

Grad-Div-Rot, Richtingsafgeleide en Newton-Raphson

Grad-Div-Rot en Richtingsafgeleide: blz 2-6

Opgaven R1 t/m R4: blz 7

Opgaven N1 t/m N7: blz 8-9

Tekst over Newton-Raphson in meer dimensies: blz 10-13

Opgaven N8 t/m N11: blz 14

Grad, Div, Rot en de richtingsafgeleide

Overzicht

gradient van een scalaire functie $f(x, y, z)$

$$\text{grad } f = \nabla f = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x} \\ \frac{\partial f}{\partial y} \\ \frac{\partial f}{\partial z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x} & \frac{\partial f}{\partial y} & \frac{\partial f}{\partial z} \end{pmatrix}^T$$

"nabla"

$$= \frac{\partial f}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial f}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial f}{\partial z} \vec{k}$$

} een vector

"De richting van de vector $\text{grad } f$ in een punt P is de richting van de maximale toename van f in dat punt"

$f(x, y, z) = c$ ← "constante" beschrijft een oppervlak in $\mathbb{R}^3$

$vb_1 \quad \underbrace{x^2 + y^2 + z^2}_{f(x, y, z)} = 4$: een sfer oppervlak

$vb_2 \quad \underbrace{z^2 - 4(x^2 + y^2)}_{f(x, y, z)} = 0$: een kegel oppervlak

$\text{grad } f$ staat loodrecht op het oppervlak $f(x, y, z) = c$

divergentie van een vector functie $\vec{v}(x, y, z) = (v_1(x, y, z), v_2(x, y, z), v_3(x, y, z))$

$$\text{div } \vec{v} = \nabla \cdot \vec{v} = \frac{\partial v_1}{\partial x} + \frac{\partial v_2}{\partial y} + \frac{\partial v_3}{\partial z}$$

"nabla" ↑ inproduct

} een scalaire functie

"meet" de flux/stroming in een snelheidsveld of magnetisch veld bijvoorbeeld.

$\text{div}(\vec{v}) = 0$: "uitstroom" = "instroom"
 $\text{div}(\vec{v}) > 0$: "uitstroom" > "instroom"
 $\text{div}(\vec{v}) < 0$: "uitstroom" < "instroom"

} netto in een bepaald gebied in $\mathbb{R}^3$

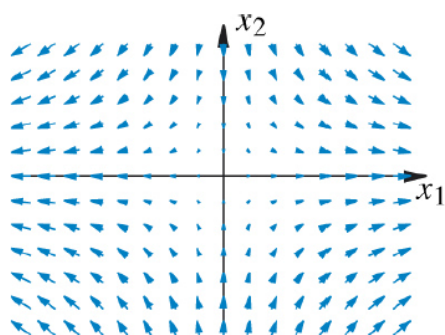
rotatie van een vector functie $\vec{v}(x, y, z)$

$$\text{rot}(\vec{v}) = \text{curl}(\vec{v}) = \nabla \times \vec{v} = \begin{pmatrix} \frac{\partial v_3}{\partial y} - \frac{\partial v_2}{\partial z} \\ \frac{\partial v_1}{\partial z} - \frac{\partial v_3}{\partial x} \\ \frac{\partial v_2}{\partial x} - \frac{\partial v_1}{\partial y} \end{pmatrix}$$

