Optimización Multidimensional no restringida 2020

Prof.: Dr. Alejandro S. M. Santa Cruz

J.T.P.: Dr. Juan Ignacio Manassaldi

Aux. 1ra: Ing. Amalia Rueda

Repaso

- Decimos que $\underline{x}^*$ es un mínimo local si:

$$\underline{x}^* \in S \; tal\; que\; f\left(\underline{x}^*\right) \langle\, f\left(\underline{x}^* + \underline{\delta}\right)$$

- $\underline{x}^*$ es un mínimo global si:

$$\underline{x}^* \in S \; tal\; que\; f\left(\underline{x}^*\right) \langle\, f\left(\underline{x}\right) \forall \underline{x} \in S$$

- Decimos que $\underline{x}^*$ es un máximo local si:

$$\underline{x}^* \in S \; tal\; que\; f\left(\underline{x}^*\right) \rangle\, f\left(\underline{x}^* + \underline{\delta}\right)$$

- $\underline{x}^*$ es un máximo global si:

$$\underline{x}^* \in S \; tal\; que\; f\left(\underline{x}^*\right) \rangle\, f\left(\underline{x}\right) \forall \underline{x} \in S$$

Matemática Superior Aplicada

Repaso

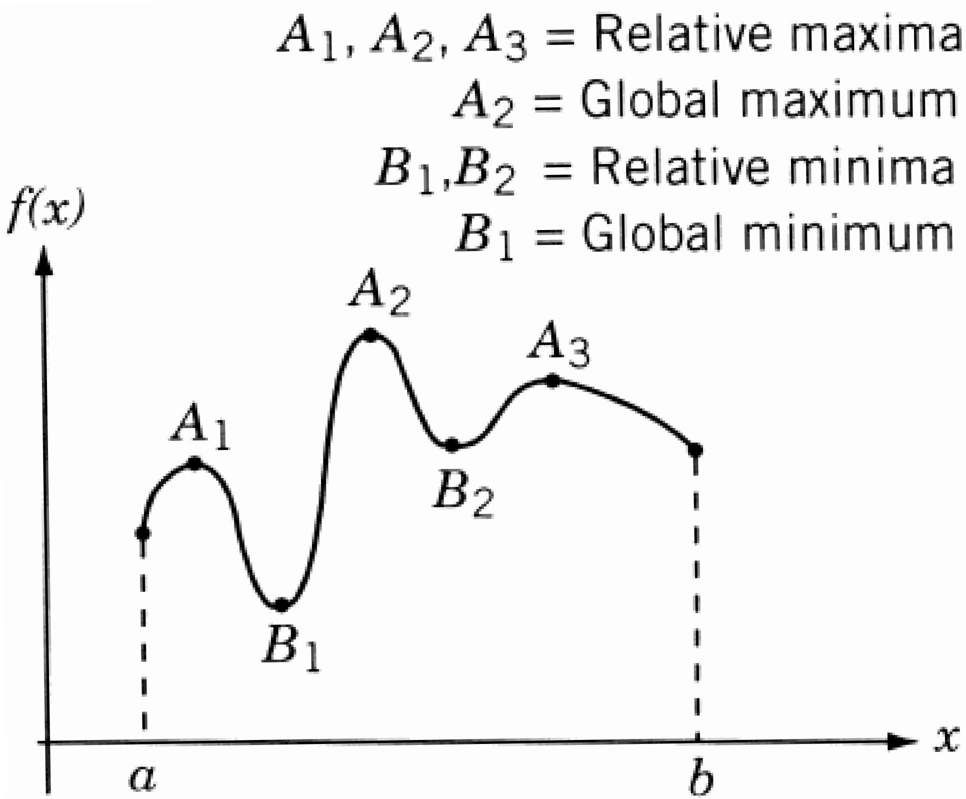
UTN

- Si tenemos algún punto $\underline{x}$* del dominio tal que: $\nabla f\left(\underline{x}^{*}\right)=\underline{0}$

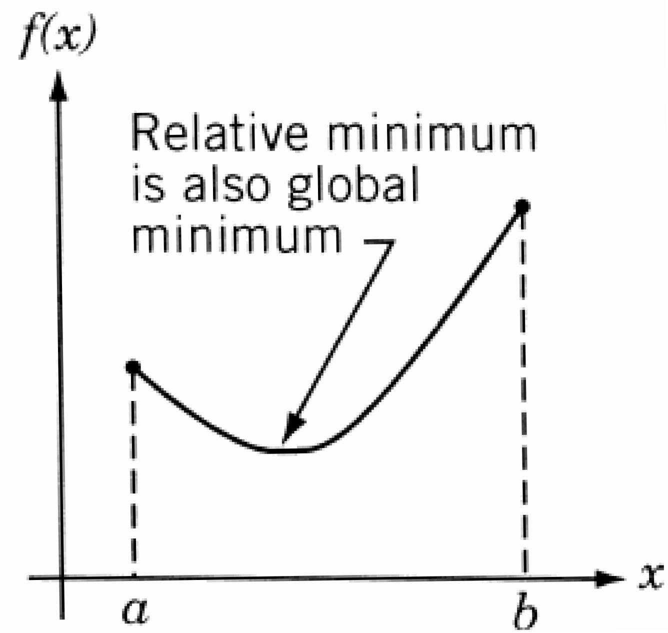
  Entonces *$\underline{x}$* es un punto crítico*, esto es, puede ser:

  1) Un mínimo local
  2) Un máximo local
  3) Un punto de ensilladura

Repaso



A_1, A_2, A_3 = Relative maxima
A_2 = Global maximum
B_1, B_2 = Relative minima
B_1 = Global minimum
$f(x)$
A_1
A_2
A_3
B_1
B_2
a
b
x



$f(x)$
Relative minimum
is also global
minimum
a
b
x

Repaso

Serie de Taylor en una variable: $f(x)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}f^{k}(x_0)(x-x_0)^k$

Aproximación de primer orden:

$$f(x,x_0)= f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)$$

Aproximación de segundo orden:

$$f(x,x_0)= f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)+\frac{1}{2}f''(x_0)(x-x_0)^2$$

Repaso

Serie de Taylor en multivariable: $f\left(\underline{x}\right)=f\left(\underline{x}_0\right)+\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k!}d^k f\left(\underline{x}\right)$

Se define el diferencial *r* de una función *f* como:

$$d^r f\left(\underline{x}\right)=\underbrace{\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\cdots\sum_{k=1}^{n}}_{r\ \ sumatorias}\left(x-x_0\right)_i\left(x-x_0\right)_j\cdots\left(x-x_0\right)_k\frac{\partial^r f\left(\underline{x}_0\right)}{\partial x_i\partial x_j\cdots\partial x_k}$$

Para *r=1*:

$$df\left(\underline{x}\right)=\sum_{i=1}^{n}\left(x-x_0\right)_i\frac{\partial f\left(\underline{x}_0\right)}{\partial x_i}$$

$$df\left(\underline{x}\right)=\left(x-x_0\right)_1\frac{\partial f\left(\underline{x}_0\right)}{\partial x_1}+\left(x-x_0\right)_2\frac{\partial f\left(\underline{x}_0\right)}{\partial x_2}+\cdots+\left(x-x_0\right)_n\frac{\partial f\left(\underline{x}_0\right)}{\partial x_n}$$

Repaso

$$df\left(\underline{x}\right)=\left(x-x_0\right)_1\frac{\partial f\left(\underline{x}_0\right)}{\partial x_1}+\left(x-x_0\right)_2\frac{\partial f\left(\underline{x}_0\right)}{\partial x_2}+\cdots+\left(x-x_0\right)_n\frac{\partial f\left(\underline{x}_0\right)}{\partial x_n}$$

$$df\left(\underline{x}\right)=\left(\underline{x}-\underline{x}_0\right)^T\nabla f\left(\underline{x}_0\right)$$

$$\begin{matrix} & \dfrac{\partial f\left(\underline{x}_0\right)}{\partial x_1} \\ & \dfrac{\partial f\left(\underline{x}_0\right)}{\partial x_2} \\ & \vdots \\ & \dfrac{\partial f\left(\underline{x}_0\right)}{\partial x_n} \\ \left(x-x_0\right)_1 \quad \left(x-x_0\right)_2 \quad \cdots \quad \left(x-x_0\right)_n & \end{matrix}$$

Repaso

Para $r=2$: $$d^2 f(\underline{x}) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}(x-x_0)_i\,(x-x_0)_j\,\frac{\partial^2 f(\underline{x}_0)}{\partial x_i \partial x_j}$$

$$d^2 f(\underline{x}) =$$

$$(x-x_0)_1(x-x_0)_1\frac{\partial^2 f(\underline{x}_0)}{\partial x_1\partial x_1}+(x-x_0)_1(x-x_0)_2\frac{\partial^2 f(\underline{x}_0)}{\partial x_1\partial x_2}+\cdots+(x-x_0)_1(x-x_0)_n\frac{\partial^2 f(\underline{x}_0)}{\partial x_1\partial x_n}+$$

$$+(x-x_0)_2(x-x_0)_1\frac{\partial^2 f(\underline{x}_0)}{\partial x_2\partial x_1}+(x-x_0)_2(x-x_0)_2\frac{\partial^2 f(\underline{x}_0)}{\partial x_2\partial x_2}+\cdots+(x-x_0)_2(x-x_0)_n\frac{\partial^2 f(\underline{x}_0)}{\partial x_1\partial x_n}+$$

$$\vdots$$

$$+(x-x_0)_n(x-x_0)_1\frac{\partial^2 f(\underline{x}_0)}{\partial x_n\partial x_1}+(x-x_0)_n(x-x_0)_2\frac{\partial^2 f(\underline{x}_0)}{\partial x_n\partial x_2}+\cdots+(x-x_0)_n(x-x_0)_n\frac{\partial^2 f(\underline{x}_0)}{\partial x_n\partial x_n}$$

Repaso

$$d^2 f(\underline{x}) = (x-x_0)_1 (x-x_0)_1 \frac{\partial^2 f(\underline{x}_0)}{\partial x_1 \partial x_1} + (x-x_0)_1 (x-x_0)_2 \frac{\partial^2 f(\underline{x}_0)}{\partial x_1 \partial x_2} + \cdots + (x-x_0)_1 (x-x_0)_n \frac{\partial^2 f(\underline{x}_0)}{\partial x_1 \partial x_n} +$$

$$+ (x-x_0)_2 (x-x_0)_1 \frac{\partial^2 f(\underline{x}_0)}{\partial x_2 \partial x_1} + (x-x_0)_2 (x-x_0)_2 \frac{\partial^2 f(\underline{x}_0)}{\partial x_2 \partial x_2} + \cdots + (x-x_0)_2 (x-x_0)_n \frac{\partial^2 f(\underline{x}_0)}{\partial x_1 \partial x_n} +$$

$$\vdots$$

$$+ (x-x_0)_n (x-x_0)_1 \frac{\partial^2 f(\underline{x}_0)}{\partial x_n \partial x_1} + (x-x_0)_n (x-x_0)_2 \frac{\partial^2 f(\underline{x}_0)}{\partial x_n \partial x_2} + \cdots + (x-x_0)_n (x-x_0)_n \frac{\partial^2 f(\underline{x}_0)}{\partial x_n \partial x_n}$$

Matriz Hessiana

$$\begin{array}{c|cccc|c}
 & \frac{\partial^2 f(\underline{x}_0)}{\partial x_1 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(\underline{x}_0)}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\underline{x}_0)}{\partial x_1 \partial x_n} & (x-x_0)_1 \\
 & \frac{\partial^2 f(\underline{x}_0)}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(\underline{x}_0)}{\partial x_2 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\underline{x}_0)}{\partial x_2 \partial x_n} & (x-x_0)_2 \\
 & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
 & \frac{\partial^2 f(\underline{x}_0)}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(\underline{x}_0)}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\underline{x}_0)}{\partial x_n \partial x_n} & (x-x_0)_n \\
\hline
(x-x_0)_1 \quad (x-x_0)_2 \quad \cdots \quad (x-x_0)_n & & & & &
\end{array}$$

$$d^2 f(\underline{x}) = (\underline{x} - \underline{x}_0)^T \nabla^2 f(\underline{x}_0)(\underline{x} - \underline{x}_0)$$

Repaso

Aproximación de primer orden:

$$f\left(\underline{x},\underline{x}_0\right)= f\left(\underline{x}_0\right)+\left(\underline{x}-\underline{x}_0\right)^T \nabla f\left(\underline{x}_0\right)$$

Aproximación de segundo orden:

$$f\left(\underline{x},\underline{x}_0\right)= f\left(\underline{x}_0\right)+\left(\underline{x}-\underline{x}_0\right)^T \nabla f\left(\underline{x}_0\right)+\frac{1}{2}\left(\underline{x}-\underline{x}_0\right)^T \nabla^2 f\left(\underline{x}_0\right)\left(\underline{x}-\underline{x}_0\right)$$

Introducción

Los métodos que se han ideado se pueden clasificar en tres amplias categorías según el tipo de información que debe proporcionar el usuario:

- Métodos de búsqueda directa, que utilizan solo valores de función.

  Método de una variable a la vez

- Métodos de gradiente (primer orden), que requieren estimaciones de la primera derivada de $f(x)$.

  Descenso mas pronunciado

- Métodos de segundo orden, que requieren estimaciones de la primera y segunda derivada de $f(x)$.

