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.

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

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

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

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

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

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

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

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,

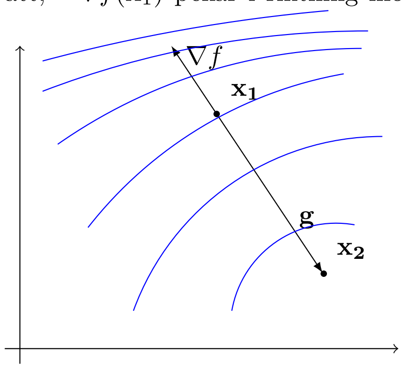
$$
\sum_{k=1}^{n} a_{jk}x_k - b_j
$$

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 gradienten för att, förhoppningsvis, komma närmare lösningen.

Jag vill se om jag kan lista ut ett värde på γ. Låt $\mathbf{x_1}$ vara en punkt sådan att, $-\nabla f(\mathbf{x}_1)$ pekar i riktning mot lösningen $\mathbf{x_2}$. $\mathbf{g}$ är vektorn från $\mathbf{x_1}$ till $\mathbf{x}_2$



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 $\mathbf{r}^\intercal$.

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

$$\gamma = -\frac{\mathbf{r}^\intercal \mathbf{r}}{2\mathbf{r}^\intercal \mathbf{A}\mathbf{A}^\intercal \mathbf{r}} \tag{4}$$

Se där, ett egenproducerat värde på γ! För att minska på antalet beräkningar räknar jag ut $\mathbf{A}\mathbf{A}^\intercal$ en gång för alla och sätter $\mathbf{M} = \mathbf{A}\mathbf{A}^\intercal$.

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

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

$$
\begin{gathered}
\mathbf{M} = \mathbf{A}\mathbf{A}^\intercal \\
\mathbf{x}_0 = \tilde{\mathbf{x}}
\end{gathered}
$$

Repetera:

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

Beräkna γ enligt (5)
Beräkna ∇f enligt (3)

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

Testar med ett 2-dimensionellt exempel.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}, \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 4 \\ 5 \end{pmatrix}, \mathbf{x}_0 = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 5 & 4 \\ 4 & 5 \end{pmatrix}$$

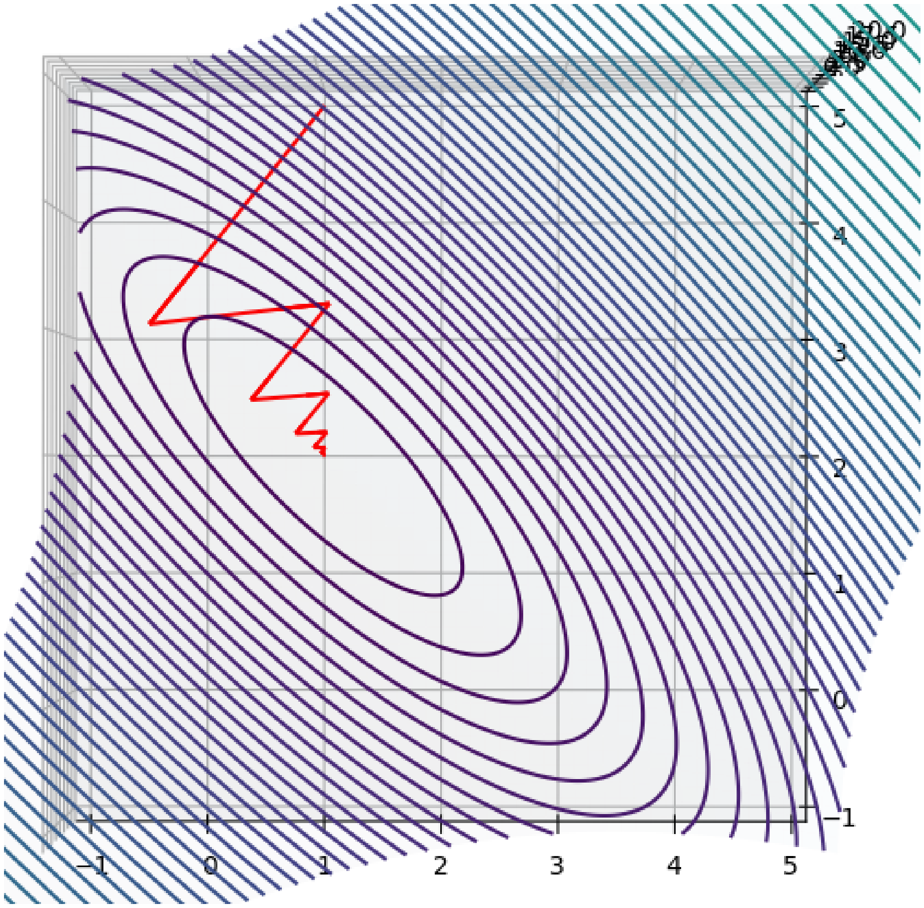
$$\mathbf{r} = \mathbf{A}\mathbf{x}_0 - \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 6 \\ 6 \end{pmatrix}$$

$$\gamma = -\frac{\mathbf{r}^\intercal \mathbf{r}}{2\mathbf{r}^\intercal \mathbf{M}\mathbf{r}} = -\frac{72}{1296} = -\frac{1}{18}$$

$$\nabla f = 2\mathbf{A}^\intercal \mathbf{r} = \begin{pmatrix} 36 \\ 36 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 + \gamma \nabla f = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} + -\frac{1}{18}\begin{pmatrix} 36 \\ 36 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

Vilket är lösningen.



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(M, r):
    return -1/2.0*np.matmul(np.transpose(r),r)/
            np.matmul(np.transpose(r),np.matmul(M,r))

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)

a = 1.0*np.array([[2, 1],
                  [1, 2]])

b = 1.0*np.array([1, 5])

# initial guess
x = 1.0*np.array([0, 0])
```

```
    M = np.matmul(a, np.transpose(a))

    for i in range(16):
        r = np.matmul(a, x) - b

        gradienten = grad(a, r)
        gam = gamma(a, r)
        g = gam*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]
```