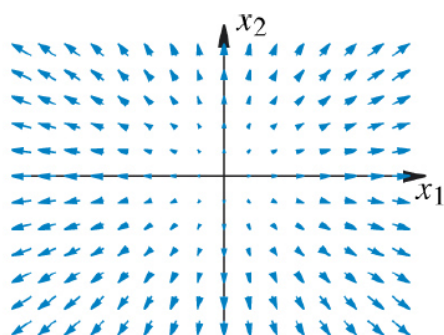
"nabla" ↑ uitproduct

} een vector

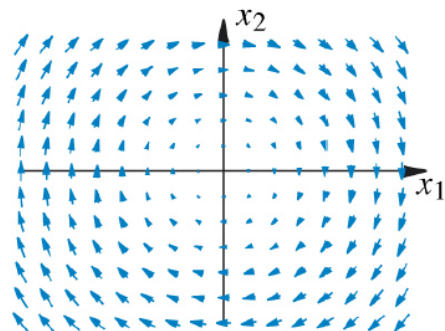
Voorbeelden met Div en Rot



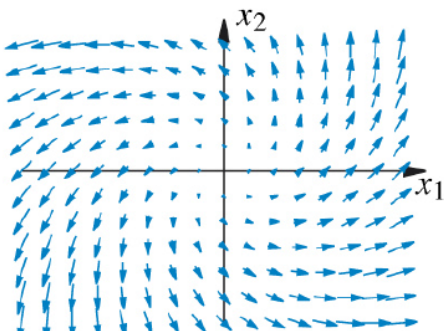
$$\operatorname{div} v = 0, \operatorname{rot} v = \mathbf{0}$$



$$\operatorname{div} v \neq 0, \operatorname{rot} v = \mathbf{0}$$



$$\operatorname{div} v = 0, \operatorname{rot} v \neq \mathbf{0}$$



$$\operatorname{div} v \neq 0, \operatorname{rot} v \neq \mathbf{0}$$

De richtingsafgeleide ('directional derivative')

Let the function $f(x, y)$ be the height of a mountain range at each point $\mathbf{x} = (x, y)$. If you stand at some point $\mathbf{x} = \mathbf{a}$, the slope of the ground in front of you will depend on the direction you are facing. It might slope steeply up in one direction, be relatively flat in another direction, and slope steeply down in yet another direction.

The **partial derivatives** of f will give the slope $\frac{\partial f}{\partial x}$ in the positive x direction and the slope $\frac{\partial f}{\partial y}$ in the positive y direction. We can generalize the partial derivatives to calculate the slope in any direction. The result is called the *directional derivative*.

The first step in taking a directional derivative, is to specify the direction. One way to specify a direction is with a vector $\mathbf{u} = (u_1, u_2)$ that points in the direction in which we want to compute the slope. For simplicity, we will insist that $\mathbf{u}$ is a **unit vector**. We write the directional derivative of f in the direction $\mathbf{u}$ at the point $\mathbf{a}$ as $D_{\mathbf{u}}f(\mathbf{a})$. We could define it with a limit definition just as an ordinary derivative or a **partial derivative**

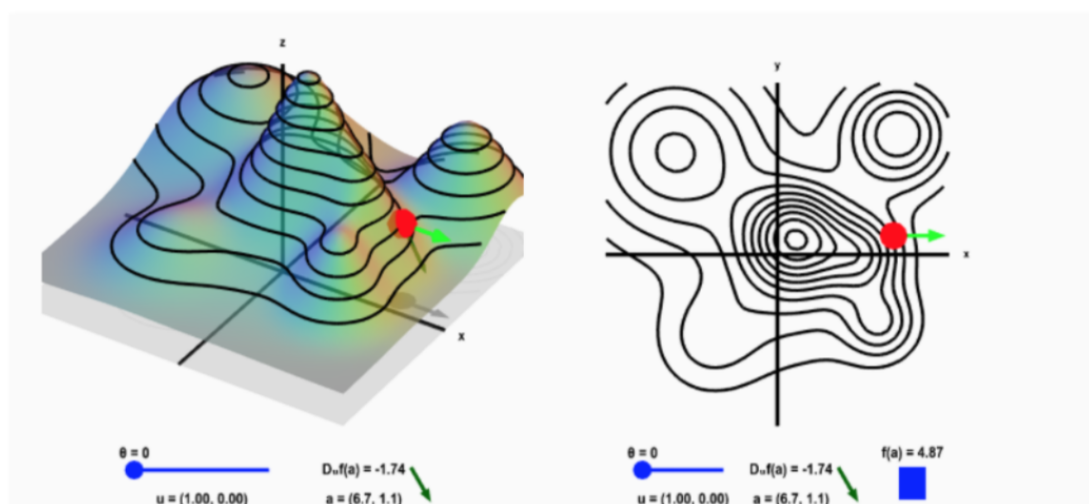
$$D_{\mathbf{u}}f(\mathbf{a}) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(\mathbf{a} + h\mathbf{u}) - f(\mathbf{a})}{h}.$$

However, it turns out that for **differentiable** $f(x, y)$, we won't need to worry about that definition.

