Newton multivariable (Newton-Raphson) amb Excel

Imaginem una funció de dues variables $E(x,y)$ que presenta un valor crític (màxim, mínim, coll o *saddle-point*). L'expansió en sèrie Taylor fins a segon ordre al voltant del punt crític a partir d'un punt proper (x_0,y_0) resulta:

$$E(x,y) = E(x_0,y_0) + \sum_{\alpha=x}^{y} \left(\frac{\partial E}{\partial \alpha}\right)_0 (\alpha - \alpha_0) + \frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta=x}^{y} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial \alpha \partial \beta}\right)_0 (\alpha-\alpha_0)(\beta-\beta_0)$$

La derivada respecte una de les variables resulta:

$$\left(\frac{\partial E}{\partial \alpha}\right) = \left(\frac{\partial E}{\partial \alpha}\right)_0 + \sum_{\beta=x}^{y} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial \alpha \partial \beta}\right)_0 (\beta-\beta_0)$$

Agrupant en columna les derivades respecte les dues variables trobem:

$$\nabla E = \nabla E_0 + G_0 \cdot \Delta r$$

on ∇E és el gradient o matriu columna de les derivades en el punt (x,y) i ∇E_0 el gradient en el punt proper (x_0,y_0), G_0 la matriu de les segons derivades o matriu Jacobiana calculada en (x_0,y_0) i Δr la variació de les variables $(x-x_0, y-y_0)$ en forma de columna.

Si (x,y) és un punt crític el gradient ∇E de la funció $E(x,y)$ en aquest punt és el vector zero, per tant, podem aïllar Δr: $\Delta r = -G_0^{-1} \cdot \nabla E_0$. Aquesta és l'etapa del procés iteratiu de Newton-Raphson per determinar el punt crític d'una funció.

Si ho volem implementar fent ús d'Excel construirem la taula:

r_0	G_0		∇E_0	Δr
x_0	$\left(\frac{\partial^2 E}{\partial \alpha^2}\right)_0$	$\left(\frac{\partial^2 E}{\partial \alpha \partial \beta}\right)_0$	$\left(\frac{\partial E}{\partial \alpha}\right)_0$	$x - x_0$
y_0	$\left(\frac{\partial^2 E}{\partial \beta \partial \alpha}\right)_0$	$\left(\frac{\partial^2 E}{\partial \beta^2}\right)_0$	$\left(\frac{\partial E}{\partial \beta}\right)_0$	$y - y_0$

de la que trobem el mínim en sumar $r_0 + \Delta r$. Si la funció no és quadràtica, caldrà repetir el procés fins convergència.

A manera d'exemple considerem la funció $E(x,y) = 3\,y\,(1/3 - x) + x^3 + y^3$ que presenta un mínim al voltant de $x = 0.846, y = 0.716$ i un coll al voltant de $x = 0.348, y = 0.121$. El gradient i Jacobià de la funció són respectivament,

$$\nabla E = \begin{pmatrix} 3x^2 - 3\,y \\ 3\left(\frac{1}{3} - x\right) + 3y^2 \end{pmatrix}; G = \begin{pmatrix} 6x & -3 \\ -3 & 6y \end{pmatrix}$$

Cerquem el mínim a partir de $x = y = 1$ i el coll a partir de $x = y = 0$. En el full Excel escrivim:

D	E	F	G	H
1	=6*D2	=-3	=3*D2^2-3*D3	=-MMULT(MINVERSA(E2:F3);G2:G3)
1	=-3	=6*D3	=3*(1/3-D2)+3*D3^2	=-MMULT(MINVERSA(E2:F3);G2:G3)

Notem que en les cel·les F2 i E3 escrivim "=-3" i no simplement "3", per evitar que, en arrastrar, el -3 canvie de valor. En les dues files següents sumem $r_0 + \Delta r$ i arrastrem la resta de columnes:

=D2+H2	=6*D4	=-3	=3*D4^2-3*D5	=-MMULT(MINVERSA(E4:F5);G4:G5)
=D3+H3	=-3	=6*D5	=3*(1/3-D4)+3*D5^2	=-MMULT(MINVERSA(E4:F5);G4:G5)

El procés complet en Excel és:

