

LABORATORIO NO. 1 DERIVACIÓN NUMÉRICA

A lo largo de este curso elaboraremos una librería de los algoritmos de optimización más relevantes para ciencia de datos. El objetivo de esta asignación es que usted lleve a la práctica la teoría desarrollada en clase al implementar cada uno de los algoritmos estudiados, así como evaluar y analizar el desempeño de los mismos dentro del ámbito de la ciencia de datos.

Todos los laboratorios de este curso se desarrollarán en R y Python. Por un lado, se trabajará el front-end de la aplicación utilizando la librería shiny de R, la cual permite desarrollar aplicaciones web de forma rápida y orientadas al usuario. Por otro lado, el back-end se implementará en Python y cualquier otra dependencia que considere necesaria para facilitar la implementación (e.g. numpy, scipy, pandas, etc). Para la comunicación entre las dos entidades se utilizará la librería reticulate de R, la cual permite intercambiar información entre ambos lenguajes por medio de argumentos en funciones.

A continuación le damos una serie de recomendaciones importantes:

- Todos los laboratorios del curso se trabajarán en grupos de 2 personas como máximo. Una vez establecido su grupo de trabajo, *no* se realizarán cambios. Por favor enviar (via email) a su asistente de cátedra el nombre y número de carnet de los integrantes de su equipo.
- Para medir el funcionamiento de sus algoritmos se utilizarán una serie de problemas similares a los que se plantean en las hojas de trabajo, de este modo usted se asegura que su programa reciba una entrada con un formato conocido.

En este primer laboratorio, el objetivo central es que usted se familiarice con las distintas herramientas a utilizar a lo largo del curso. Para ello, se iniciará con la implementación de algunos métodos numéricos para diferenciación numérica, estos son: diferencias finitas centradas y progresivas. A continuación se presentan los algoritmos de los tres métodos a implementar, cuyo objetivo es aproximar el valor de la derivada de una función de una variable real f en un número real x_0 dado. 1

Algoritmo – Diferencias Finitas Centradas (2 puntos)

- 1. *Input*: la función $f: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, los números reales x_0 y h.
- 2. Calcular el valor de $f(x_0 + h)$.
- 3. Calcular el valor de $f(x_0 h)$.
- 4. Calcular $f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) f(x_0 h)}{2h}$.
- 5. Output: $f'(x_0)$.

¹En toda la discusión, asumimos que f es diferenciable en x_0 y que x_0 pertenece al dominio de f.

Algoritmo – Diferencias Finitas Progresiva (3 puntos)

- 1. *Input:* la función $f: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, los números reales $x_0 \neq h$.
- 2. Calcular el valor de $f(x_0)$.
- 3. Calcular el valor de $f(x_0 + h)$.
- 4. Calcular el valor de $f(x_0 + 2h)$.
- 5. Calcular $f'(x_0) \approx \frac{-3f(x_0) + 4f(x_0 + h) f(x_0 + 2h)}{2h}$.
- 6. Output: $f'(x_0)$.

Algoritmo – Diferencias Finitas Centradas (4 puntos)

- 1. *Input*: la función $f: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, los números reales $x_0 \neq h$.
- 2. Calcular el valor de $f(x_0 + h)$ y $f(x_0 h)$.
- 3. Calcular el valor de $f(x_0 + 2h)$ y $f(x_0 2h)$.
- 4. Calcular $f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 2h) 8f(x_0 h) + 8f(x_0 + h) f(x_0 + 2h)}{12h}$.
- 5. Output: $f'(x_0)$.

Problema 1

Implemente cada uno de los métodos anteriores y conteste a las preguntas: ¿cuál de los algoritmos anteriores funciona "mejor"? ¿por qué? ¿qué sucede cuando varía el valor de h? Para responder a estas preguntas, construya una tabla con el valor "exacto" de la derivada, su aproximación y el error.

Problema 2

Extienda cada uno de los métodos anteriores para calcular numéricamente el gradiente de una función $f: \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ en un punto $P(x_0, y_0)$ dado. Es decir, su rutina recibirá una función f de dos variables, un punto P y el valor de h, y devolverá una aproximación del vector gradiente en dicho punto. Luego de esto conteste las preguntas: ¿cuál de los algoritmos anteriores funciona "mejor"? ¿por qué? ¿qué sucede cuando varía el valor de h? Para responder a estas preguntas y comparar los resultados de los distintos enfoques propuestos, deberá construir una tabla con el valor del gradiente "verdadero", su aproximación y la norma del error.