  Método de Newton

Introducción - Búsqueda de línea

Matemática Superior Aplicada

UTN

- La búsqueda de línea nos permite encontrar el valor mínimo (o máximo) que toma una función sobre una dirección determinada de búsqueda.
- Para realizar la búsqueda de línea sobre $f(\underline{x})$, necesitamos un valor perteneciente al dominio de la función $\underline{x}^0$ y una dirección de búsqueda $\underline{d}$.
- Partiendo del punto $\underline{x}^0$ y utilizando la dirección en el espacio $\underline{d}$ podemos encontrar el valor mínimo que toma la función mediante una optimización unidimensional.

$$\underline{x} = \underline{x}^0 + \alpha \underline{d}$$

Ecuación de todos los puntos sobre la dirección $\underline{d}$ desde $\underline{x}^0$

Búsqueda de línea

Ecuación de todos los puntos sobre la dirección $\underline{d}$ desde $\underline{x}^0$:

$$\underline{x} = \underline{x}^0 + \alpha \underline{d}$$

Para encontrar el valor mínimo sobre esta dirección se debe resolver el siguiente problema:

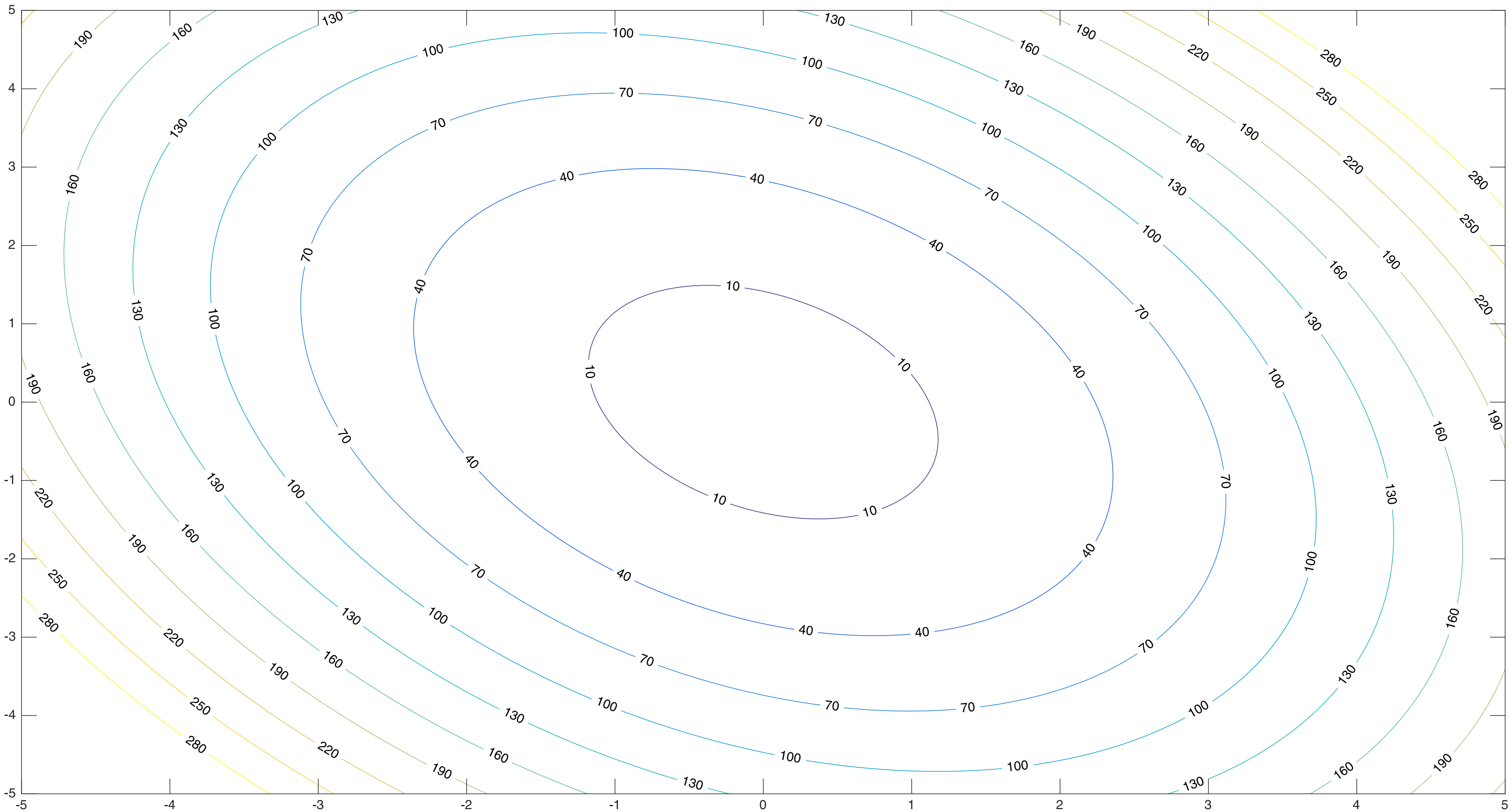
$$Min.\ f\left(\underline{x}^0 + \alpha \underline{d}\right)$$

¡Es un problema de optimización unidimensional!

Solo debo encontrar el α que minimiza f

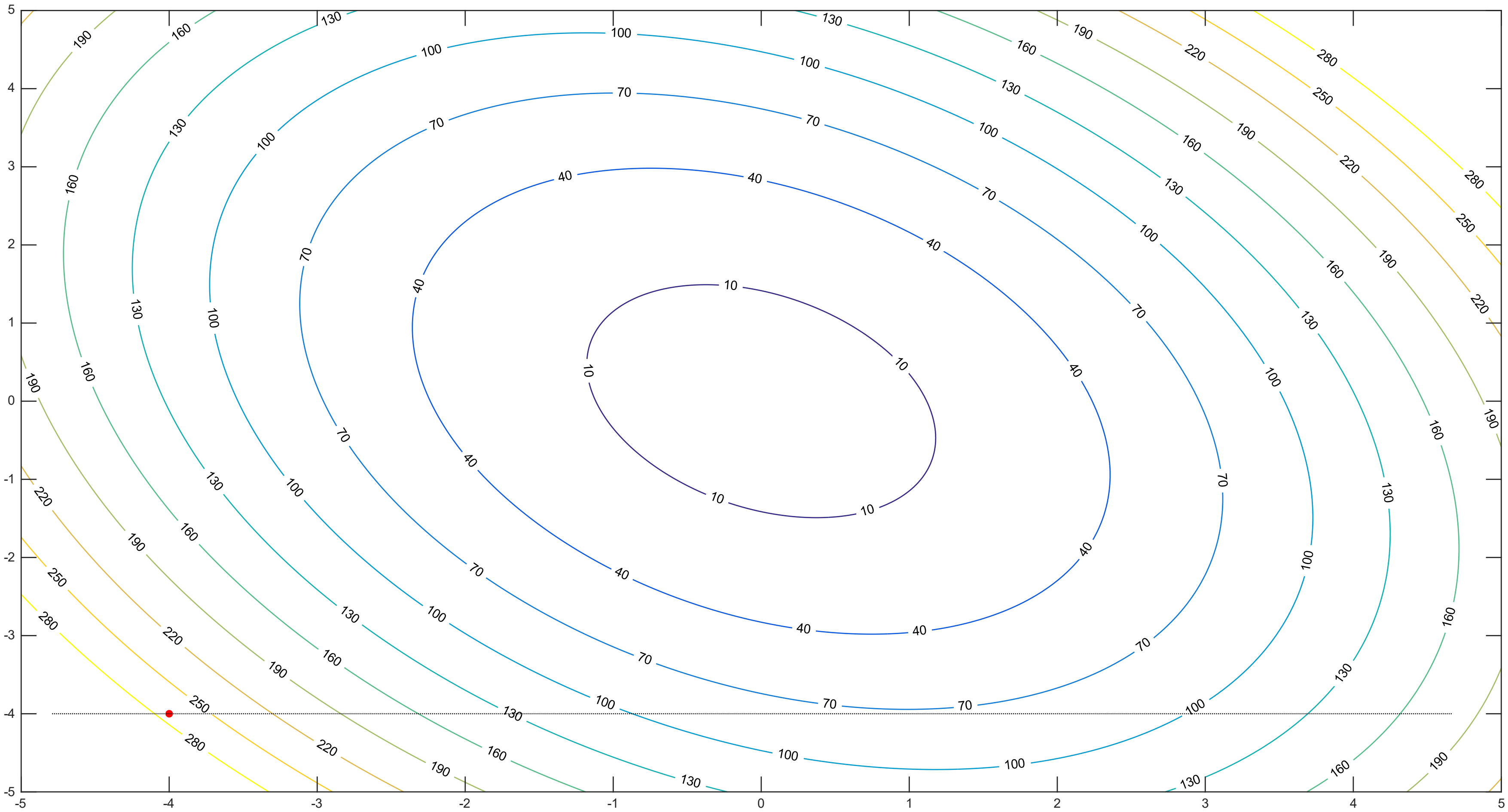
Búsqueda de línea - Ejemplo

$$f\left(\underline{x}\right) = 8{x_1}^2 + 4x_1x_2 + 5{x_2}^2$$



Búsqueda de línea - Ejemplo

$$f\left(\underline{x}\right)=8x_1^{\ 2}+4x_1x_2+5x_2^{\ 2} \qquad \underline{x}^0=\begin{bmatrix}-4\\-4\end{bmatrix} \qquad \underline{d}=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$$



Búsqueda de línea - Ejemplo

$$\underline{x}^0 = \begin{bmatrix} -4 \\ -4 \end{bmatrix} \quad \underline{d} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \rightarrow \underline{x} = \underline{x}^0 + \alpha \underline{d}$$

$$\underline{x} = \begin{bmatrix} -4 \\ -4 \end{bmatrix} + \alpha \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \rightarrow \underline{x} = \begin{bmatrix} -4+\alpha \\ -4 \end{bmatrix}$$

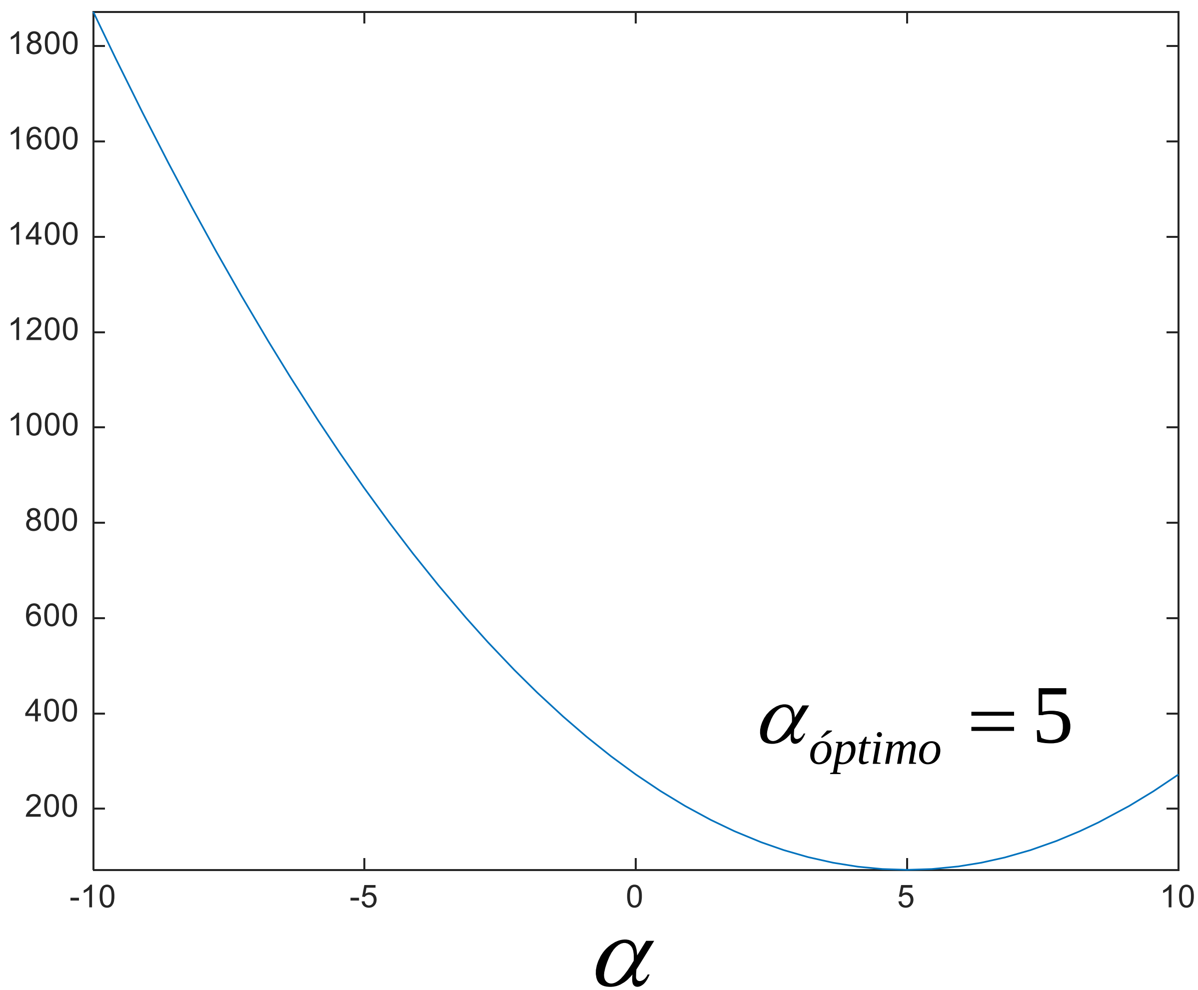
$$Min.\ f\left(\underline{x}^0 + \alpha \underline{d}\right) \qquad f\left(\underline{x}\right) = 8x_1^{\ 2} + 4x_1x_2 + 5x_2^{\ 2}$$

$$Min\ 8\left(-4+\alpha\right)^2 + 4\left(-4+\alpha\right)\left(-4\right) + 5\left(-4\right)^2$$

