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* $\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i}$*,* $i = 1, \ldots, n$*, tj.*

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

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 primjenom metode kompleksne varijable

Osim analitičkim putem, prethodno navedeni vektor može se računati i na sljedeće načine: numerički primjenom formula konačnih diferencija i primjenom metode kompleksne varijable.

Poznato je da izrazi u brojnicima formula konačnih diferencija postaju takvi da računalo ne prepoznaje razliku između dva približno jednaka broja (problem kraćenja, engl. *cancellation*). Ovaj problem nas tjera na konzervativan izbor koraka diferenciranja na štetu točnosti algoritma.

Manje intuitivan pristup je primjena kompleksnih brojeva za računanje derivacija realnih funkcija. Primjenom kompleksne varijable uklanja se problem kraćenja, pa samim time aproksimacija derivacije je točnija. Metodu se formalno naziva koračna kompleksna metoda (engl. *complex step method*).

Razvojem $f(\mathbf{x} + i\,h\,\mathbf{e}_j)$ u Taylorov niz za neki mali iznos h

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

dobiva se

$$\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{e}_j = \frac{\mathcal{I}m\,\{f(\mathbf{x} + i\,h\,\mathbf{e}_j)\}}{h} + \mathcal{O}(h^2). \tag{4}$$

U gornjim izrazima i predstavlja imaginarni broj ($i^2 = -1$), dok je $\mathbf{e}_j$ jedinični vektor (vektor odgovarajuće dimenzije kojemu je j-ti element jednak 1).

Vidimo da se u brojniku izraza (4) ne pojavljuje oduzimanje, tj. uklonjen je problem kraćenja. To znači da korak h može biti izuzetno mali (npr. $h = 10^{-100}$), pa se tako derivacija može izračunati do strojne preciznosti.

Implementacija kompleksne metode može biti vrlo jednostavno ostvarena primjenom nekog višeg programskog jezika[1] koji ne zahtijeva prethodno definiranje tipa varijabli, nego je moguće automatski primjenom ugrađenih funkcija definirati kompleksne varijable. U tom slučaju kompleksna metoda se može zapisati u obliku sljedećeg algoritma:

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

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

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

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

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

  $x1_j \leftarrow complex(x_j, h)$

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

  $\dfrac{\partial f(x_j)}{\partial x_j} \leftarrow \dfrac{imag(f1)}{h}$

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

end for

[1] Na primjer MATLAB ima ugrađene funkcije `complex()`, `imag()`, `real()` itd. za rad s kompleksnim varijablama.

Zadatak 1.1. *Napišite program u MATLABu (`for-end` petlja) koji će računati gradijent funkcije više varijabli primjenom kompleksne metode prema algoritmu 1.*

Program ispitajte računanjem gradijenta funkcije

$$f(x_1, x_2, x_3) = \frac{x_1 x_2 \sin(x_3) + e^{x_1 x_2}}{x_3},$$

u točkama $x_1 = 1$, $x_2 = 1.5$, $x_3 = 0.5$ *za različite vrijednosti koraka* h, *npr.* $h = 10^{-k}$ *za* $k = 1, 2, 3, \ldots, 50$. *Usporedite dobiveno rješenje s analitičkim za svaki korak* h. *Analitičko rješenje je*

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f}{\partial x_1} &= \frac{x_2 \sin(x_3) + x_2 e^{x_1 x_2}}{x_3}, \\
\frac{\partial f}{\partial x_2} &= \frac{x_1 \sin(x_3) + x_1 e^{x_1 x_2}}{x_3}, \\
\frac{\partial f}{\partial x_3} &= \frac{-x_1 x_2 \sin(x_3) - e^{x_1 x_2} + x_1 x_2 x_3 \cos(x_3)}{x_3^2}.
\end{aligned}$$