The concept of the directional derivative is simple; $D_{\mathbf{u}}f(\mathbf{a})$ is the slope of $f(x, y)$ when standing at the point $\mathbf{a}$ and facing the direction given by $\mathbf{u}$. If x and y were given in meters, then $D_{\mathbf{u}}f(\mathbf{a})$ would be the change in height per meter as you moved in the direction given by $\mathbf{u}$ when you are at the point $\mathbf{a}$.

Note that $D_{\mathbf{u}}f(\mathbf{a})$ is a number, not a matrix. In fact, the directional derivative is the same as a partial derivative if $\mathbf{u}$ points in the positive x or positive y direction. For example, if $\mathbf{u} = (1, 0)$, then $D_{\mathbf{u}}f(\mathbf{a}) = \frac{\partial f}{\partial x}(\mathbf{a})$. Similarly if $\mathbf{u} = (0, 1)$, then $D_{\mathbf{u}}f(\mathbf{a}) = \frac{\partial f}{\partial y}(\mathbf{a})$.

In the following applet, the height $f(x, y)$ of a mountain range is shown both as a surface plot (left) as a **level curve plot** (right). The interpretation of the two-dimensional point $\mathbf{a}$ and two-dimensional direction vector $\mathbf{u}$ defining the directional derivative $D_{\mathbf{u}}f(\mathbf{a})$ may be clearer in the two-dimensional level curve plot, so we focus on that panel first. You can recognize steep mountain peaks in the level curve plot by the closely spaced circular level curves. In this applet, you can move the point $\mathbf{a}$ around, change the direction $\mathbf{u}$ and observe how the directional derivative $D_{\mathbf{u}}f(\mathbf{a})$ changes. If you set $\mathbf{u}$ to point straight east ($\theta = 0$ in the applet), then $\mathbf{u}$ points in the positive x direction ($\mathbf{u} = (1, 0)$) so that $D_{\mathbf{u}}f(\mathbf{a}) = \frac{\partial f}{\partial x}(\mathbf{a})$. Similarly, when $\mathbf{u}$ points straight north ($\theta = \pi/2$), then $\mathbf{u}$ points in the positive y direction ($\mathbf{u} = (0, 1)$) so that $D_{\mathbf{u}}f(\mathbf{a}) = \frac{\partial f}{\partial y}(\mathbf{a})$.



Uitleg bij de figuur op de vorige bladzijde:

Directional derivative on a mountain. The height of a mountain range described by a function $f(x, y)$ is shown as surface plot in three-dimensions (left) and a two-dimensional level curve plot (right). In each panel, a red point can be moved by the mouse to change where the directional derivative is evaluated. The directional derivative is computed in the direction of the two-dimensional vector $\mathbf{u}$. This direction is illustrated by the light green vectors as well shown in the lower left. The direction of $\mathbf{u}$ is determined by the angle θ it makes with straight east (positive x direction). The angle θ , and hence $\mathbf{u}$, can be changed using the slider. The two-dimensional point $\mathbf{a}$ where the directional derivative is computed is illustrated by the shadow of the red point on the xy -plane below the surface plot and by the red point itself on the level curve plot. The value of the directional derivative $D_{\mathbf{u}}f(\mathbf{a})$ is shown at the bottom of the panel, along with the value of $\mathbf{a}$ itself. The value of $D_{\mathbf{u}}f(\mathbf{a})$ is the slope of the dark green vector to its right. This dark green vector is also shown emanating from the red point on the surface plot, where it is tangent to the surface, indicating that this slope is indeed the slope of the surface in the direction given by $\mathbf{u}$. The height of the surface $f(\mathbf{a})$ is illustrated by the bar in the lower right.

Uitgewerkte voorbeelden

Example 1

Let $f(x, y) = x^2y$. (a) Find $\nabla f(3, 2)$. (b) Find the derivative of f in the direction of $(1, 2)$ at the point $(3, 2)$.