Búsqueda de línea - Ejemplo

$$Min\ 8(-4+\alpha)^2+4(-4+\alpha)(-4)+5(-4)^2$$

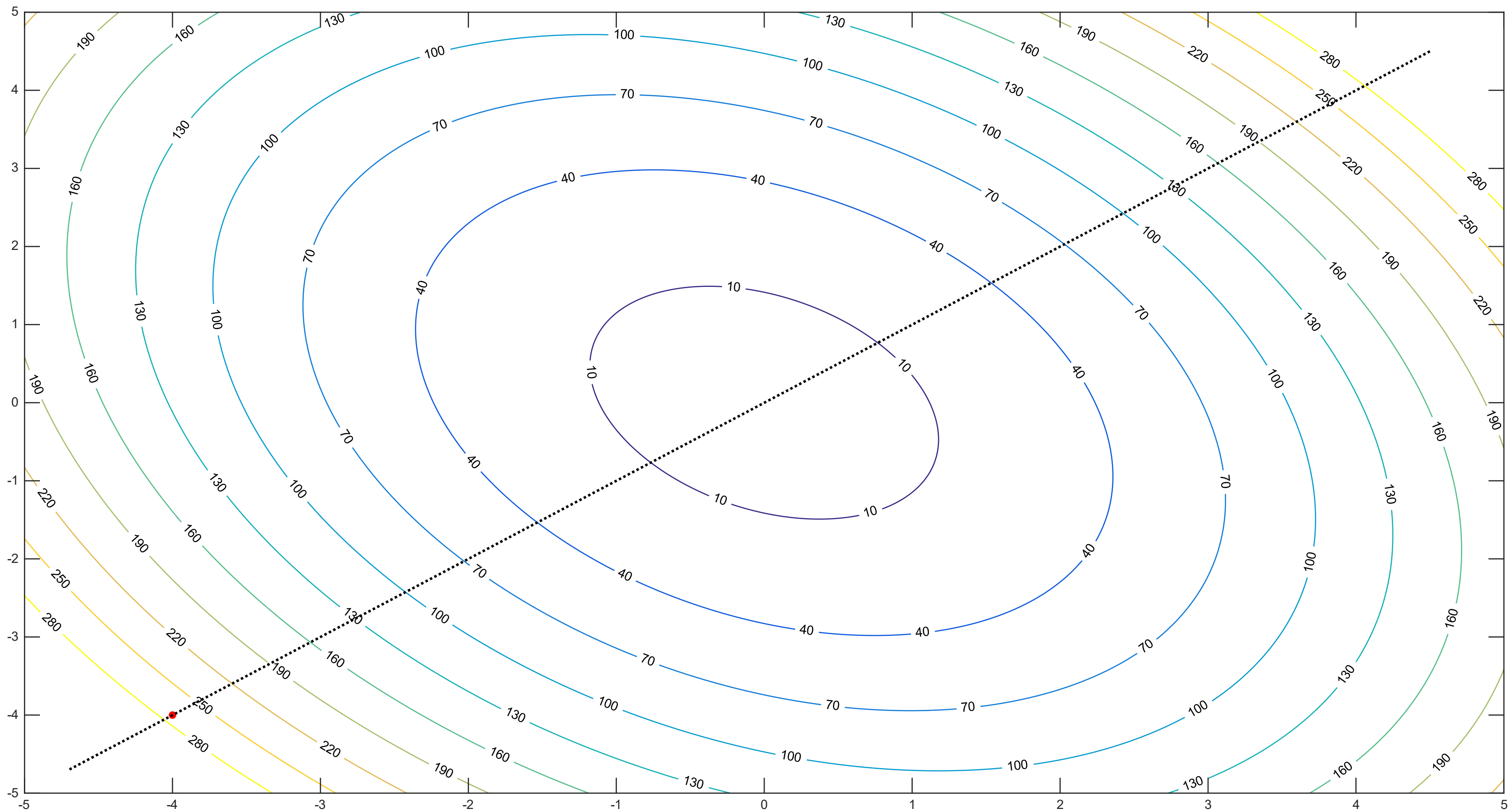
$$f\left(\underline{x}^0+\alpha\underline{d}\right)$$



Búsqueda de línea - Propuesta

$$\underline{x}^0 = \begin{bmatrix} -4 \\ -4 \end{bmatrix} \quad \underline{d} = \begin{bmatrix} \cos(\pi/4) \\ sen(\pi/4) \end{bmatrix}$$

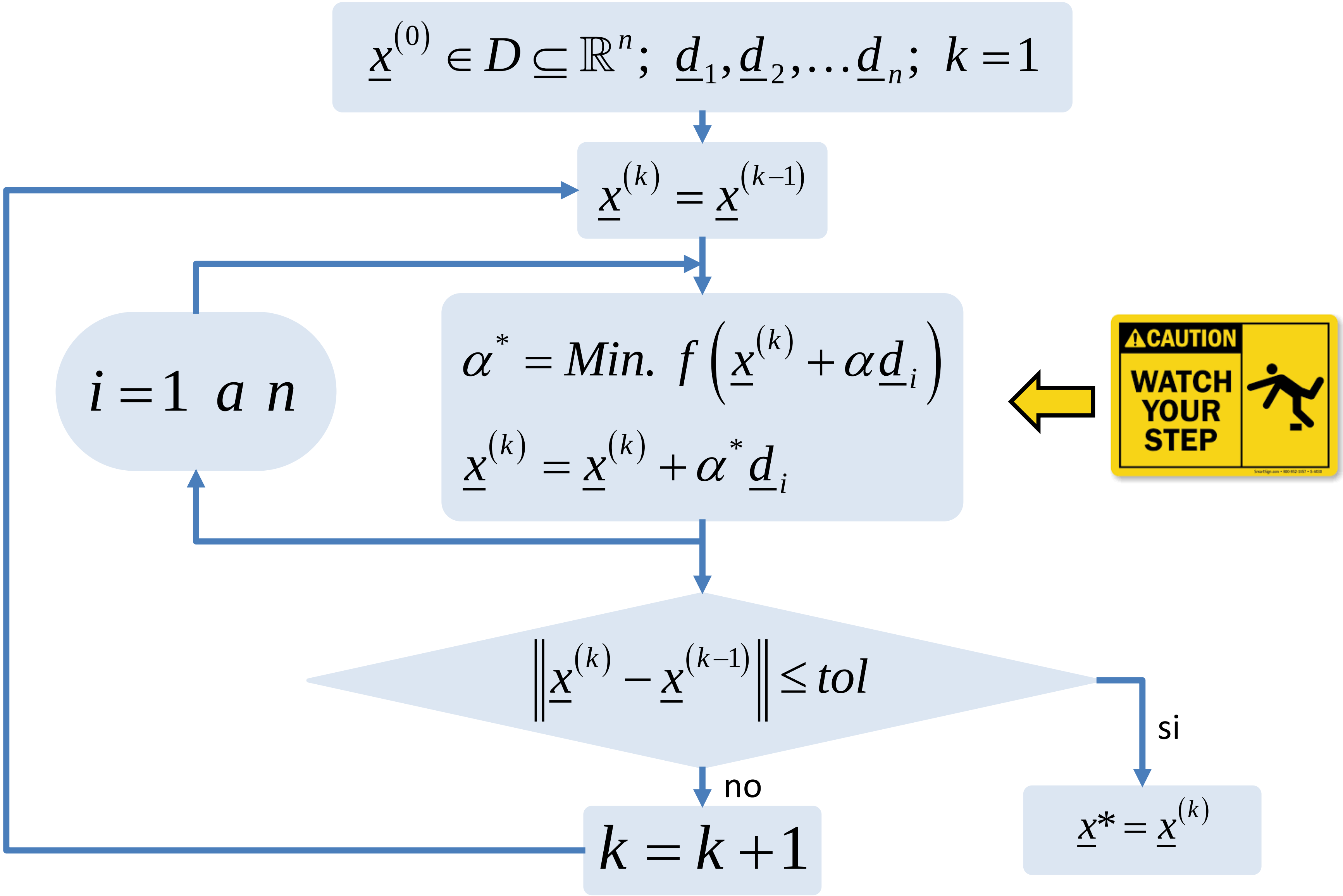
$$Min.\ f\left(\underline{x}\right) = 8x_1^{\ 2} + 4x_1x_2 + 5x_2^{\ 2}$$



Método directo: "Una variable a la vez"

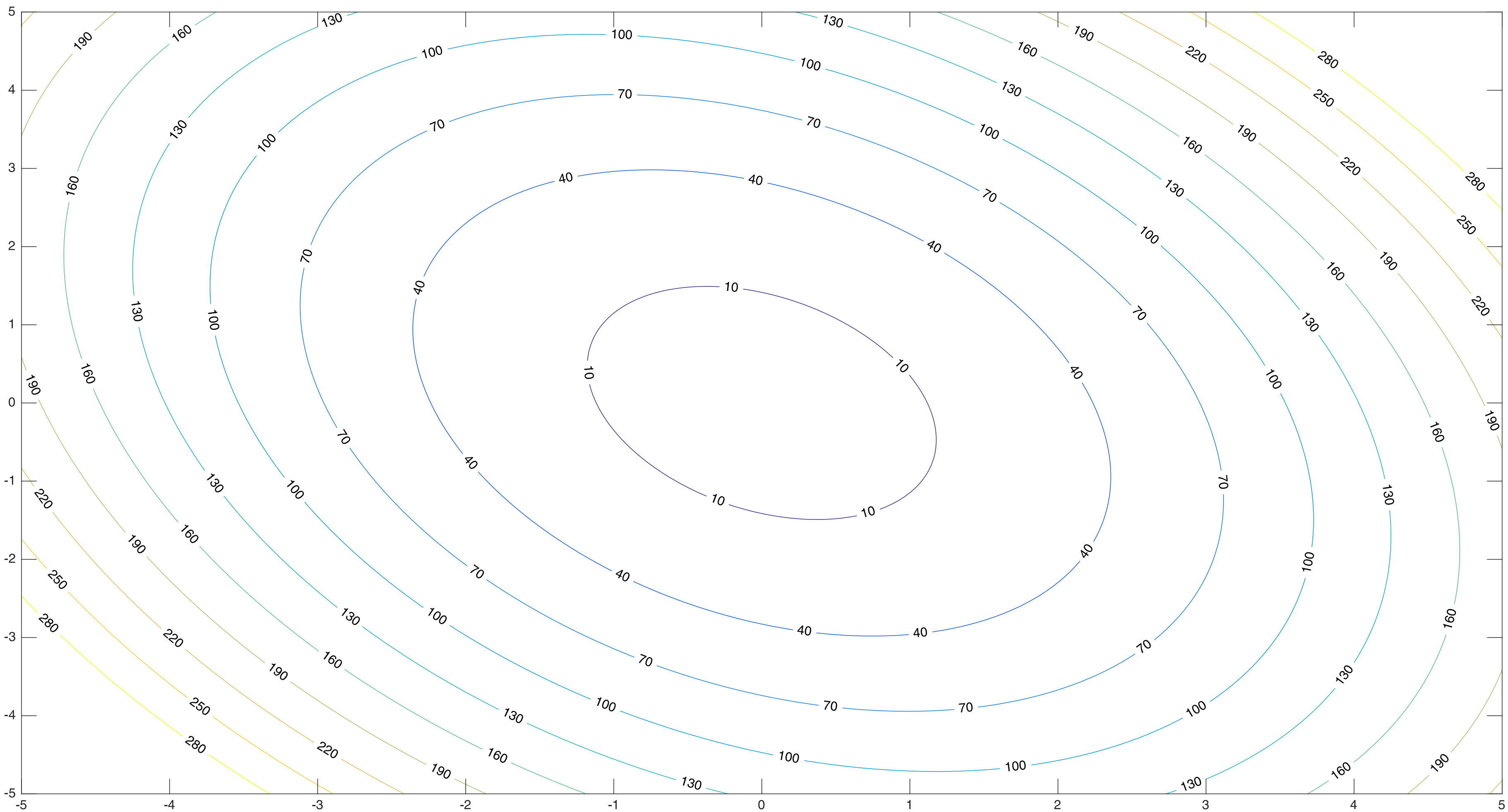
- En el método de una variable a la vez, buscamos el mínimo a lo largo de las direcciones paralelas a los ejes.
- Este proceso se realiza de manera iterativa hasta que no sea posible una mejora en la FO.
- El método de optimización unidimensional elegido influye en el desempeño del método.
- Este método puede no converger y en algunos casos su convergencia resulta muy lenta.
- Estos problemas se pueden evitar cambiando las direcciones de búsqueda de una manera favorable en lugar de mantenerlas siempre paralelas a los ejes de coordenadas.

