1 Gradijent funkcije više varijabli

Simbol $\frac{\partial}{\partial x_i}$ predstavlja parcijalnu derivaciju prvog reda po i-toj komponenti vektora $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$. Simbol $\nabla_{\mathbf{x}}$ označava gradijent po vektorskoj varijabli $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, tj. $\nabla_{\mathbf{x}} = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \ldots, \frac{\partial}{\partial x_n}\right)$. Ako za neku funkciju postoje derivacije svakog reda do uključivo k i neprekidne su tada tu funkciju zovemo C^k-funkcija.

Neka je funkcija $f : S \to \mathbb{R}$, $S \subset \mathbb{R}^n$ skalarna funkcija n nezavisnih varijabli. Uobičajeno je da se varijable smatraju elementima vektora $\mathbf{x} = [x_1\, x_2\, \ldots\, x_n]^{\mathrm{T}}$. Funkcija f je diferencijabilna u $\mathbf{x}$ ako postoji vektor $\mathbf{g}$ dimenzije $1 \times n$ takav da je

$$\lim_{\mathbf{y} \to 0} \frac{f(\mathbf{x}+\mathbf{y}) - f(\mathbf{x}) - \mathbf{g} \cdot \mathbf{y}}{\|\mathbf{y}\|} = 0, \tag{1}$$

gdje je $\mathbf{g} \cdot \mathbf{y}$ skalarni produkt, a $\| \cdot \|$ je bilo koja vektorska norma od $\mathbf{y}$.

Definicija 1.1 (Gradijent)**.** *Ako postoji* $\mathbf{g}$ *koji zadovoljava* (1)*, tada se taj vektor naziva gradijent funkcije* $f(\mathbf{x})$ *po vektorskoj varijabli* $\mathbf{x}$ *čiji su elementi* $\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_j}$*,* $j = 1, \ldots, n$*, tj.*

$$\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) = \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_2} & \ldots & \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_n} \end{bmatrix}. \tag{2}$$

Funkcija $f(\mathbf{x})$ je diferencijabilna na domeni S ako $\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x})$ postoji za svaki $\mathbf{x} \in S$ i neprekidno diferencijabilna ako je $\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x})$ neprekidna funkcija od $\mathbf{x}$, što označavamo s $f \in C^1(S)$.

1.1 Računanje gradijenta funkcije više varijabli primjenom metode konačnih diferencija

Osim analitičkim putem, prethodno navedeni vektor može se računati i numerički primjenom formula konačnih diferencija.

Izvod formule za računanje gradijenta primjenom metode konačnih diferencija temelji se na unaprijednom i unazadnom Taylorovom razvoju funkcije $f(\mathbf{x})$ oko x_j:

$$f(\mathbf{x} + h\,\mathbf{e}_j) = f(\mathbf{x}) + h\,\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{e}_j + \frac{h^2}{2!}\,\mathbf{e}_j^{\mathrm{T}} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}^2 f(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{e}_j + \ldots, \tag{3}$$

$$f(\mathbf{x} - h\,\mathbf{e}_j) = f(\mathbf{x}) - h\,\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{e}_j + \frac{h^2}{2!}\,\mathbf{e}_j^{\mathrm{T}} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}^2 f(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{e}_j - \ldots, \tag{4}$$

iz kojih slijedi

$$f(\mathbf{x} + h\,\mathbf{e}_j) - f(\mathbf{x} - h\,\mathbf{e}_j) = 2h\,\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{e}_j + \mathcal{O}(h^2). \tag{5}$$

Rješenje jednadžbe (5) za $\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{e}_j$ je

$$\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{e}_j = \frac{f(\mathbf{x} + h\,\mathbf{e}_j) - f(\mathbf{x} - h\,\mathbf{e}_j)}{2h} - \mathcal{O}(h^2), \tag{6}$$

što predstavlja formulu centralne diferencije za aproksimaciju derivacije prvog reda. $\mathcal{O}(h^2)$ je *greška odsijecanja* (engl. *truncation error*), dok je $\mathbf{e}_j$ jedinični vektor (vektor odgovarajuće dimenzije kojemu je j-ti element jednak 1).

Implementacija metode konačnih diferencija na računalu se može ostvariti na sljedeći način:

Algoritam 1 Računanje gradijenta $\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x})$ primjenom metode konačnih diferencija

Ulaz: n, h, $\mathbf{x}$, $f(\mathbf{x})$

Izlaz: $\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x})$

$\mathbf{x1} \leftarrow \mathbf{x}$

$\mathbf{x2} \leftarrow \mathbf{x1}$

for $j = 1$ to n **do**

  $x2_j \leftarrow x2_j + h$

  $x1_j \leftarrow x1_j - h$

  $f1 \leftarrow f(\mathbf{x1})$

  $f2 \leftarrow f(\mathbf{x2})$

  $\dfrac{\partial f(x_j)}{\partial x_j} \leftarrow \dfrac{f2 - f1}{2h}$

  $x1_j \leftarrow x1_j + h$

  $x2_j \leftarrow x1_j$

end for

Metoda konačnih diferencija je jednostavan pristup te se zbog toga često koristi u različitim numeričkim algoritmima za aproksimaciju derivacija. Međutim, formule konačnih diferencija uključuju i greške ovisne o veličini koraka h. Može se očekivati točnija aproksimacija što je korak h manji. Međutim, postavljanje proizvoljno malog koraka h nije izvedivo na računalu, budući da za jako mali h članovi u brojnicima izraza (6) postaju takvi da računalo ne prepoznaje razliku između dva približno jednaka broja (problem kraćenja, engl. *cancellation*). Ovaj problem nas tjera na konzervativan izbor koraka h na štetu točnosti algoritma.