Solution: (a) The gradient is just the vector of **partial derivatives**. The partial derivatives of f at the point $(x, y) = (3, 2)$ are:

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial x}(x, y) &= 2xy & \frac{\partial f}{\partial y}(x, y) &= x^2 \\ \frac{\partial f}{\partial x}(3, 2) &= 12 & \frac{\partial f}{\partial y}(3, 2) &= 9\end{aligned}$$

Therefore, the gradient is

$$\nabla f(3, 2) = 12\mathbf{i} + 9\mathbf{j} = (12, 9).$$

(b) Let $\mathbf{u} = u_1\mathbf{i} + u_2\mathbf{j}$ be a **unit vector**. The directional derivative at $(3, 2)$ in the direction of $\mathbf{u}$ is

$$\begin{aligned}D_{\mathbf{u}}f(3, 2) &= \nabla f(3, 2) \cdot \mathbf{u} \\ &= (12\mathbf{i} + 9\mathbf{j}) \cdot (u_1\mathbf{i} + u_2\mathbf{j}) \\ &= 12u_1 + 9u_2.\end{aligned}\tag{1}$$

To find the directional derivative in the direction of the vector $(1, 2)$, we need to find a unit vector in the direction of the vector $(1, 2)$. We simply divide by the magnitude of $(1, 2)$.

$$\mathbf{u} = \frac{(1, 2)}{\|(1, 2)\|} = \frac{(1, 2)}{\sqrt{1^2 + 2^2}} = \frac{(1, 2)}{\sqrt{5}} = (1/\sqrt{5}, 2/\sqrt{5}).$$

Plugging this expression for $\mathbf{u} = (u_1, u_2)$ into equation (1) for the directional derivative, and we find that the directional derivative at the point $(3, 2)$ in the direction of $(1, 2)$ is

$$\begin{aligned}D_{\mathbf{u}}f(3, 2) &= 12u_1 + 9u_2 \\ &= \frac{12}{\sqrt{5}} + \frac{18}{\sqrt{5}} = \frac{30}{\sqrt{5}}.\end{aligned}$$

Example 2

For the f of Example 1, find the directional derivative of f at the point $(3, 2)$ in the direction of $(2, 1)$.

Solution: The unit vector in the direction of $(2, 1)$ is

$$\mathbf{u} = \frac{(2, 1)}{\sqrt{5}} = (2/\sqrt{5}, 1/\sqrt{5}).$$

Since we are still at the point $(3, 2)$, equation (1) is still valid. We plug in our new $\mathbf{u}$ to obtain

$$\begin{aligned}D_{\mathbf{u}}f(3, 2) &= 12u_1 + 9u_2 \\ &= \frac{24}{\sqrt{5}} + \frac{9}{\sqrt{5}} = \frac{33}{\sqrt{5}}\end{aligned}$$

R-opgaven (divergentie en richtingsafgeleide)

Opgave R1: het visualiseren van de *divergentie*

- Schets de onderstaande vectorvelden $\mathbf{v}$ in het vlak (dit zijn snelheidsvelden van een stroming in een vierkant gecentreerd in de oorsprong).
- Herinner je dat de divergentie de uitstroom minus de instroom aangeeft.
- Kan je door te kijken naar de stroom bij de zijken van het vierkant, zien of $\nabla \cdot \mathbf{v}$ positief, negatief, danwel nul moet zijn?
- Bereken de divergentie van elk vectorveld.

Het gaat om de volgende snelheidsvelden:

- a) $\mathbf{v} = \mathbf{i}$
- b) $\mathbf{v} = x\mathbf{i}$
- c) $\mathbf{v} = x\mathbf{i} - y\mathbf{j}$
- d) $\mathbf{v} = x\mathbf{i} + y\mathbf{j}$
- e) $\mathbf{v} = -x\mathbf{i} - y\mathbf{j}$
- f) $\mathbf{v} = (x^2 + y^2)^{-1}(-y\mathbf{i} + x\mathbf{j})$.

Opgave R2

Gegeven is de functie $f(x, y) = \sin(x) - \cos(y)$ en de vector $\vec{a} = [4, 3]^T$.

a) Bepaal de richtingsafgeleide ('directional derivative') van de functie f in het punt $(\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{4})$ in de richting van de vector $\vec{a}$.

b) In welke richting is in het punt $(\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{4})$ de richtingsafgeleide van f het grootst? En wat is de richtingsafgeleide in die richting?

c) Bepaal de richtingsafgeleide van f in de richting van de vector $\vec{a}$ in een algemeen punt (a, b) . Wat is de maximaal haalbare richtingsafgeleide in de richting van de vector $\vec{a}$, en voor welke punten (a, b) wordt deze behaald?