Una variable a la vez - Algoritmo



Una variable a la vez - Ejemplo

$$Min.\ f\left(\underline{x}\right)=8x_1^{\ 2}+4x_1x_2+5x_2^{\ 2} \qquad \underline{x}^{(0)}=\begin{bmatrix}-4\\-4\end{bmatrix}$$



Una variable a la vez - Ejemplo

$$Min.\quad f\left(\underline{x}\right)=8x_1^{\;2}+4x_1x_2+5x_2^{\;2}$$

$k=1$

$$\underline{x}^{(0)}=\begin{bmatrix}-4\\-4\end{bmatrix}$$

$$\underline{d}_1=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$$

$$\underline{d}_2=\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$$

$$\underline{x}^{(1)}=\underline{x}^{(0)}=\begin{bmatrix}-4\\-4\end{bmatrix}$$

$i=1$

$$\alpha=Min.\ f\left(\underline{x}^{(1)}+\alpha\underline{d}_1\right)\rightarrow\alpha=5$$

$$\underline{x}^{(1)}=\underline{x}^{(1)}+\alpha\underline{d}_1\ \rightarrow\underline{x}^{(1)}=\begin{bmatrix}-4\\-4\end{bmatrix}+5\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1\\-4\end{bmatrix}$$

$i=2$

$$\alpha=Min.\ f\left(\underline{x}^{(1)}+\alpha\underline{d}_2\right)\rightarrow\alpha=3.6$$

$$\underline{x}^{(1)}=\underline{x}^{(1)}+\alpha\underline{d}_2\rightarrow\underline{x}^{(1)}=\begin{bmatrix}1\\-4\end{bmatrix}+3.6\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1\\-0.4\end{bmatrix}$$

$$\underline{x}^{(0)}=\begin{bmatrix}-4\\-4\end{bmatrix};\ \underline{x}^{(1)}=\begin{bmatrix}1\\-0.4\end{bmatrix}\rightarrow\begin{cases}f\left(\underline{x}^{(0)}\right)=272\\ f\left(\underline{x}^{(1)}\right)=7.2\end{cases}$$

¿? ¡Seguimos!

Una variable a la vez - Ejemplo

$$k = 2$$

$$\underline{x}^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 \\ -0.4 \end{bmatrix}$$

$$\underline{d}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\underline{d}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\underline{x}^{(2)} = \underline{x}^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 \\ -0.4 \end{bmatrix}$$

$$i = 1$$

$$\alpha = Min.\ f\left(\underline{x}^{(2)} + \alpha \underline{d}_1\right) \rightarrow \alpha = -0.9$$

$$\underline{x}^{(2)} = \underline{x}^{(2)} + \alpha \underline{d}_1 \rightarrow \underline{x}^{(2)} = \begin{bmatrix} 1 \\ -0.4 \end{bmatrix} - 0.9 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.1 \\ -0.4 \end{bmatrix}$$

$$i = 2$$

$$\alpha = Min.\ f\left(\underline{x}^{(2)} + \alpha \underline{d}_2\right) \rightarrow \alpha = 0.36$$

$$\underline{x}^{(2)} = \underline{x}^{(2)} + \alpha \underline{d}_2 \rightarrow \underline{x}^{(2)} = \begin{bmatrix} 0.1 \\ -0.4 \end{bmatrix} + 0.36 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.1 \\ -0.04 \end{bmatrix}$$

$$\underline{x}^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 \\ -0.4 \end{bmatrix};\ \underline{x}^{(2)} = \begin{bmatrix} 0.1 \\ -0.04 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{cases} f\left(\underline{x}^{(1)}\right) = 7.2 \\ f\left(\underline{x}^{(2)}\right) = 0.072 \end{cases}$$

¿? ¡Seguimos!

Una variable a la vez - Ejemplo

$$k = 3$$

$$\underline{x}^{(2)} = \begin{bmatrix} 0.1 \\ -0.04 \end{bmatrix}$$

$$\underline{d}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\underline{d}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\underline{x}^{(3)} = \underline{x}^{(2)} = \begin{bmatrix} 0.1 \\ -0.04 \end{bmatrix}$$

$$i = 1$$

$$\alpha = Min.\ f\left(\underline{x}^{(3)} + \alpha \underline{d}_1\right) \rightarrow \alpha = -0.09$$

$$\underline{x}^{(3)} = \underline{x}^{(3)} + \alpha \underline{d}_1 \rightarrow \underline{x}^{(3)} = \begin{bmatrix} 0.1 \\ -0.04 \end{bmatrix} - 0.09 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.01 \\ -0.04 \end{bmatrix}$$

$$i = 2$$

$$\alpha = Min.\ f\left(\underline{x}^{(3)} + \alpha \underline{d}_2\right) \rightarrow \alpha = 0.036$$

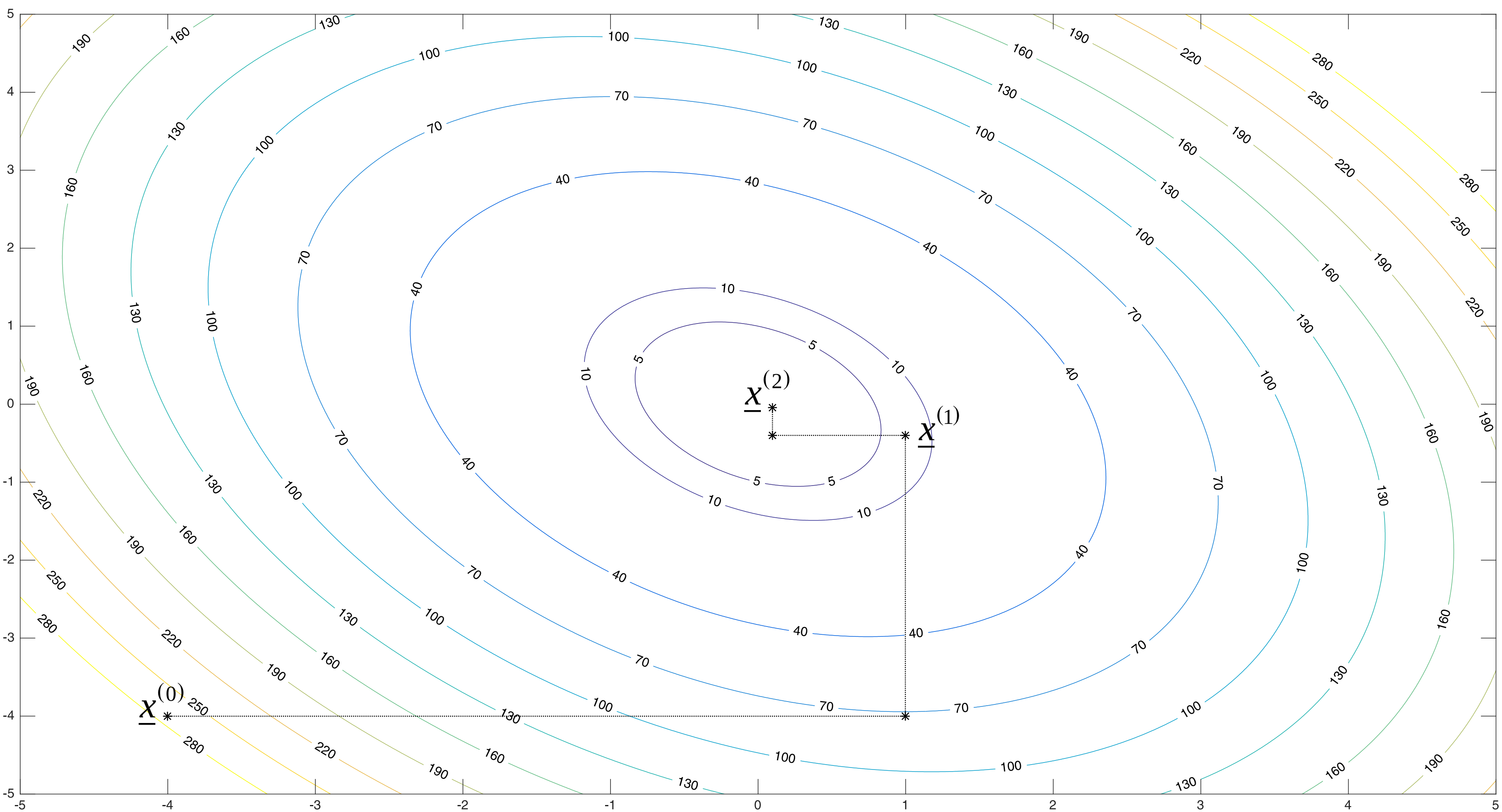
$$\underline{x}^{(3)} = \underline{x}^{(3)} + \alpha \underline{d}_2 \rightarrow \underline{x}^{(3)} = \begin{bmatrix} 0.01 \\ -0.04 \end{bmatrix} + 0.036 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.01 \\ -0.004 \end{bmatrix}$$

$$\underline{x}^{(2)} = \begin{bmatrix} 0.1 \\ -0.04 \end{bmatrix};\ \underline{x}^{(3)} = \begin{bmatrix} 0.01 \\ -0.004 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{cases} f\left(\underline{x}^{(2)}\right) = 0.072 \\ f\left(\underline{x}^{(3)}\right) = 0.0072 \end{cases}$$

¿?

¡Sigan!

Una variable a la vez - Ejemplo



Métodos basados en el gradiente

- Los métodos directo requieren solo valores de la función objetivo para avanzar hacia la solución.
- Los métodos directos son importantes, porque muy a menudo, en un problema práctico de ingeniería, esta es la única información confiable disponible.
- Por otro lado, incluso los mejores métodos directos pueden requerir un número excesivo de evaluaciones de la función para localizar la solución.
- El ítem anterior, combinado con el deseo natural de buscar puntos críticos, motiva a considerar métodos que emplean información del gradiente.
- Se supone en todo momento que $f(\underline{x}), \nabla f(\underline{x})$ y $\nabla^2 f(\underline{x})$ existen y son continuas.

Métodos basados en el gradiente

- Todos los métodos que se presentaremos emplean un procedimiento de iteración similar, el nuevo punto se obtiene a partir de una dirección de búsqueda:

$$\underline{x}^{(k+1)} = \underline{x}^{(k)} + \alpha^{k}\,\underline{s}\left(\underline{x}^{(k)}\right)$$

$$\underline{x}^{(k)} :\ Estimación\ actual\ de\ \underline{x}^{*}$$

$$\alpha^{k} :\ Tamaño\ del\ salto$$

$$\underline{s}\left(\underline{x}^{(k)}\right):\ Dirección\ de\ busqueda\ en\ el\ espacio\ \mathbb{R}^{n}$$

- En general se busca entonces encontrar el tamaño del salto en la dirección de $\underline{s}$ que minimiza el valor de la función objetivo (búsqueda de línea).

Método del descenso mas pronunciado

- Supongamos que estamos en el punto $\underline{x}^{(k)}$ y deseamos determinar la dirección de "el mayor descenso local".
- A partir de la serie de Taylor, formamos una aproximación lineal a $f(x)$ a partir $\underline{x}^{(k)}$ eliminando los términos de orden 2 y superiores:

$$f\left(\underline{x},\underline{x}^{(k)}\right)= f\left(\underline{x}^{(k)}\right)+\left(\underline{x}-\underline{x}^{(k)}\right)^T \nabla f\left(\underline{x}^{(k)}\right)$$

- Evaluando la aproximación de la función objetivo en el siguiente punto $(k+1)$ del proceso iterativo se llega a:

$$f\left(\underline{x}^{(k+1)},\underline{x}^{(k)}\right)= f\left(\underline{x}^{(k)}\right)+\left(\underline{x}^{(k+1)}-\underline{x}^{(k)}\right)^T \nabla f\left(\underline{x}^{(k)}\right)$$

- Suponemos que la aproximación lineal representa a la función, por lo que:

$$f\left(\underline{x}^{(k+1)}\right)= f\left(\underline{x}^{(k)}\right)+\left(\underline{x}^{(k+1)}-\underline{x}^{(k)}\right)^T \nabla f\left(\underline{x}^{(k)}\right)$$

Método del descenso mas pronunciado

- Por lo tanto, el cambio en la función objetivo corresponde a:

$$f\left(\underline{x}^{(k+1)}\right)-f\left(\underline{x}^{(k)}\right)=\left(\underline{x}^{(k+1)}-\underline{x}^{(k)}\right)^{T}\nabla f\left(\underline{x}^{(k)}\right)$$

- Siguiendo la estrategia de resolución propuesta:

$$\underline{x}^{(k+1)}=\underline{x}^{(k)}+\alpha^{k}\,\underline{s}\left(\underline{x}^{(k)}\right)\Rightarrow\left(\underline{x}^{(k+1)}-\underline{x}^{(k)}\right)^{T}=\alpha^{k}\,\underline{s}\left(\underline{x}^{(k)}\right)^{T}$$

- Reemplazando en la expresión anterior:

$$f\left(\underline{x}^{(k+1)}\right)-f\left(\underline{x}^{(k)}\right)=\alpha^{k}\,\underline{s}\left(\underline{x}^{(k)}\right)^{T}\nabla f\left(\underline{x}^{(k)}\right)$$

- Analizando, proponemos la siguiente dirección:

$$s\left(\underline{x}^{(k)}\right)=-\nabla f\left(\underline{x}^{(k)}\right)$$

Método del descenso mas pronunciado

- Luego, reemplazando la dirección propuesta:

$$f\left(\underline{x}^{(k+1)}\right)-f\left(\underline{x}^{(k)}\right)=-\alpha^k\nabla f\left(\underline{x}^{(k)}\right)^T\nabla f\left(\underline{x}^{(k)}\right)$$

$$f\left(\underline{x}^{(k+1)}\right)-f\left(\underline{x}^{(k)}\right)=-\alpha^k\left\|\nabla f\left(\underline{x}^{(k)}\right)\right\|^2$$

- El método (basado en el gradiente) mas simple consiste en tomar la dirección opuesta del gradiente y fijar α como un parámetro fijo positivo:

$$\underline{x}^{(k+1)}=\underline{x}^{(k)}-\alpha\nabla f\left(\underline{x}^{(k)}\right)$$

- Esto tiene dos desventajas: la necesidad de hacer una elección adecuada para α y la lentitud inherente cerca del mínimo debido a que en esta zona el gradiente tiende a cero.

