Princip řešení soustavy rovnic

Tomáš Kroupa

20. května 2014

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Tento studijní materiál je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.

Obsah

Obsah

Soustava lineárních rovnic

Když se řekne vyřešme soustavu rovnic myslí se tím, že najdeme takové hodnoty vektoru $\mathbf{x} = [x_1, x_2, ..., x_N]^T$, které splňují[1]:

$$\begin{aligned} F_1(x_1, x_2, ..., x_N) &= 0 \\ F_2(x_1, x_2, ..., x_N) &= 0 \\ \vdots \quad &\vdots \quad \vdots \\ F_N(x_1, x_2, ..., x_N) &= 0 \end{aligned} \tag{1}$$

tedy

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}. \tag{2}$$

[1] Často se najde řešení, které je „jen“ velmi blízko tohoto stavu.

Soustava lineárních rovnic

Soustavou lineárních rovnic myslíme takovou to soustavu, která lze přepsat do tohoto tvaru:

$$\begin{array}{ccccccccccc}
a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & a_{13}x_3 & + & \dots & + & a_{1N}x_N & = & b_1 \\
a_{21}x_1 & + & a_{22}x_2 & + & a_{23}x_3 & + & \dots & + & a_{2N}x_N & = & b_2 \\
\vdots & + & \vdots & + & \vdots & + & \ddots & + & \vdots & = & \vdots \\
a_{N1}x_1 & + & a_{N2}x_2 & + & a_{N3}x_3 & + & \dots & + & a_{NN}x_N & = & b_N
\end{array} \tag{3}$$

V této soustavě jsou a_{ij} koeficienty u neznámých x_j v řádce s pravou stranou rovnou b_i. Takováto soustava lze přepsat do maticového tvaru

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}. \tag{4}$$

Obsah

Gaussovo eliminace

V zásadě se metody řešení soustavy lineárních rovnic dělí na přímé a iterační.

- Jako přímou uveďmě klasickou Gaussovu eliminaci `http://cs.wikipedia.org/wiki/Soustava_lineárních_rovnic`.
- Princip je takový, že se matice **A** se převede na horní trojúhelníkovou matici a pak se dopočítají hodnoty neznámých.
- Doporučuji se seznámit s termíny jako, podmíněnost matice, pozitivně definitní matice, řídká matice atd[2]. Při řešení velkých soustav rovnic se ještě uplatňuje spousta vychytávek, jako přeházení řádků atd.

[2] Opět doporučuji www.google.com

Jakobiova metoda

Ukažme Jakobiovu metodu[3] jako jednu z iteračních. Obzvláště se hodí v případě, že je matice $\mathbf{A}$ řídká[4].
Zde uveďme jednu metodu a to Jakobiovu. Sestavíme posloupnost řešeních $\mathbf{x}^{(1)} \to \mathbf{x}^{(2)} \to \mathbf{x}^{(3)} \to \ldots$ pomocí následující formule

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1 (j \neq i)}^{N} a_{ij} x_j^{(k)} \right) \text{ pro } i = 1, 2, \ldots, N. \tag{5}$$

Výpočet ukončíme iterací pro níž bude platit například, že

$$\left\| \mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)} \right\| \leq \epsilon \left\| \mathbf{x}^{(k)} \right\|, \tag{6}$$

kde ϵ je malé číslo.

[3] Po úplný přehled metod odkažme na www.google.com

[4] To u MKP analýz bývá časté

Princip

Iterační přístup. Jde o to stanovit takovou posloupnost

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha^{(k)}\mathbf{d}^{(k)}, \tag{7}$$

která konverguje k řešení.

- $\mathbf{x}^{(k+1)}$ je vektor neznámých pro krok $k+1$
- $\mathbf{x}^{(k)}$ je vektor neznámých v kroku k
- $\alpha^{(k)}$ je tzv. délka kroku (step length)
- $\mathbf{d}^{(k)}$ je směr prohledávání (search direction).

Nejprve se vždy určí směr prohledávání a pak se provede jednorozměrná minimalizace, tak aby se vhodnou volbou parametru $\alpha^{(k)}$ dosáhlo co nejmenší funkční hodnoty.

Jakobián

Klíč k řešení tedy tkví v nalezení směru hledání $\mathbf{d}^{(k)}$. Základní myšlenkou je úvaha, začínající jako mnoho matematických úvah Taylorovým rozvojem. Proveďme Taylorův rozvoj kolem bodu $\mathbf{x}^{(k+1)}$

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{d}^{(k)}) = \mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)}) + \mathbf{J}^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}^{(k)})\mathbf{d}^{(k)}, \tag{8}$$

kde $\mathbf{J}$ je tzv. Jakobián soustavy

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_1} & \frac{\partial F_2}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial F_N}{\partial x_1} \\ \frac{\partial F_1}{\partial x_2} & \frac{\partial F_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial F_N}{\partial x_2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial F_1}{\partial x_N} & \frac{\partial F_2}{\partial x_N} & \cdots & \frac{\partial F_N}{\partial x_N} \end{pmatrix}. \tag{9}$$

