Lösa ekvationssystem numeriskt med gradientmetod???

Clas Östman

april 2023

Lös ekvationssystemet,

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{1}$$

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 $\mathbf{r}^\intercal\mathbf{r}$ går mot 0. Låt $f = \mathbf{r}^\intercal\mathbf{r}$. 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.

$$\mathbf{r} = \mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b} \tag{2}$$

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

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

$$\begin{gathered} f = \mathbf{r}^\intercal\mathbf{r} = \sum_{i=1}^{n} r_i^2 = \\ = (a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n - b_1)(a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n - b_1) + \\ + (a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n - b_2)(a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n - b_2) + \\ \vdots \\ + (a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n - b_n)(a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n - b_n) = \end{gathered}$$

$$
\begin{aligned}
=&a_{11}^2x_1^2 + a_{11}a_{12}x_1x_2 + \ldots + a_{11}a_{1n}x_1x_n - a_{11}b_1x_1 + \\
+&a_{11}a_{12}x_1x_2 + a_{12}^2x_2^2 + \ldots + a_{12}a_{1n}x_2x_n - a_{12}b_1x_2 + \\
+&a_{11}a_{1n}x_1x_n + a_{12}a_{1n}x_2x_n + \ldots + a_{1n}^2x_n^2 - a_{1n}b_1x_n + \\
-&a_{11}b_1x_1 - a_{12}b_1x_2 - \ldots - a_{1n}b_1x_n + b_1^2 \\
+&\ldots =
\end{aligned}
$$

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

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

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 $\mathbf{r}^\intercal\mathbf{r} >= 0$ och därför har minimum vid lösningen. Istället för att beskriva gradienten med den jobbiga summan kan man skriva,

$$
\nabla f = 2\mathbf{A}^\intercal(\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}) = 2\mathbf{A}^\intercal\mathbf{r} \tag{3}
$$

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.

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

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

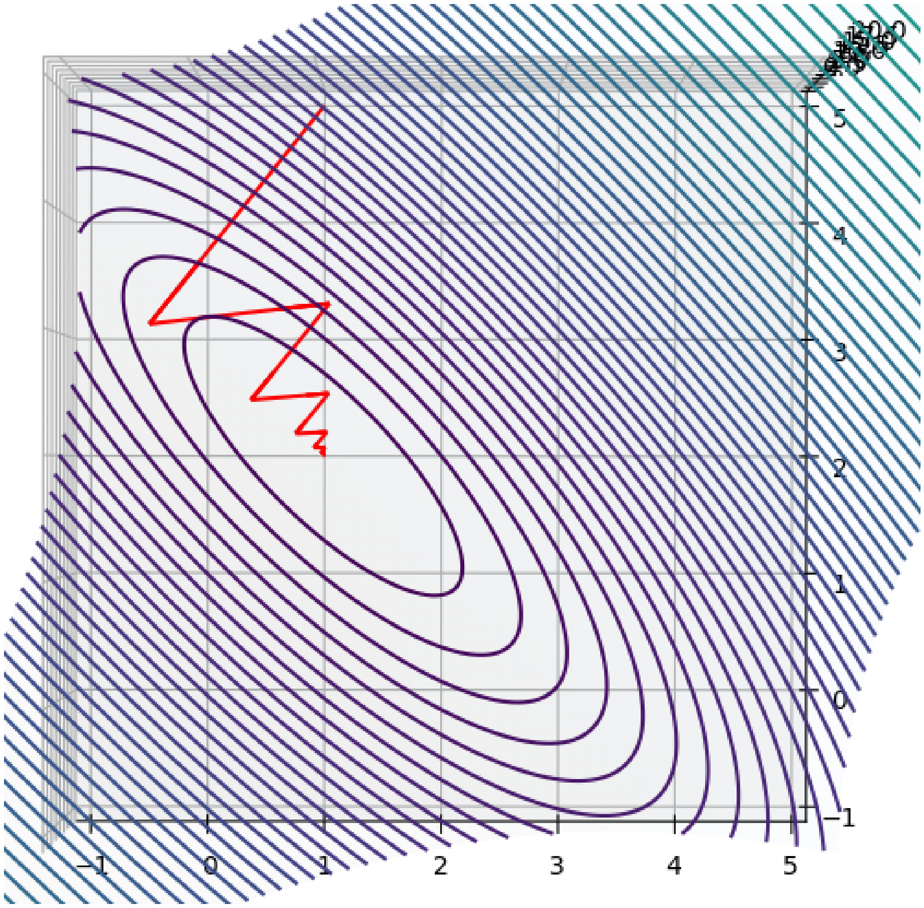
$$
\mathbf{x}_0 = \tilde{\mathbf{x}}
$$

Repetera:

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

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, $x_1 = 1, x_2 = 2$.

