Laboratorio
Análisis Aplicado
Aproximación Numérica
al Gradiente y la Matriz Hessiana

1 Aproximación a la derivada

Sea $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ tal que $g \in \mathcal{C}^3(\mathbb{R})$. Para un punto fijo fijo $a \in \mathbb{R}$ y $h > 0, \quad h \approx 0$ se tienen las siguientes aproximaciones a la primera y segunda derivada

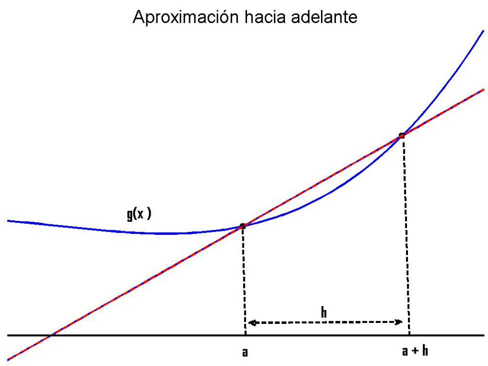
1. **Diferencia hacia adelante.**

   Usando el polinomio de Taylor de grado 1 se tiene que

   $$g(a+h) = g(a) + hg'(a) + \frac{h^2}{2}g''(a+th)$$

   para alguna $t \in (0,\ 1)$. Por lo tanto se obtiene la ecuación:

   $$\boxed{g'(a) = \frac{g(a+h) - g(a)}{h} + \mathcal{O}(h).} \tag{1}$$



2. **Diferencias centradas.**
   Usando Taylor de grado 2 en los puntos simétricos $a-h$ y $a+h$ se obtiene
$$g(a-h) = g(a) - hg'(a) + \frac{h^2}{2}g''(a) - \frac{h^3}{3!}g'''(a - t_1 h), \tag{2}$$
   para algún $t_1 \in (0,\ 1)$,
$$g(a+h) = g(a) + hg'(a) + \frac{h^2}{2}g''(a) + \frac{h^3}{3!}g'''(a + t_2 h), \tag{3}$$
   para algún $t_2 \in (0,\ 1)$.
   La combinación $g(a+h) - g(a-h)$ nos da la relación:
$$\boxed{g'(a) = \frac{g(a+h) - g(a-h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2).} \tag{4}$$

2 Aproximación al gradiente

Sea $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ tal que $f \in \mathcal{C}^2(\mathbb{R}^n$. Para un vector fijo $a \in \mathbb{R}^n$, el vector gradiente $\nabla f(a) \in \mathbb{R}^n$ se define componente a componente como:
$$(\nabla f(a))_i = \frac{\partial f(a)}{\partial x_i} = \lim_{h \to 0} \frac{f(a + he_i) - f(a)}{h}, \tag{5}$$
donde $e_i \in \mathbb{R}^n$ es el i-ésimo vector canónico.

Usando las fórmulas de diferencias hacia adelante y diferencias centradas con $h > 0,\ h \approx 0$ se tiene que

1. $$\boxed{(\nabla f(a))_i = \frac{f(a + he_i) - f(a)}{h} + \mathcal{O}(h),} \tag{6}$$

2. $$\boxed{(\nabla f(a))_i = \frac{f(a + he_i) - f(a - he_i)}{h} + \mathcal{O}(h^2),} \tag{7}$$

3 Aproximación a la matriz hessiana

La matriz hessiana asociada a $f(x)$ en a es la matriz simétrica $\nabla^2 f(a) \in \mathbb{R}^{nxn}$ definida por

$$(\nabla^2 f(a))_{kj} = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_j}\right)_{|x=a}, \quad 1 \leq j \leq k \leq n. \tag{8}$$

Computacionalmente es impráctico hacer algebraicamente $n(n+1)/2$ derivadas parciales dobles. De donde la matriz hessiana se aproximará numéricamente.

Definimos $F_j : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}, \;\; j = 1, \ldots, n$, como

$$F_j(x) = \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_j}\right).$$

Sean $1 \leq k \leq n, \; h_k > 0, \; h_k \approx 0$ y $e_k \in \mathbb{R}^n$ el k-ésimo vector canónico. La fórmula de diferencias hacia adelante de la derivada en (8) indica que

$$\frac{\partial}{\partial x_k}(F_j(a)) = \frac{F_j(a + h_k e_k) - F(a)}{h_k} + \mathcal{E}(h_k), \tag{9}$$

a su vez usando la misma fórmula de diferencias hacia adelante para F_j con $h_j > 0, \; h_j \approx 0.$ se tiene que

$$F_j(a + h_k e_k) = \frac{f(a + h_k e_k + h_j e_j) - f(a + h_k e_k)}{h_j} + \mathcal{E}(h_j), \tag{10}$$

y

$$F_j(a) = \frac{f(a + h_j e_j) - f(a)}{h_j} + \mathcal{E}(h_j). \tag{11}$$

Sustituyendo (10) y (11) en (9) se obtiene

$$(\nabla^2 f(a))_{kj} \approx \frac{f(a + h_k e_k + h_j e_j) - f(a + h_k e_k) - f(a + h_j e_j) + f(a)}{h_k h_j}, \tag{12}$$

con un error de $\mathcal{E}(h_k) + \mathcal{E}(h_j)$.