Stanovení směru prohledávání

K následujícímu vztahu se dojde po jednoduché úvaze a to, že si řekneme, že následující krok jsme v bodě řešení. Což je poměrně důležitý předpoklad, z matematického pohledu na věc tím říkáme, že vše bude pravděpodobně fungovat velmi dobře v okolí bodu řešení. Touto úvahou dostaneme

$$\mathbf{0} = \mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)}) + \mathbf{J}^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}^{(k)})\mathbf{d}^{(k)} \tag{10}$$

a tedy

$$\mathbf{J}^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}^{(k)})\mathbf{d}^{(k)} = -\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)}). \tag{11}$$

Newtonova metoda

- V tuhle chvíli máme v podstatě nadefinovaný proces hledání řešení soustavy klasickou Newtonovo metodou.
- Ještě se musí vhodně odhadnout začátek procesu, tedy $\mathbf{x}^{(0)}$. Opět upozorníme na úvahu, že vše dobře funguje v okolí bodu řešení[5], čili odhad počátečního vektoru řešení je extrémně důležitý.
- Pozorný čtenář si jistě všimne, že výpočet směru hledání pomocí Jakobiánu soustavy v sobě skrývá nebezpečí. V určitém kroku řešení nemusí Jakobián soustavy být pozitivně definitní matice, nebo to může být velmi špatně podmíněná matice a soustava (11) nemusí být řešitelná.

[5] Co přesně je okolí? Nikdo ve skutečnosti neví.

Newtonova metoda

1. Odhadnout $\mathbf{x}^{(0)}$ z toho vypočítat hodnotu $\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(0)})$.
2. Vypočítat Jakobián $\mathbf{J}(\mathbf{x}^{(k)})$.
3. Test konvergence δ je malé číslo. Pokud

$$\|\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)})\|_2 \leq \delta \tag{12}$$

   je konec výpočtu, pokud podmínka není splněna pokračuje se dál.
4. Řešíme soustavu lineárních rovnic a tím získáme směr hledání

$$\left(\mathbf{J}(\mathbf{x}^{(k)})\right)^{\mathrm{T}} \mathbf{d}^{(k)} = -\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)}). \tag{13}$$

5. Nastavíme $k = k + 1$, vytvoříme vektor neznámých pro další krok $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{d}^{(k)}$ a pokračujeme na krok 2.

Broydenova metoda

- S fakty uvedenými v odstavci o Newtonově metodě a nevhodném Jakobiánu se zabývalo spousty vědců a matematiků po celém světě.
- Z tohoto důvodu byly vytvořeny kvazi-Newtonovské metody.
- Jedno řešení navrhl jistý pan Broyden[6]. Ten odvodil formuli pro postupné dopočítávání aproximace Jakobiánu ve tvaru

$$\mathbf{B}^{(k+1)} = \mathbf{B}^{(k)} + \frac{\left(\left(\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)}) - \mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k-1)})\right) - \mathbf{B}^{(k)}\mathbf{d}^{(k)}\right)\mathbf{d}^{(k)}}{\left(\mathbf{d}^{(k)}\right)^{\mathrm{T}}\mathbf{d}^{(k)}}. \quad (14)$$

Matice $\mathbf{B}$ nahrazuje $\mathbf{J}^{\mathrm{T}}$. Matice $\mathbf{B}^{(0)}$ je obvyklle rovna $\mathbf{I}$.

[6]Mimochodem tenhle pan Broyden je druhé písmeno v názvu optimalizační metody LBFGS = Limited memory Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno, která je implementovaná do programu OptiSLang.

Broydenova metoda

1. Odhadnout $\mathbf{x}^{(0)}$ z toho vypočítat hodnotu $\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(0)})$.
2. Vytvořit aproximaci Jakobiánu
   2.1 Pokud je $k = 0$ odhadnout $\mathbf{B}^{(0)}$ ($\mathbf{B}^{(0)} = \mathbf{I}$ nebo $\mathbf{B}^{(0)} = \mathbf{J}(\mathbf{x}^{(0)})$)
   2.2 Pokud je $k > 0$. Vypočítat $\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)})$ a stanovit aproximaci Jakobiánu ze vztahu

$$\mathbf{B}^{(k)} = \mathbf{B}^{(k-1)} + \frac{\left(\left(\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)}) - \mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k-1)})\right) - \mathbf{B}^{(k-1)}\mathbf{d}^{(k-1)}\right)(\mathbf{d}^{(k-1)})^{\mathrm{T}}}{\left(\mathbf{d}^{(k-1)}\right)^{\mathrm{T}}\mathbf{d}^{(k-1)}}. \tag{15}$$

3. Test konvergence, δ je malé číslo. Pokud

$$\|\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)})\|_2 \leq \delta \tag{16}$$

   je konec výpočtu, pokud podmínka není splněna pokračuje se dál.
4. Řešíme soustavu lineárních rovnic a tím získáme směr hledání

$$\left(\mathbf{B}^{(k)}\right)^{\mathrm{T}}\mathbf{d}^{(k)} = -\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)}). \tag{17}$$

5. Nastavíme $k = k + 1$, vytvoříme vektor neznámých pro další krok $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{d}^{(k)}$ a pokračujeme na krok 2.

Tato prezentace je spolufinancována Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky v rámci projektu č. **CZ.1.07/2.2.00/28.0206**

„Inovace výuky podpořená praxí“.

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Tento studijní materiál je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.