Método del descenso mas pronunciado

- El Método del descenso mas pronunciado propone realizar una optimización unidimensional para la elección de α en cada iteración:

$$\underline{x}^{(k+1)} = \underline{x}^{(k)} - \alpha^{(k)} \nabla f\left(\underline{x}^{(k)}\right)$$

- Por lo tanto, en cada iteración se debe resolver el siguiente problema de optimización unidimensional:

$$\alpha^{*} = \min\ f\left(\underline{x}^{(k)} - \alpha \nabla f\left(\underline{x}^{(k)}\right)\right) \Rightarrow \underline{x}^{(k+1)} = \underline{x}^{(k)} - \alpha^{*} \nabla f\left(\underline{x}^{(k)}\right)$$

- Este método es más confiable que el método de gradiente simple, pero la convergencia sigue siendo lenta para la mayoría de los problemas prácticos.

Método simple (λ=cte)

Ejemplo: $Min.\ \ f\left(\underline{x}\right)=\left(x_1^{\,2}+x_2-11\right)^2+\left(x_1+x_2^{\,2}-7\right)^2$

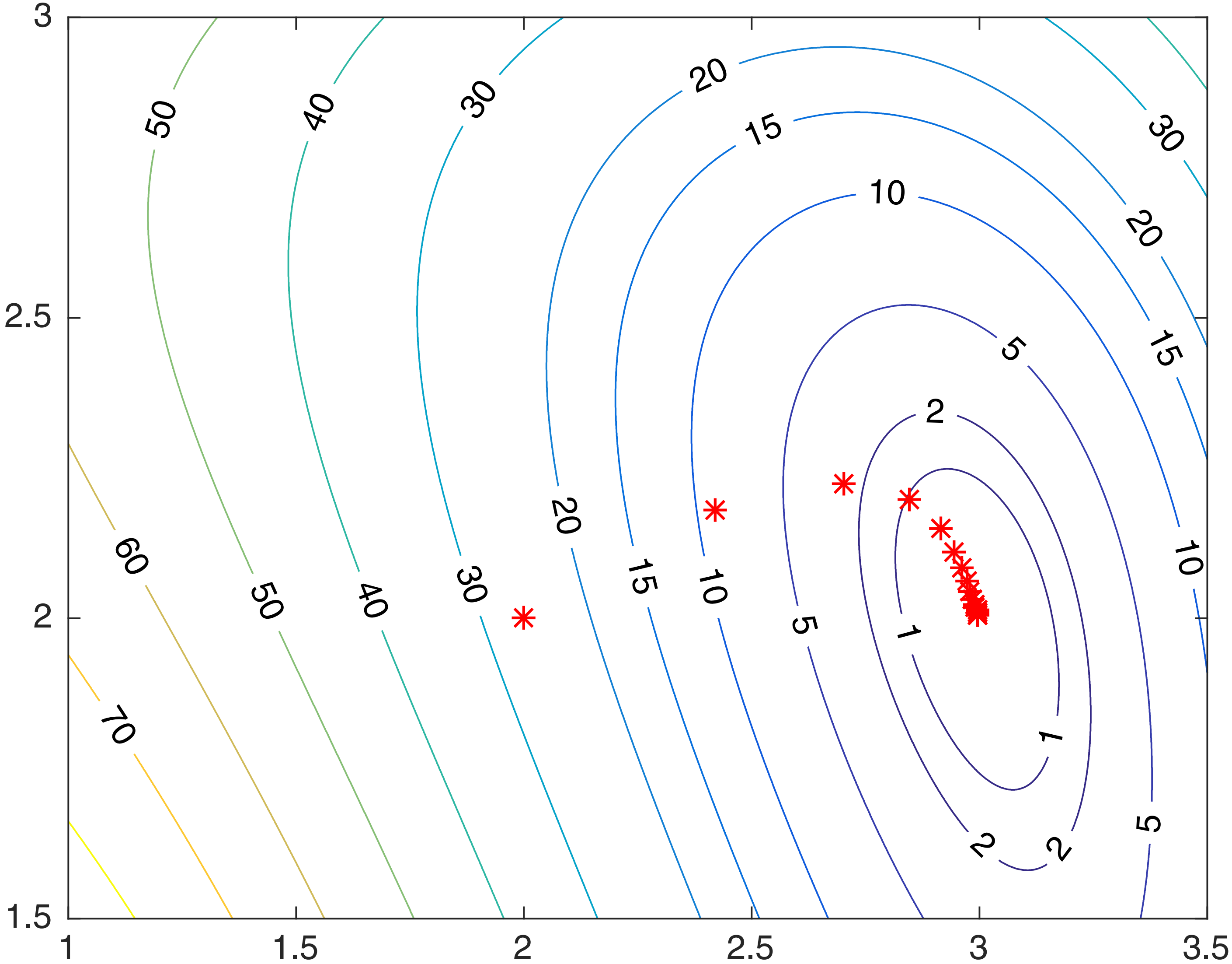
$$\underline{x}^{(k+1)}=\underline{x}^{(k)}-\alpha\nabla f\left(\underline{x}^{(k)}\right) \qquad \nabla f\left(\underline{x}\right)=\begin{bmatrix}2\left(x_1^{\,2}+x_2-11\right)\left(2x_1\right)+2\left(x_1+x_2^{\,2}-7\right)\\2\left(x_1^{\,2}+x_2-11\right)+2\left(x_1+x_2^{\,2}-7\right)\left(2x_2\right)\end{bmatrix}$$

$$\left.\begin{array}{l}\alpha=1\\ \underline{x}^{(0)}=\begin{bmatrix}2\\2\end{bmatrix}\end{array}\right\}\Rightarrow\underline{x}^{(1)}=\begin{bmatrix}44\\20\end{bmatrix}\qquad\Rightarrow\underline{x}^{(2)}=\begin{bmatrix}-343150\\-38830\end{bmatrix}$$

$$\left.\begin{array}{l}\alpha=10^{-1}\\ \underline{x}^{(0)}=\begin{bmatrix}2\\2\end{bmatrix}\end{array}\right\}\Rightarrow\underline{x}^{(1)}=\begin{bmatrix}6.2\\3.8\end{bmatrix}\qquad\Rightarrow\underline{x}^{(2)}=\begin{bmatrix}-74.003\\-23.181\end{bmatrix}$$

$$\left.\begin{array}{l}\alpha=10^{-2}\\ \underline{x}^{(0)}=\begin{bmatrix}2\\2\end{bmatrix}\end{array}\right\}\Rightarrow\underline{x}^{(1)}=\begin{bmatrix}2.42\\2.18\end{bmatrix}\qquad\Rightarrow\underline{x}^{(2)}=\begin{bmatrix}2.703\\2.224\end{bmatrix}$$

$$\text{Min. } f(\underline{x}) = \left(x_1^{\,2} + x_2 - 11\right)^2 + \left(x_1 + x_2^{\,2} - 7\right)^2$$



$$\alpha = 10^{-2}$$

$$\underline{x}^{(0)} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix}$$

$$\underline{x}^{(33)} = \begin{bmatrix} 2.999989 \\ 2.000025 \end{bmatrix}$$

$$tol = 10^{-5}$$

$$Min. \quad f(\underline{x}) = \left(x_1^{\,2} + x_2 - 11\right)^2 + \left(x_1 + x_2^{\,2} - 7\right)^2$$

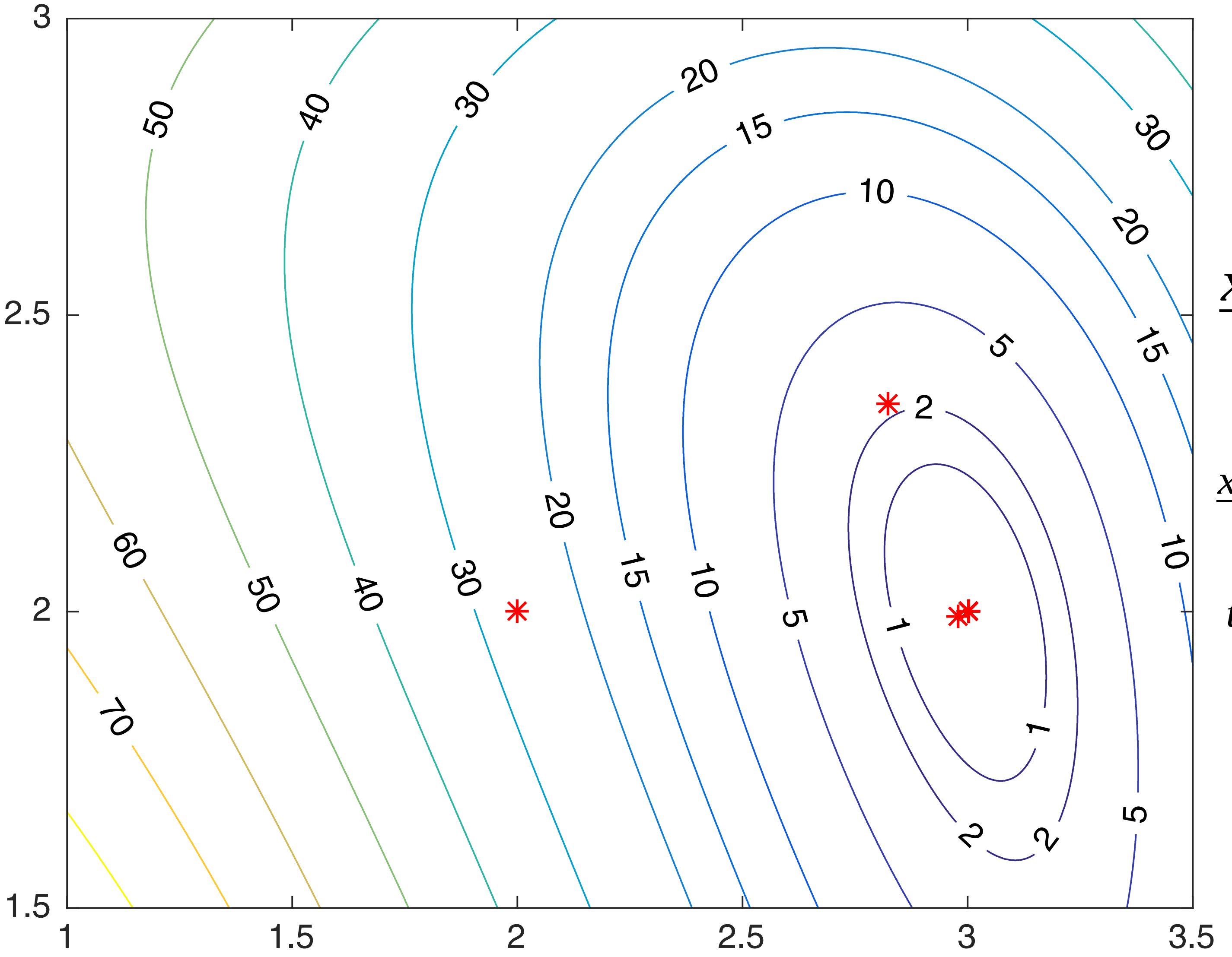
$$\nabla f(\underline{x}) = \begin{bmatrix} 2\left(x_1^{\,2} + x_2 - 11\right)\left(2x_1\right) + 2\left(x_1 + x_2^{\,2} - 7\right) \\ 2\left(x_1^{\,2} + x_2 - 11\right) + 2\left(x_1 + x_2^{\,2} - 7\right)\left(2x_2\right) \end{bmatrix}$$

$$\underline{x}^{(0)} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix}$$

$$\alpha^* = \min\ f\left(\underline{x}^{(0)} - \alpha \nabla f\left(\underline{x}^{(0)}\right)\right)$$

$$\underline{x}^{(1)} = \underline{x}^{(0)} - \alpha^* \nabla f\left(\underline{x}^{(0)}\right)$$

Método del descenso mas pronunciado



$$\underline{x}^{(0)} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix}$$

$$\underline{x}^{(13)} = \begin{bmatrix} 2.999999 \\ 2.000002 \end{bmatrix}$$

$$tol = 10^{-5}$$

Método del descenso mas pronunciado - Algoritmo

$$\underline{x}^{(0)} \in D \subseteq \mathbb{R}^n;\ \nabla f\left(\underline{x}\right);\ k=0$$

$$\underline{d} = -\nabla f\left(\underline{x}^{(k)}\right)$$

$$\alpha^* = Min.\ f\left(\underline{x}^{(k)} + \alpha\,\underline{d}\right)$$

$$\underline{x}^{(k+1)} = \underline{x}^{(k)} + \alpha^*\,\underline{d}$$

$$\left\|\alpha^*\,\underline{d}\right\| \le tol$$

si

$$\underline{x}^* = \underline{x}^{(k+1)}$$

no

$$k = k+1$$

Método de Newton

- El gradiente negativo apunta directamente hacia el mínimo solo cuando los contornos de $f(x)$ son circulares, por lo tanto el gradiente negativo no es una buena dirección global (en general) para funciones no lineales.
- El método del descenso mas pronunciado emplea aproximaciones lineales sucesivas al objetivo y requiere valores de la función objetivo y su gradiente en cada iteración.
- Un avance es considerar el uso de información de orden superior (derivadas segundas) en un esfuerzo por construir una estrategia de iteración más global.