Opgave R3

Bepaal de richtingsafgeleide van $g(x, y, z) = e^{xy+z}$ in $(1, 1, -2)$ in de richting $[1, -2, 2]^T$.

Opgave R4

Bepaal de richtingsafgeleide van $g(x, y, z) = 2x^2 + 3y^2 + z^2$ in het punt $(2, 1, 3)$ in de richting van de vector $\vec{a} = \vec{i} - 2\vec{k}$.

N-opgaven over Newton-Raphson (één dimensie)

Theorie: zie Steiner hoofdstuk 20.3.

Opgave N1

Beschouw achtereenvolgens de functies

- $f(x) = \exp(x) + 1$
- $f(x) = \exp(-x) - x$
- $f(x) = x^2 - 4 \sin(x)$
- $f(x) = x^3 + 6x^2 + 11x - 6$
- $f(x) = \sin(x)$.

Maak een schets van deze functies en geef aan waar de nulpunten, maxima en minima zich bevinden.

Opgave N2

Pas Newton-Raphson (NR) toe op $f(x) = x^3 + 3x - 4 = 0$. Neem $x_0 = 2$; teken ook de grafiek van $y = f(x)$. Na hoeveel iteraties is de fout kleiner dan 10^{-7} (in absolute waarde)?

Opgave N3

We onderzoeken nu de functie $f(x) = x^2 - 2x + c$ voor $c = 1$ en $c = 0$. Vind de nulpunten α van de grafiek van f m.b.v. de grafiek. Pas NR toe voor beide waarden van c en vergelijk het foutgedrag. Zie je een groot verschil? Hoe groot zijn bijvoorbeeld $\frac{x_{i+1}-\alpha}{x_i-\alpha}$ en $\frac{x_{i+1}-\alpha}{(x_i-\alpha)^2}$ rondom het moment dat je in de buurt van het nulpunt komt? En wat betekent dit voor de mate van convergentie?

Opgave N4

We gaan nu proberen het verschil te verklaren tussen de twee experimenten uit Opgave N3. We zoeken nulpunten α van een functie f , d.w.z. er geldt $f(\alpha) = 0$. Stel nu ook dat $f'(\alpha) = 0$ (voor welk van de twee gevallen uit N3 geldt dit?). We weten dat voor algemene functies (niet per se NR) geldt: $x_{i+1} - \alpha \approx (x_i - \alpha)g'(\alpha)$. Laat zien dat voor NR in deze opgave geldt: $\lim_{x \rightarrow \alpha} g'(\alpha) = \frac{1}{2}$; en dus niet $g'(\alpha) = 0$ zoals we voor NR hadden gezien in het geval dat $f'(\alpha) \neq 0$. Klopt dit resultaat met het tweede experiment uit N3 (met $c = 0$)?

Opgave N5

Teken de grafiek van $f(x) = \cos(x)$ op het interval $x \in [-2\pi, 2\pi]$. Hoeveel nulpunten heeft f op dit interval?

Besprek met het 'raaklijnen-verhaal' (waarmee NR beschreven kan worden) het gedrag van NR bij verschillende startwaarden x_0 . Wanneer convergeert NR naar welk nulpunt? Bij welke startwaarden gaat het 'helemaal mis' (divergentie)?

Opgave N6

Bekijk de functie $f(x) = (x - 1)^4 - 1$. Teken de grafiek van f . Schrijf de NR-iteratieformule op voor $f'(x) = 0$. Bepaal, door enkele iteratiestappen uit te voeren, een benadering voor de lokatie van het minimum van f . Hoe groot is de fout in iedere iteratieslag?

Opgave N7

Bij een bepaalde chemische reactie wordt de concentratie van een zeker ion op tijdstip t gegeven door de formule $f(t) = 10e^{-3t} + 2e^{-5t}$. We willen weten wanneer deze concentratie de helft is van de beginconcentratie. Maak gebruik van NR om dit probleem (benaderd) op te lossen.