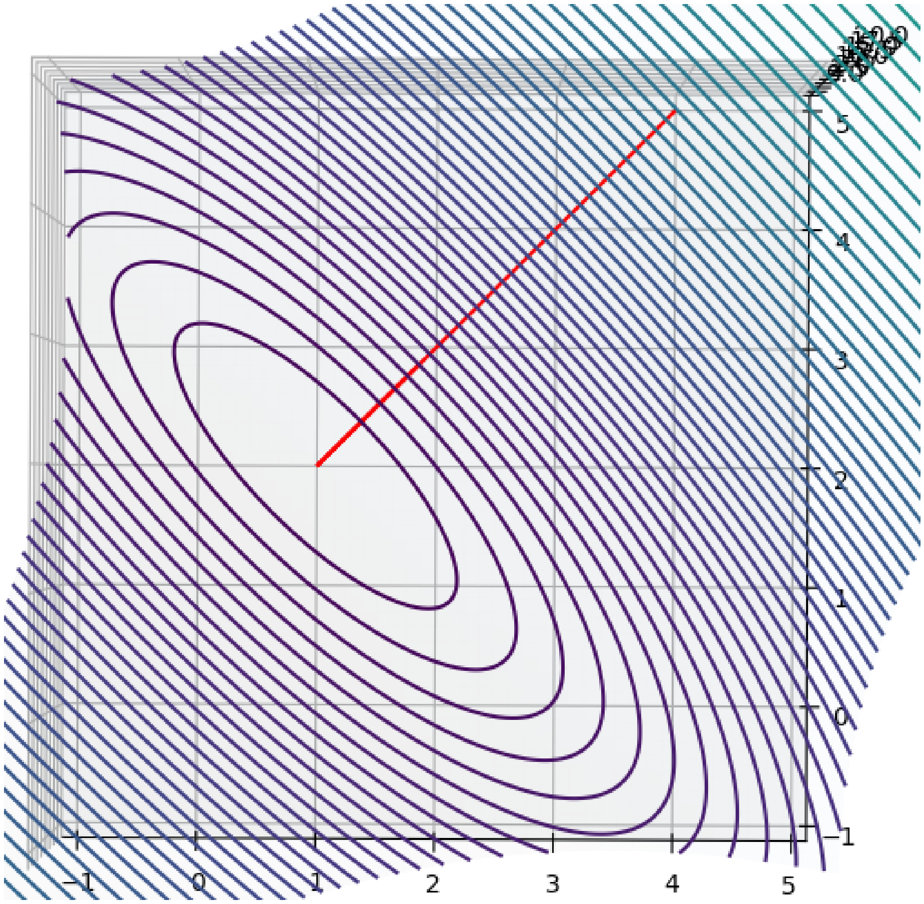
$$\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 5 \end{pmatrix}$$

```
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 multiplicator 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]
```



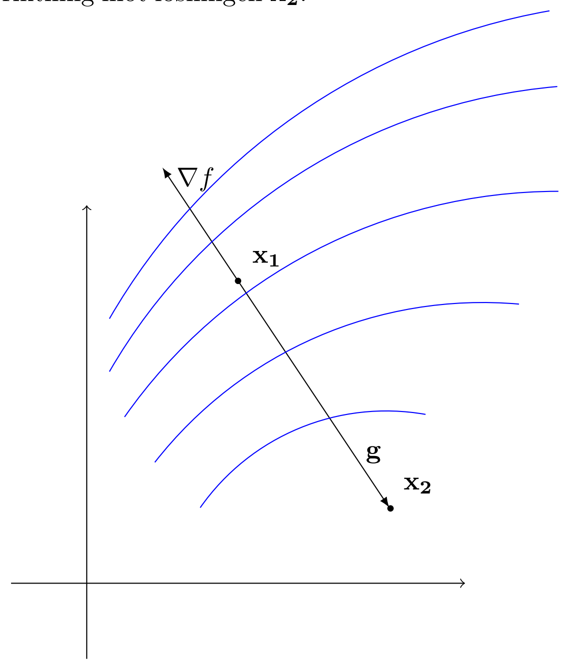
Om jag har tur med startgissningen hittas lösningen med bara en iteration!! Måste betyda att jag hittat rätt i beräknandet av faktorn γ. Tyvärr kan jag inte ta åt mig äran av den uträkningen. Hittade en formel som jag modifierade lite.

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.

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

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

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

$$\gamma = -\frac{\mathbf{r}^\intercal \mathbf{r}}{2\mathbf{r}^\intercal \mathbf{A}\mathbf{A}^\intercal \mathbf{r}} \tag{5}$$

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)

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