathbf{A}(\mathbf{g} + \mathbf{x}_1) - \mathbf{b} = \mathbf{A}(2\gamma \mathbf{A}^T \mathbf{r} + \mathbf{x}_1) - \mathbf{b} = \\ &= 2\gamma \mathbf{A}\mathbf{A}^T \mathbf{r} + \mathbf{A}\mathbf{x}_1 - \mathbf{b} = 2\gamma \mathbf{A}\mathbf{A}^T \mathbf{r} + \mathbf{r} = \mathbf{0}\end{aligned}$$

För att få en skalär multiplicerar jag med \mathbf{r}^T .

$$2\gamma \mathbf{r}^T \mathbf{A}\mathbf{A}^T \mathbf{r} + \mathbf{r}^T \mathbf{r} = 0$$

$$\gamma = -\frac{\mathbf{r}^T \mathbf{r}}{2\mathbf{r}^T \mathbf{A}\mathbf{A}^T \mathbf{r}} \quad (5)$$

Se där, ett egenproducerat värde på γ ! Nya tester visar att det fungerar.

Nu ser iterationsschemat lite annorlunda ut.

$$\mathbf{x}_0 = \tilde{\mathbf{x}}$$

Repetera:

$$\mathbf{r} = \mathbf{A}\mathbf{x}_i - \mathbf{b}$$

Beräkna γ enligt (5)

Beräkna ∇f enligt (3)

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \gamma \nabla f$$