Newton-Raphson in meer dimensies

Een paar basisbegrippen

In 1D kennen we de Taylorontwikkeling van de functie f rond het punt a :

$$f(x) = f(a) + (x - a)f'(a) + \frac{(x - a)^2}{2!}f''(a) + \dots$$

Vergelijk dit met de *2D-Taylorontwikkeling* van de functie $f(x, y)$ rond het punt (a, b) :

$$\begin{aligned} f(x, y) = & f(a, b) + (x - a)\frac{\partial f}{\partial x}(a, b) + (y - b)\frac{\partial f}{\partial y}(a, b) + \\ & \frac{1}{2!}\{(x - a)^2\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(a, b) + (y - b)^2\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(a, b) + 2(x - a)(y - b)\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}\} + \\ & \frac{1}{3!}\{\dots\} + \dots \end{aligned}$$

Verder herinneren we ons de *gradient* van een functie $f(x, y)$:

$$\text{grad } f = \nabla f = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x} \\ \frac{\partial f}{\partial y} \end{pmatrix}.$$

De Jacobiaan van een *vector*functie $(f_1(x, y), f_2(x, y))$ wordt gegeven door de 2×2 -matrix:

$$\mathcal{J} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} \end{pmatrix}.$$

De *Hessiaan* van een functie $f(x, y)$ is gedefinieerd als de 2×2 -matrix:

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} & \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \end{pmatrix}.$$

De matrix $\mathcal{H}$ is symmetrisch, want

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}.$$

Een verband tussen $\mathcal{H}$, $\mathcal{J}$ en ∇f wordt uitgewerkt in opgave N8 en luidt:

$$\mathcal{H} = \mathcal{J}(\text{grad } f).$$

Maxima en minima van een functie

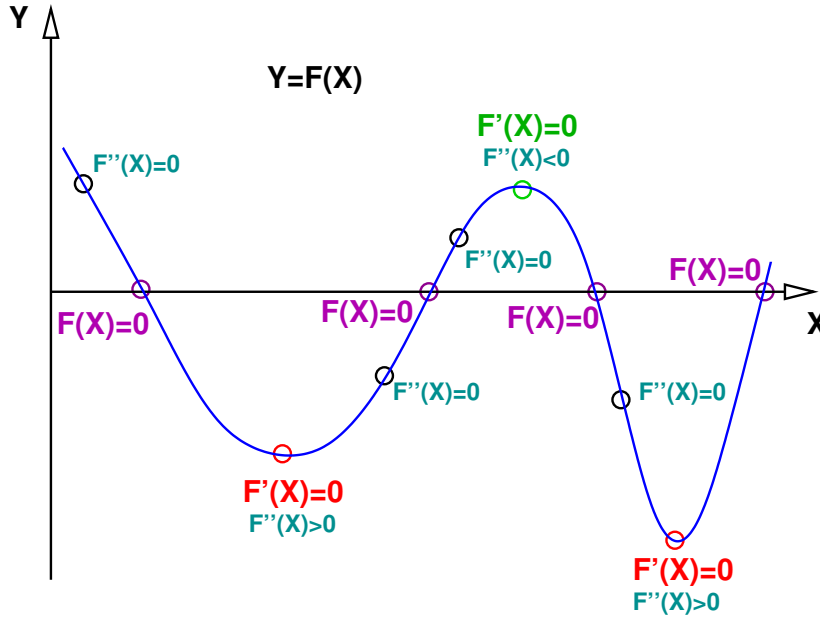
We weten dat voor een minimum van een functie $y = f(x)$ in 1D moet gelden:

$$f' = 0 \quad \text{en} \quad f'' > 0,$$

terwijl voor een maximum geldt

$$f' = 0 \quad \text{en} \quad f'' < 0.$$

Voor $f' = 0$ en $f'' = 0$ hebben we een buigpunt, maar dus geen maximum of minimum van de functie f . (zie ook figuur 1).



Figuur 1: Minima, maxima en buigpunten van een functie $f(x)$.

De functie $z = f(x, y)$ stelt een 2D-opervlak in 3D voor (denk aan een ‘vervormd velletje papier’).

Voor constante waarden van z kunnen we ook een contourplot maken (zie figuur 2) voor een verband tussen een 3D-plot en een contourplot van hetzelfde oppervlak.