Método de Newton

- A partir de la serie de Taylor, formamos una aproximación cuadrática a $f(x)$ eliminando los términos de orden 3 y superiores:

$$f\left(\underline{x},\underline{x}^{(k)}\right)= f\left(\underline{x}^{(k)}\right)+\left(\underline{x}-\underline{x}^{(k)}\right)^{T}\nabla f\left(\underline{x}^{(k)}\right)+\tfrac{1}{2}\left(\underline{x}-\underline{x}^{(k)}\right)^{T}\nabla^{2} f\left(\underline{x}^{(k)}\right)\left(\underline{x}-\underline{x}^{(k)}\right)$$

- Se propone una secuencia de iteración en la que el siguiente punto, es un punto en donde el gradiente de la aproximación es cero.

$$\nabla f\left(\underline{x},\underline{x}^{(k)}\right)=\nabla f\left(\underline{x}^{(k)}\right)+\nabla^{2} f\left(\underline{x}^{(k)}\right)\left(\underline{x}-\underline{x}^{(k)}\right)$$

$$\nabla f\left(\underline{x}^{(k)}\right)+\nabla^{2} f\left(\underline{x}^{(k)}\right)\left(\underline{x}^{(k+1)}-\underline{x}^{(k)}\right)=0$$

- Siguiendo la estrategia de resolución propuesta:

$$\underline{x}^{(k+1)}=\underline{x}^{(k)}+\alpha^{k}s\left(\underline{x}^{(k)}\right)\Rightarrow\left(\underline{x}^{(k+1)}-\underline{x}^{(k)}\right)=\alpha^{k}s\left(\underline{x}^{(k)}\right)$$

Método de Newton - I

- Reemplazando y asumimos α=1:

$$\nabla f\left(\underline{x}^{(k)}\right)+\nabla^2 f\left(\underline{x}^{(k)}\right)\alpha^k s\left(\underline{x}^{(k)}\right)=0 \Rightarrow s\left(\underline{x}^{(k)}\right)=-\left(\nabla^2 f\left(\underline{x}^{(k)}\right)\right)^{-1}\nabla f\left(\underline{x}^{(k)}\right)$$

- Por lo que finalmente:

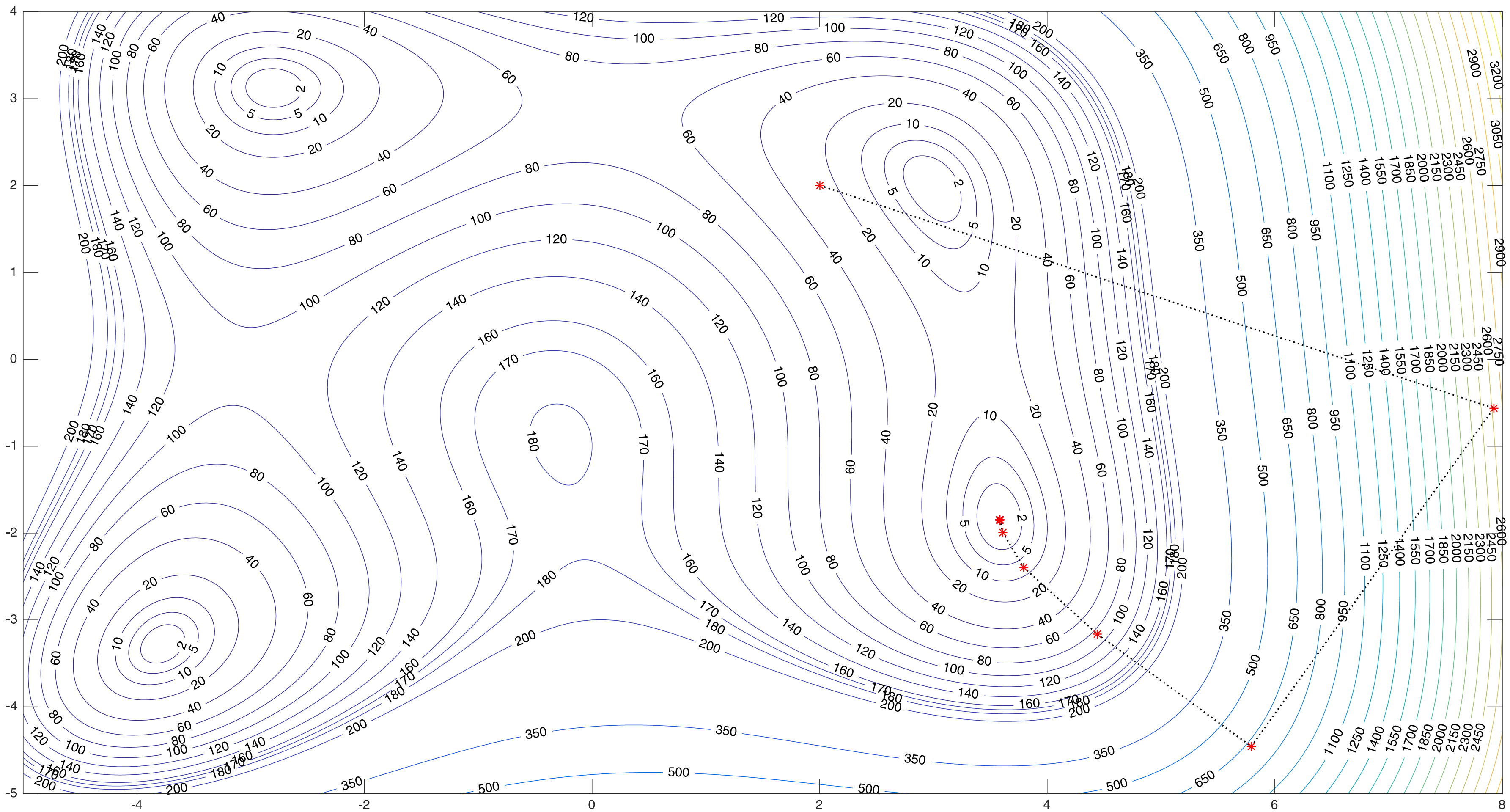
$$\underline{x}^{(k+1)}=\underline{x}^{(k)}-\left(\nabla^2 f\left(\underline{x}^{(k)}\right)\right)^{-1}\nabla f\left(\underline{x}^{(k)}\right)$$

Ejemplo: $Min.\quad f\left(\underline{x}\right)=\left(x_1{}^2+x_2-11\right)^2+\left(x_1+x_2{}^2-7\right)^2$

$$\nabla f\left(\underline{x}\right)=\begin{bmatrix} 2\left(x_1{}^2+x_2-11\right)2x_1+2\left(x_1+x_2{}^2-7\right) \\ 2\left(x_1{}^2+x_2-11\right)+2\left(x_1+x_2{}^2-7\right)2x_2 \end{bmatrix}$$

$$\nabla^2 f\left(\underline{x}\right)=\begin{bmatrix} 8x_1{}^2+4\left(x_1{}^2+x_2-11\right)+2 & 4x_1+4x_2 \\ 4x_1+4x_2 & 2+8x_2{}^2+4\left(x_1+x_2{}^2-7\right) \end{bmatrix}$$

Método de Newton - I - Ejemplo



$$\underline{x}^{(0)} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix} \Rightarrow \underline{x}^{(9)} = \begin{bmatrix} 3.584428 & -1.848126 \end{bmatrix}^T$$

$$tol = 10^{-5}$$

Método de Newton - II

- El método de Newton minimizará una función cuadrática (desde cualquier punto de partida) en exactamente un paso.
- La experiencia ha demostrado que el método de Newton puede ser poco confiable para funciones no cuadráticas.
- Es decir, el paso de Newton a menudo será grande cuando $x^{(0)}$ está lejos de x^*, y existe la posibilidad real de divergencia.
- Es posible modificar el método de una manera lógica y simple para asegurar el descenso agregando una búsqueda de línea como en el método del descenso mas pronunciado.

$$\alpha^* = \min f\left(\underline{x}^{(k)} - \alpha^k \left(\nabla^2 f\left(\underline{x}^{(k)}\right)\right)^{-1} \nabla f\left(\underline{x}^{(k)}\right)\right)$$

$$\underline{x}^{(k+1)} = \underline{x}^{(k)} - \alpha^* \left(\nabla^2 f\left(\underline{x}^{(k)}\right)\right)^{-1} \nabla f\left(\underline{x}^{(k)}\right)$$

Método de Newton - II

- El método de Newton II (o modificado) es confiable y eficiente cuando la primera y la segunda derivada se calculan de manera precisa y económica (desde el punto de vista computacional).
- La mayor dificultad es la necesidad de calcular y resolver en cada iteración el conjunto de ecuaciones lineales que involucra el termino de la matriz Hessiana.

Método de Newton - II

$$\underline{x}^{(0)} \in D \subseteq \mathbb{R}^n;\ \nabla f\left(\underline{x}\right);\ \nabla^2 f\left(\underline{x}^{(k)}\right);\ k=0$$

$$\underline{d} = -\left(\nabla^2 f\left(\underline{x}^{(k)}\right)\right)^{-1} \nabla f\left(\underline{x}^{(k)}\right)$$

$$\alpha^* = Min.\ f\left(\underline{x}^{(k)} + \alpha \underline{d}\right)$$

$$\underline{x}^{(k+1)} = \underline{x}^{(k)} + \alpha^* \underline{d}$$

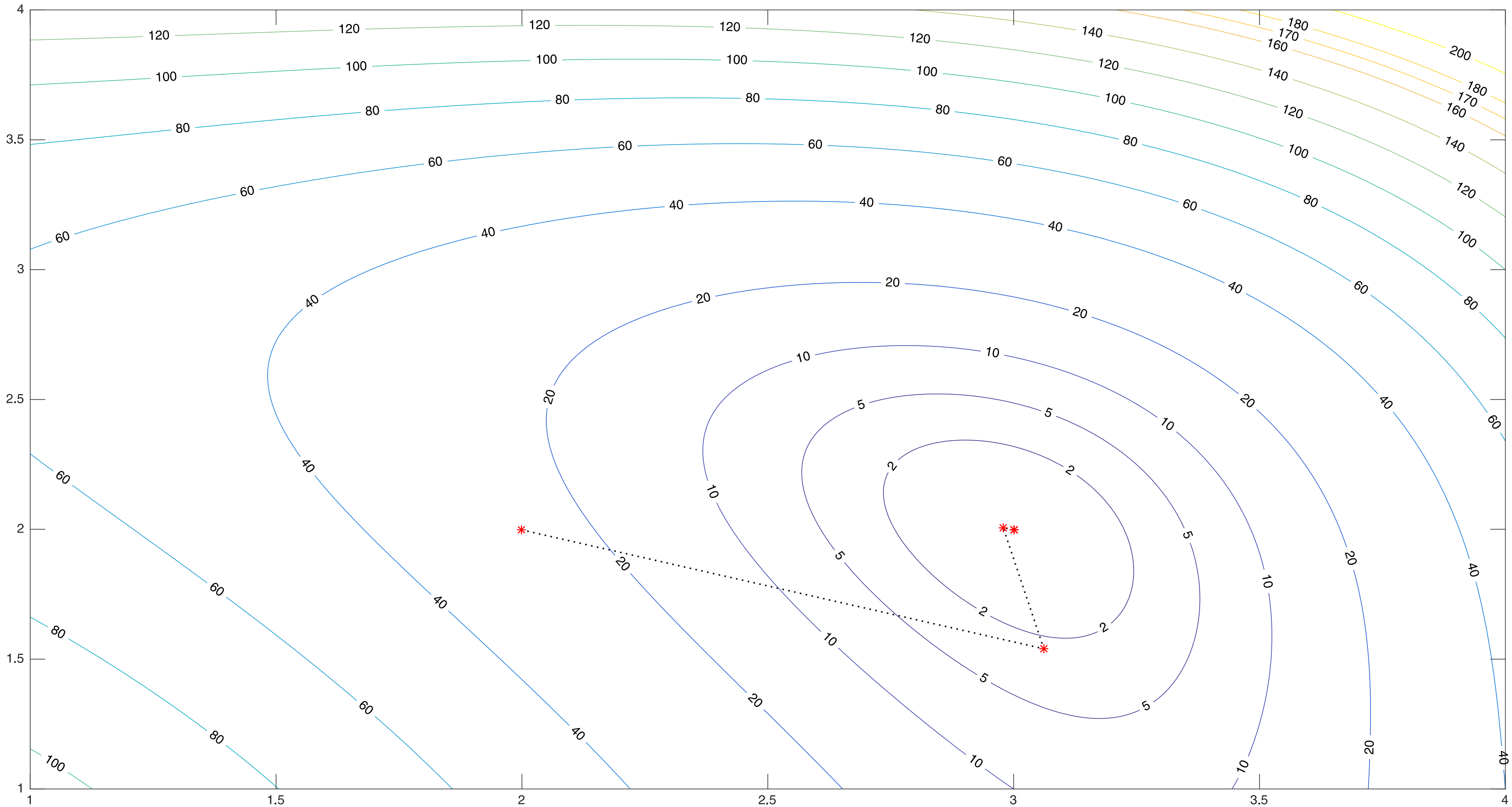
$$\left\|\alpha^* \underline{d}\right\| \le tol$$

no

$$k = k+1$$

si

$$\underline{x}^* = \underline{x}^{(k+1)}$$



$$\underline{x}^{(0)} = [2 \quad 2]^T \Rightarrow \underline{x}^{(5)} = [3 \quad 2]^T$$

$$tol = 10^{-5}$$

Matemática Superior Aplicada

Claves para implementar en Scilab

UTN

- Programar las “function” necesarias en las dimensiones correctas.
- Manejar las incógnitas como un único vector.
- Tener una buena implementación de los algoritmos de búsqueda unidimensional.
- Una buena herramienta es programar una “function” que realice la búsqueda de línea.