1	6	-3	0	-0,111111111
1	-3	6	1	-0,222222222
0,8888889	5,33333333	-3	0,037037	-0,038850039
0,7777778	-3	4,66666667	0,1481481	-0,056721057
0,8500389	5,1002331	-3	0,004528	-0,00371556
0,7210567	-3	4,32634033	0,0096518	-0,004807415
0,8463233	5,07793974	-3	4,142E-05	-3,01025E-05
0,7162493	-3	4,29749583	6,933E-05	-3,71475E-05
0,8462932	5,07775912	-3	2,718E-09	-1,87991E-09
0,7162122	-3	4,29727295	4,14E-09	-2,27576E-09
0,8462932	5,07775911	-3	0	0
0,7162122	-3	4,29727294	0	0
0,8462932	5,07775911	-3	0	0
0,7162122	-3	4,29727294	0	0
	Det	12,8205168	Min	

En la darrera línia calculem el determinant de l'últim Jacobià calculat, MDETERM(E14:F15), i en eixir positiu sabem que se tracta d'un mínim (o un màxim) absolut. Recordem que sempre que fem càlcul matricial, en lloc de fer "intro" cal mantenir pressionat "control + majúscula" i fer "intro".

De manera semblant determinem el coll partint de $x = y = 0$:

0	0	-3	0	0,333333333
0	-3	0	1	0
0,3333333	2	-3	0,3333333	0
0	-3	0	0	0,111111111
0,3333333	2	-3	0	0,014492754
0,1111111	-3	0,66666667	0,037037	0,009661836
0,3478261	2,08695652	-3	0,0006301	0,000173186
0,1207729	-3	0,72463768	0,0002801	0,000330517
0,3479993	2,08799564	-3	8,998E-08	1,40129E-07
0,1211035	-3	0,72662078	3,277E-07	1,27523E-07
0,3479994	2,08799648	-3	5,879E-14	2,53016E-14
0,1211036	-3	0,72662155	4,887E-14	3,72053E-14
0,3479994	2,08799648	-3	0	0
0,1211036	-3	0,72662155	0	0
	Det	-7,4828168	Saddle Point	

En aquest cas el determinant és negatiu, cosa que vol dir que una derivada és positiva i l'altra negativa, com correspon a un coll.

Aquest procediment també pot ser per a trobar zeros de sistemes no lineals. Considerem l'exemple:

$$f(x,y) = x^2 - y - 1 = 0$$
$$g(x,y) = y^2 - x = 0$$

que té solució al voltant de $x = 0.525, y = -0.725$. Si escrivim columna les funcions en forma de matriu i les desenvolupem em sèrie Taylor fins a terme lineal tenim:

$$\begin{pmatrix} f(x,y) \\ g(x,y) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(x_0,y_0) + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_0 \Delta x + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_0 \Delta y \\ \\ g(x_0,y_0) + \left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)_0 \Delta x + \left(\frac{\partial g}{\partial y}\right)_0 \Delta y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(x_0,y_0) \\ g(x_0,y_0) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_0 & \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_0 \\ \left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)_0 & \left(\frac{\partial g}{\partial y}\right)_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{pmatrix}$$

Anomenem G_0 a la matriu 2x2, Δr a la matriu 2x1 d'increments i F_0 i F a les matrius 2x1 de funcions aleshores, si considerem que x, y són els valors per al quals les dues funcions són zero, podem trobar el pas Δr: $\Delta r = -G_0^{-1} \cdot F_0$.

En el procés iteratiu, partim d'un vector proper a la solució, escrivim les derivades en aquest punt en forma de matriu 2x2, les funcions en columna i iterem amb el pas Δr.

$$G = \begin{pmatrix} f'_x & f'_y \\ g'_x & g'_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2x & -1 \\ -1 & 2y \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x^2 - y - 1 \\ y^2 - x \end{pmatrix};$$

r	G		F	Δr
0	0	-1	-1	0
0	-1	0	0	-1
0	0	-1	0	1
-1	-1	-2	1	0
1	2	-1	1	-0,4
-1	-1	-2	0	0,2
0,6	1,2	-1	0,16	-0,073972603
-0,8	-1	-1,6	0,04	0,071232877
0,5260274	1,05205479	-1	0,0054719	-0,001145267
-0,728767	-1	-1,4575342	0,0050741	0,004267062
0,5248821	1,04976426	-1	1,312E-06	6,46829E-06
-0,7245	-1	-1,4490001	1,821E-05	8,10182E-06
0,5248886	1,0497772	-1	4,184E-11	1,98948E-12
-0,724492	-1	-1,4489839	6,564E-11	4,39273E-11
0,5248886	1,0497772	-1	0	0
-0,724492	-1	-1,4489839	0	0

Recordem que com fem càlcul matricial, fer "intro" se canvia per mantenir pressionat "control + majúscula" i, aleshores, fer "intro".