De punten (x, y) waarvoor $\nabla f = \vec{0}$ heten ‘stationaire punten’ van f en die punten komen in aanmerking voor een minimum of maximum. Voor een minimum in 2D moet gelden:

$$\nabla f = \vec{0} \text{ en } \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} - \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \right)^2 = \det(\mathcal{H}) > 0 \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = \Delta f > 0 \end{array} \right.$$

terwijl voor een maximum geldt:

$$\nabla f = \vec{0} \text{ en } \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} - \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \right)^2 = \det(\mathcal{H}) > 0 \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = \Delta f < 0 \end{array} \right.$$

Als

$$\nabla f = \vec{0} \text{ en } \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} - \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \right)^2 = \det(\mathcal{H}) < 0$$

hebben we te maken met een zogenaamd zadelpunt. Voor alle overige situaties is het niet direkt duidelijk hoe de functie zich gedraagt rondom het ‘stationaire punt’. Een nadere analyse is dan nodig om het gedrag van f te begrijpen rond dit soort speciale punten.

Een voorbeeld: neem $z = f(x, y) = x^3 - 3xy^2 + y^4$. Dan is

$$\nabla f = \vec{0} \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} x^2 = y^2 \\ y(-6x + 4y^2) = 0 \end{array} \right. \Leftrightarrow (x, y) = (0, 0), (3/2, 3/2), \text{ of } (3/2, -3/2).$$



Figuur 2: Een berglandschap (zijaanzicht) en de bijbehorende 2D-contourlijnen.

het stationaire punt	$\det(\mathcal{H})$	Δf	minimum/maximum/zadelpunt?
$(0, 0)$	0	0	?? (onduidelijk)
$(\frac{3}{2}, \frac{3}{2})$	> 0	> 0	minimum
$(\frac{3}{2}, -\frac{3}{2})$	> 0	> 0	minimum

Tabel 1: stationaire punten voor $z = f(x, y) = x^3 - 3xy^2 + y^4$.

Er geldt: $\det(\mathcal{H}) = 36(-x^2 + 2xy^2 - y^2)$ en $\Delta f = 12y^2$. In Tabel 1 zien we dit verder uitgewerkt.

Hoe kan je maxima en minima numeriek benaderen?

Zet een 'streep' achter de eerste-orde term in de 1D Taylorontwikkeling van f rond a :

$$f(x) \approx f(a) + (x - a)f'(a).$$

Neem nu als benadering voor het nulpunt x van f het nulpunt van deze lineaire benadering:

$$f(a) + (x - a)f'(a) = 0 \quad \Rightarrow \quad x = a - \frac{f(a)}{f'(a)}.$$

Als dit proces verder wordt doorgevoerd, krijgen we de iteratieformule

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}.$$

In 2D kan dit ook op deze manier uitgewerkt worden. Beschouw de twee vergelijkingen

$$\begin{aligned}f_1(x, y) &= 0, \\f_2(x, y) &= 0,\end{aligned}$$

en benader zowel f_1 als f_2 m.b.v. een eerste-orde Taylorpolynoom, en bepaal de ‘nulpunten’ van deze twee lineaire functies:

$$\begin{aligned}f_1(x, y) &= f_1(a, b) + \frac{\partial f_1}{\partial x}(a, b)(x - a) + \frac{\partial f_1}{\partial y}(a, b)(y - b) = 0, \\f_2(x, y) &= f_2(a, b) + \frac{\partial f_2}{\partial x}(a, b)(x - a) + \frac{\partial f_2}{\partial y}(a, b)(y - b) = 0.\end{aligned}$$

Oplossen naar x en y geeft:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x}(a, b) & \frac{\partial f_1}{\partial y}(a, b) \\ \frac{\partial f_2}{\partial x}(a, b) & \frac{\partial f_2}{\partial y}(a, b) \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} f_1(a, b) \\ f_2(a, b) \end{pmatrix}.$$