Volvemos a Optimización Unidimensional…

Método de interpolación parabólica sucesivas

Este método encuentra la parábola que pasa por tres puntos de la función y encuentra el extremo de la misma. Luego se eligen tres nuevos puntos y se repite el procedimiento hasta satisfacer la tolerancia.

¿Cómo elegir los tres valores de arranque?

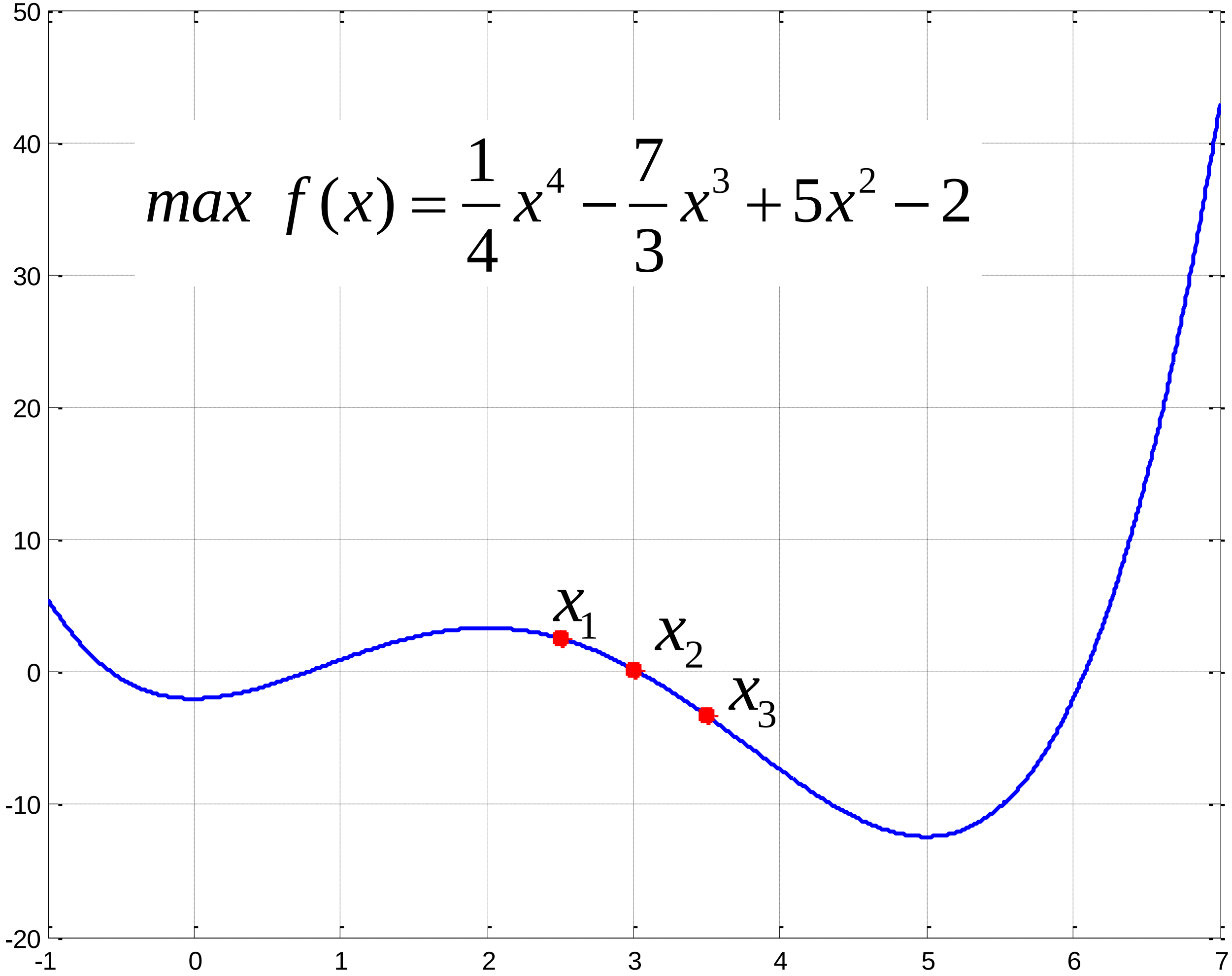
¿Cómo encontrar la parábola?

¿Cómo encontrar el extremo de la parábola?

¿Cómo elijo los nuevos puntos?

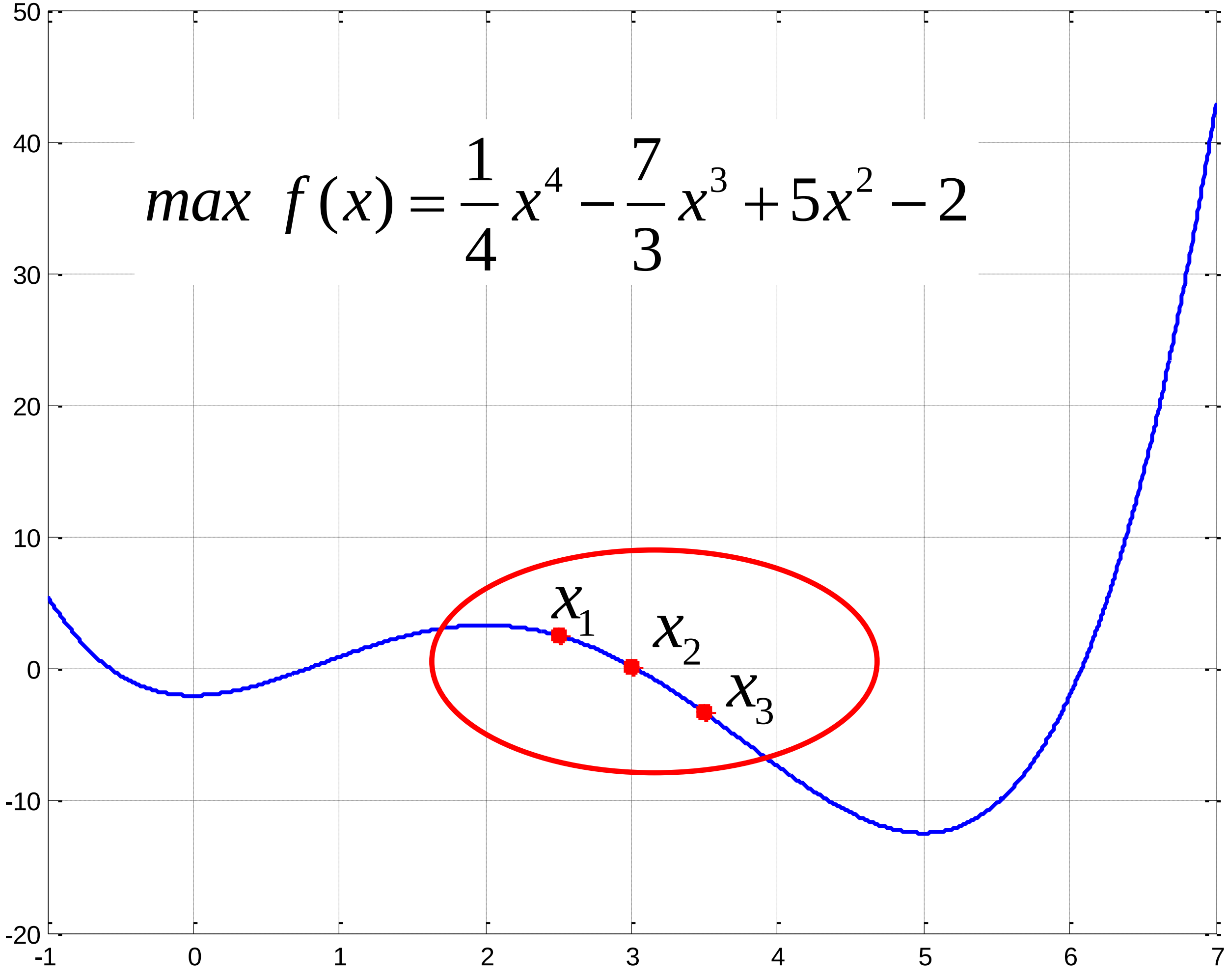
¿Cuál es el criterio de tolerancia?

¿Cómo elegir los tres valores de arranque?



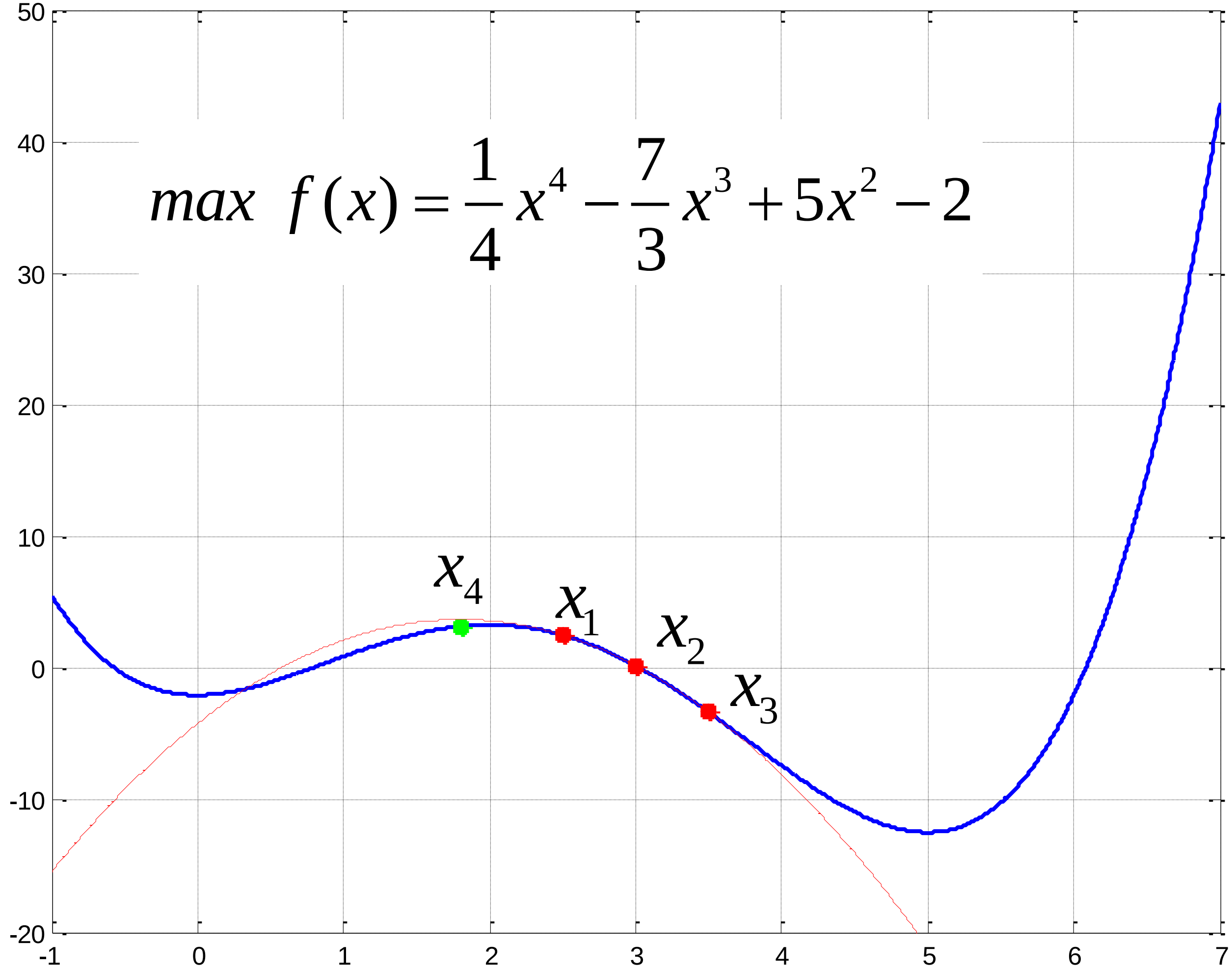
Solo necesitamos tres puntos del dominio

$$max \;\; f(x) = \frac{1}{4}x^4 - \frac{7}{3}x^3 + 5x^2 - 2$$



Encontramos la parábola que pasa por los tres puntos. El nuevo punto corresponde al ***<u>extremo</u>*** de la misma.

$$max\ \ f(x) = \frac{1}{4}x^4 - \frac{7}{3}x^3 + 5x^2 - 2$$



¿Cómo encontrar la parábola?