Supongamos que escogemos un valor constante $h > 0, \;\; h \approx 0$ tal que $h_k = h_j = h$, para todo $j, \; k = 1, \ldots, n$.

Entonces para $1 \leq j \leq k \leq n$ se tiene que:

$$\boxed{(\nabla^2 f(a))_{kj} \approx \frac{f(a + he_k + he_j) - f(a + he_k) - f(a + he_j) + f(a)}{h^2},} \tag{13}$$

con error de $\mathcal{E}(h)$.

4 Laboratorio

Escriba las siguientes funciones en **Matlab**,

---

function $[g] = gradiente(fname, a)$
% Se aproxima el gradiente de $fname$ en el vector a por medio de diferencias
% hacia adelante en el vector a.
% In.
% $fname$.- cadena de caracteres con el nombre de la función.
% a.- vector columna de dimensión n.
% Out
% g.- vector columna de n componentes con la aproximación a las derivadas parciales.
% Internamente se usa $h = 10^{-5}$.

---

function $[H] = hessiana(fname, a)$
% Calcula la matriz hessiana de la función *fname.m* en el en el vector a.
% In
% $fname$.- cadena de caracteres con el nombre de la función.
% a.- vector columna de dimensión n.
% Out
% H.- matriz simétrica nxn con la aproximación a la matriz hessiana.
% Internamente se usa $h = 10^{-5}$.

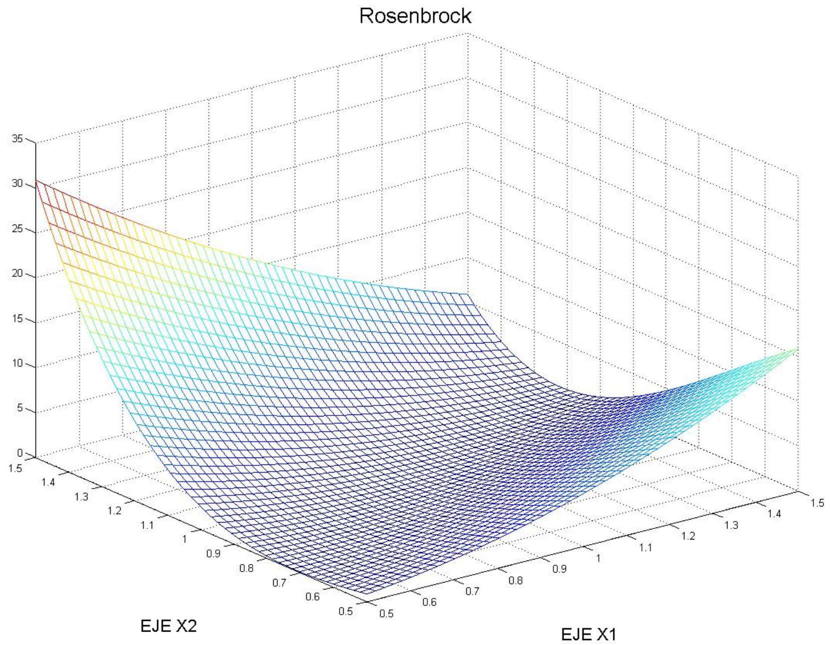
Función de Rosenbrock

$$f(x) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2, \;\; a = (1,\ 1)^T.$$

Solución:

$$g = \begin{pmatrix} 0.000041 \\ 0.00001 \end{pmatrix}, \quad H = \begin{pmatrix} 82.002 & -40.00 \\ -40.00 & 20.00 \end{pmatrix}.$$

Valores propios de H: $\lambda_1 = 0.3937,\ \lambda_2 = 101.6065.$



Función de Fermat-Weber

$$f(x) = \left(\sqrt{x_1^2 + x_2^2}\right) + \left(\sqrt{(x_1-4)^2 + x_2^2}\right) + \left(\sqrt{(x_1-1)^2 + (x_2-3)^2}\right)$$

$a = (2,\ 2)^T$

$$g = \begin{pmatrix} 0.7071 \\ 0.7071 \end{pmatrix}, \quad H = \begin{pmatrix} .7071 & .3517 \\ .3517 & .1079 \end{pmatrix}.$$