Dit leidt tot de Newtoniteratie

$$\begin{pmatrix} x_{i+1} \\ y_{i+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x}(x_i, y_i) & \frac{\partial f_1}{\partial y}(x_i, y_i) \\ \frac{\partial f_2}{\partial x}(x_i, y_i) & \frac{\partial f_2}{\partial y}(x_i, y_i) \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} f_1(x_i, y_i) \\ f_2(x_i, y_i) \end{pmatrix}$$

met een startvector (x_0, y_0) . Dit is te schrijven als

$$\begin{pmatrix} x_{i+1} \\ y_{i+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \end{pmatrix} - \mathcal{J}^{-1}(x_i, y_i) \begin{pmatrix} f_1(x_i, y_i) \\ f_2(x_i, y_i) \end{pmatrix},$$

met $\mathcal{J}^{-1}$ de inverse matrix van de Jacobiaan van de vectorfunctie (f_1, f_2) . Hoe je ook alweer de inverse van een 2×2 -matrix berekent, kan je lezen op blz. 407 van Steiner.

Voor het vinden van maxima en minima in 1D kan het iteratieve proces

$$\begin{cases} x_{i+1} = x_i - \frac{f'(x_i)}{f''(x_i)} \\ \text{met startwaarde } x_0 \end{cases}$$

gebruikt worden. De 2D-versie hiervan luidt:

$$\begin{pmatrix} x_{i+1} \\ y_{i+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \end{pmatrix} - \mathcal{H}^{-1}(x_i, y_i) \nabla f(x_i, y_i),$$

met startvector (x_0, y_0) en $\mathcal{H}^{-1}$ de inverse matrix van de Hessiaan. Deze Newtoniteratie volgt uit die voor het stelsel $f_1(x, y) = f_2(x, y) = 0$ door f_1 te lezen als $\frac{\partial f}{\partial x}$ en f_2 als $\frac{\partial f}{\partial y}$.

De gradientenmethode

De gradientenmethode of ‘method of steepest descent’ maakt gebruik van het feit dat minus de gradient wijst in de richting van de grootste afname van de functie f . In iedere stap van de iteratie wordt deze richting gevolgd, hetgeen uiteindelijk convergeert naar een minimum van de functie f . Deze methode maakt gebruik van de eigenschappen van de gradient en de richtingsafgeleide (zie ook hfst.1 van deze syllabus).

N-opgaven (twee en drie dimensies)

Opgave N8

Controleer dat $\mathcal{H} = \mathcal{J}(\nabla f)$ voor een algemene functie $f(x, y)$.

Opgave N9

Beschouw het niet-lineaire stelsel

$$\begin{aligned}f_1(x, y) &= x^3 + y^2 - 2 = 0, \\f_2(x, y) &= x^2 - y^3 - 1 = 0.\end{aligned}$$

Maak een schets van de krommen $y = \sqrt{2 - x^3}$, $y = -\sqrt{2 - x^3}$ en $y = \sqrt[3]{x^2 - 1}$.
Bepaal de Jacobiaan

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} \end{pmatrix}$$

en de inverse matrix van de Jacobiaan: $\mathcal{J}^{-1}$.

Neem als startwaarde $(x_0, y_0) = (1, 1)$ en pas de 2D-versie van Newton-Raphson (NR) toe om een oplossing (α, β) te vinden voor het stelsel (doe maximaal 5 iteratieslagen).

Opgave N10

Werk de formules van Newton-Raphson uit voor het volgende stelsel (o.a. bereken de Jacobi-matrix=Jacobiaan):

$$\begin{aligned}f(x, y, z) &= x^3 - y^2 + y - z^4 + z^2 \\g(x, y, z) &= xy + yz + xz \\h(x, y, z) &= \frac{y}{xz}\end{aligned}$$

NB. het is niet de bedoeling dat je de iteraties voor dit stelsel daadwerkelijk gaat uitvoeren...

Opgave N11

Het energie-oppervlak E is gegeven door:

$$E = f(x, y) = x^2 + 3y^2.$$

Teken enkele contourlijnen voor dit oppervlak. Bereken ∇f en de Hessiaan $\mathcal{H}$ van f . Bepaal het ‘stationaire punt’ van het energie-oppervlak; d.w.z. het punt (x, y) waarvoor $\nabla f = \vec{0}$. Ga na dat E in dit punt een minimum aanneemt. Schrijf de iteratieformule op voor Newton-Raphson voor het bijbehorende minimalisatieprobleem. Pas NR toe om de positie van het minimum numeriek te benaderen. Aangezien we de exacte lokatie kennen, kunnen we zien hoe goed en snel de methode convergeert.