La parábola debe pasar por los siguientes puntos:

$$x_1 = 2.5 \quad f(x_1) = 2.55729 \qquad (2.5; 2.55729)$$
$$x_2 = 3 \quad f(x_2) = 0.25 \qquad (3; 0.25)$$
$$x_3 = 3.5 \quad f(x_3) = -3.27604 \qquad (3.5; -3.27604)$$

$y = ax^2 + bx + c$ → Los tres puntos deben cumplir esta ecuación

$$\begin{cases} a2.5^2 + b2.5 + c = 2.55729 \\ a3^2 + b3 + c = 0.25 \\ a3.5^2 + b3.5 + c = -3.27604 \end{cases} \Rightarrow \begin{bmatrix} 2.5^2 & 2.5 & 1 \\ 3^2 & 3 & 1 \\ 3.5^2 & 3.5 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.55729 \\ 0.25 \\ -3.27604 \end{bmatrix}$$

$Ax = b$ Sistema 3x3

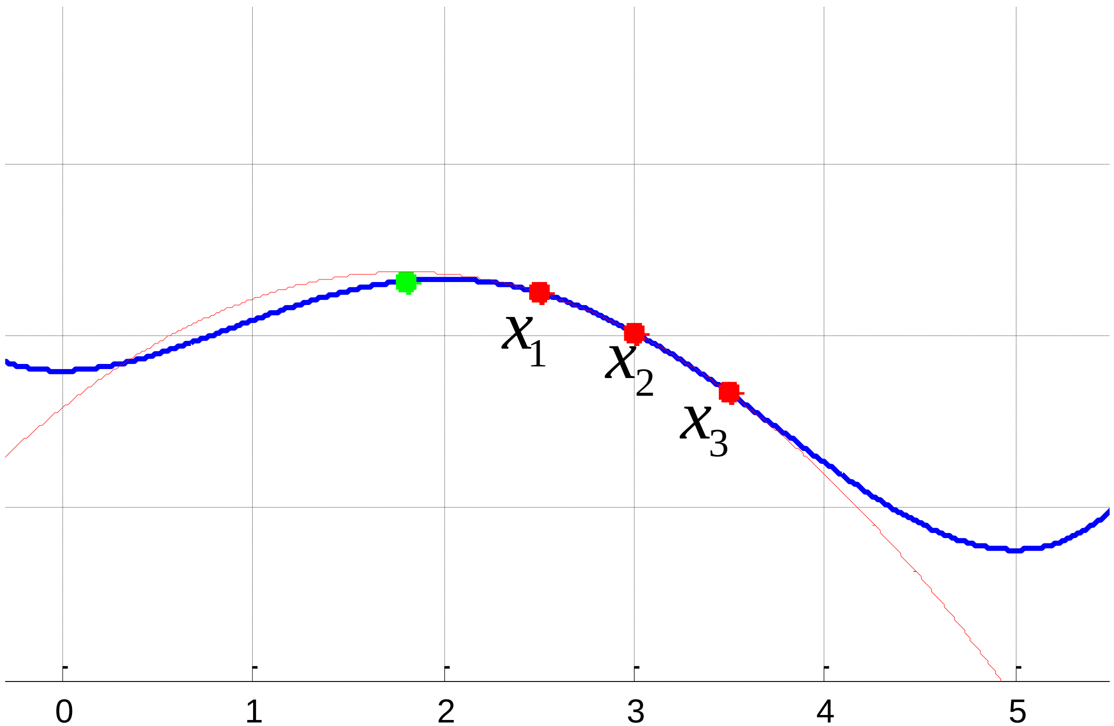
Método de interpolación parabólica sucesivas

$$\begin{bmatrix} 2.5^2 & 2.5 & 1 \\ 3^2 & 3 & 1 \\ 3.5^2 & 3.5 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.55729 \\ 0.25 \\ -3.27604 \end{bmatrix}$$

Resolvemos

$$a = -2.4375$$
$$b = 8.791667$$
$$c = -4.1875$$

$$y = -2.4375x^2 + 8.791667x - 4.1875$$

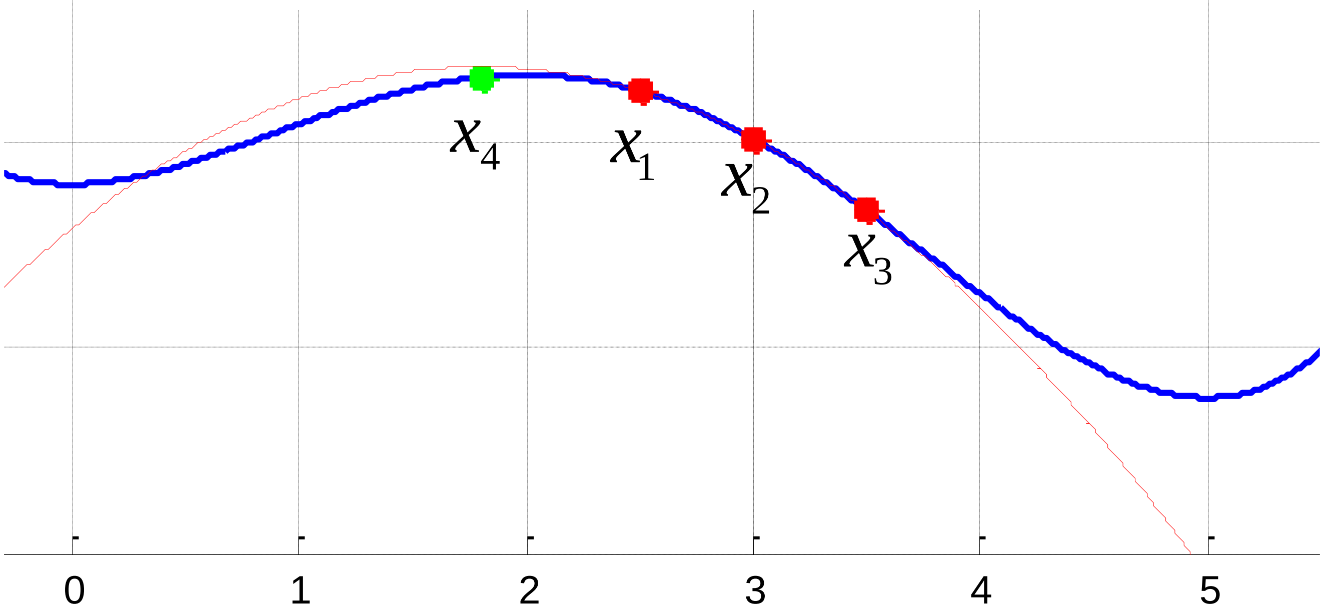


¿Cómo encontrar el extremo de la parábola?

$$y = ax^2 + bx + c \Rightarrow y' = 2ax + b \Rightarrow x = -\frac{b}{2a} \Rightarrow y' = 0$$

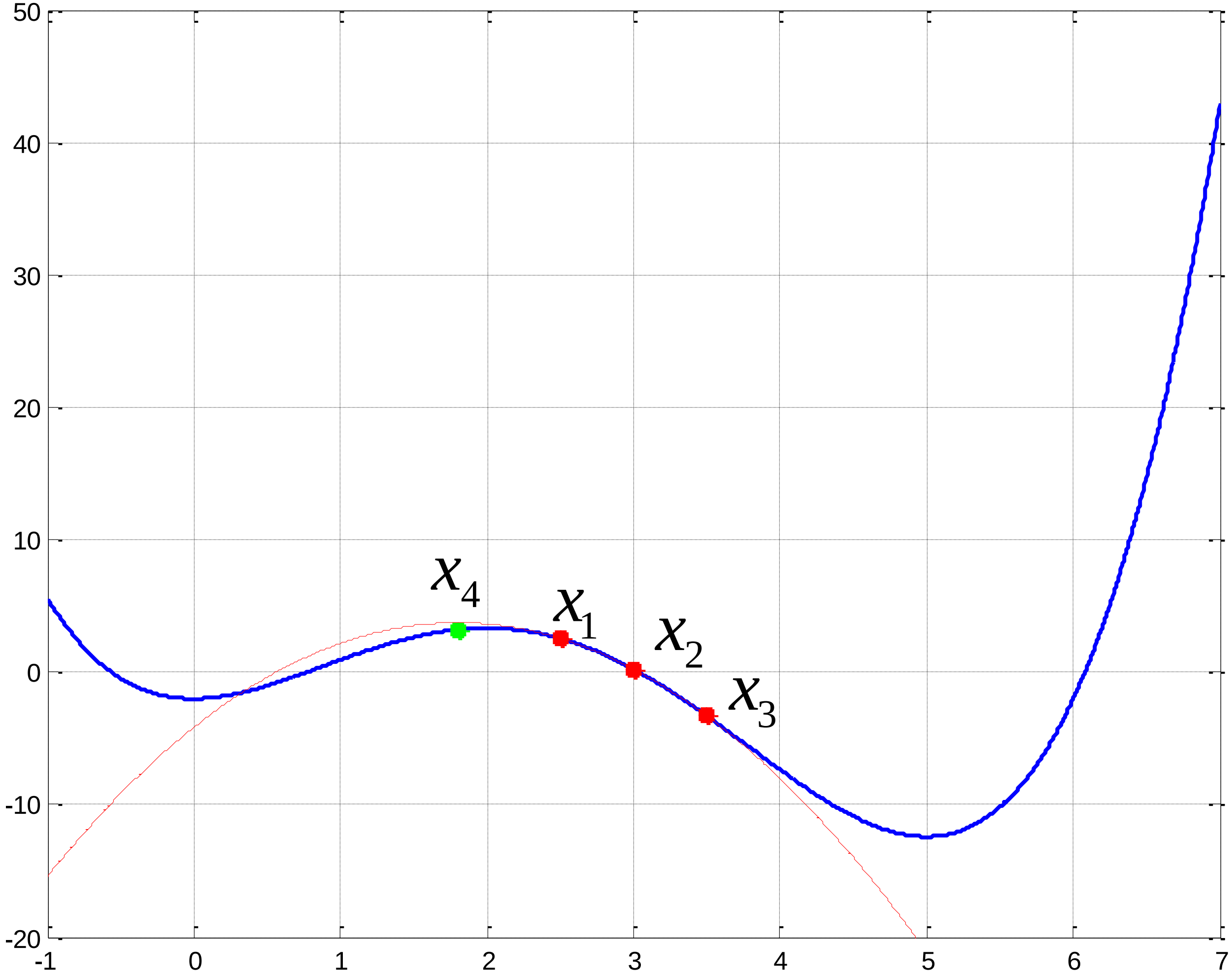
El nuevo punto corresponde al extremo de la parábola:

$$x_4 = -\frac{8.791667}{2(-2.4375)} = 1.803418$$



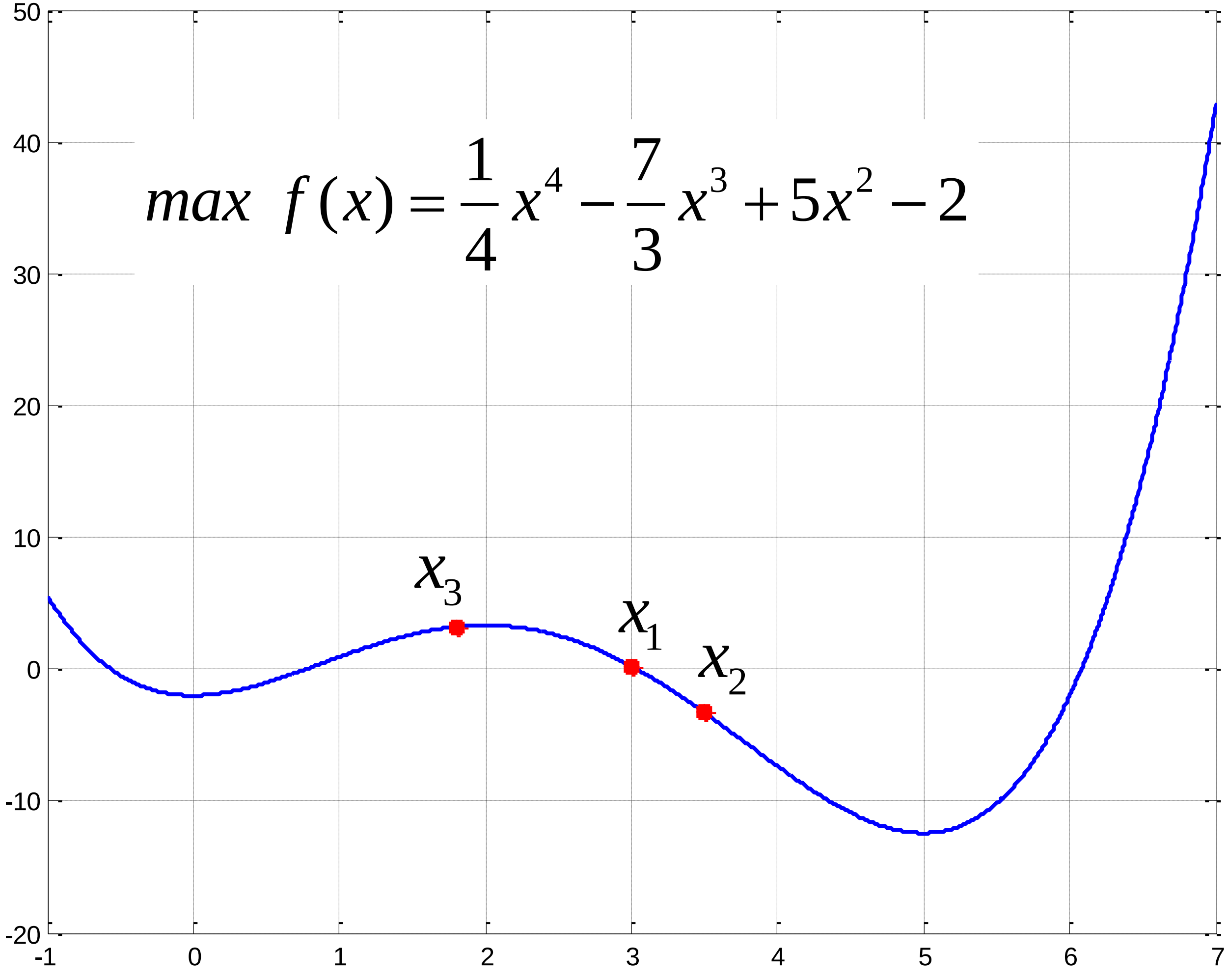
¿Cómo elijo los nuevos puntos?

Nos quedamos con los tres últimos

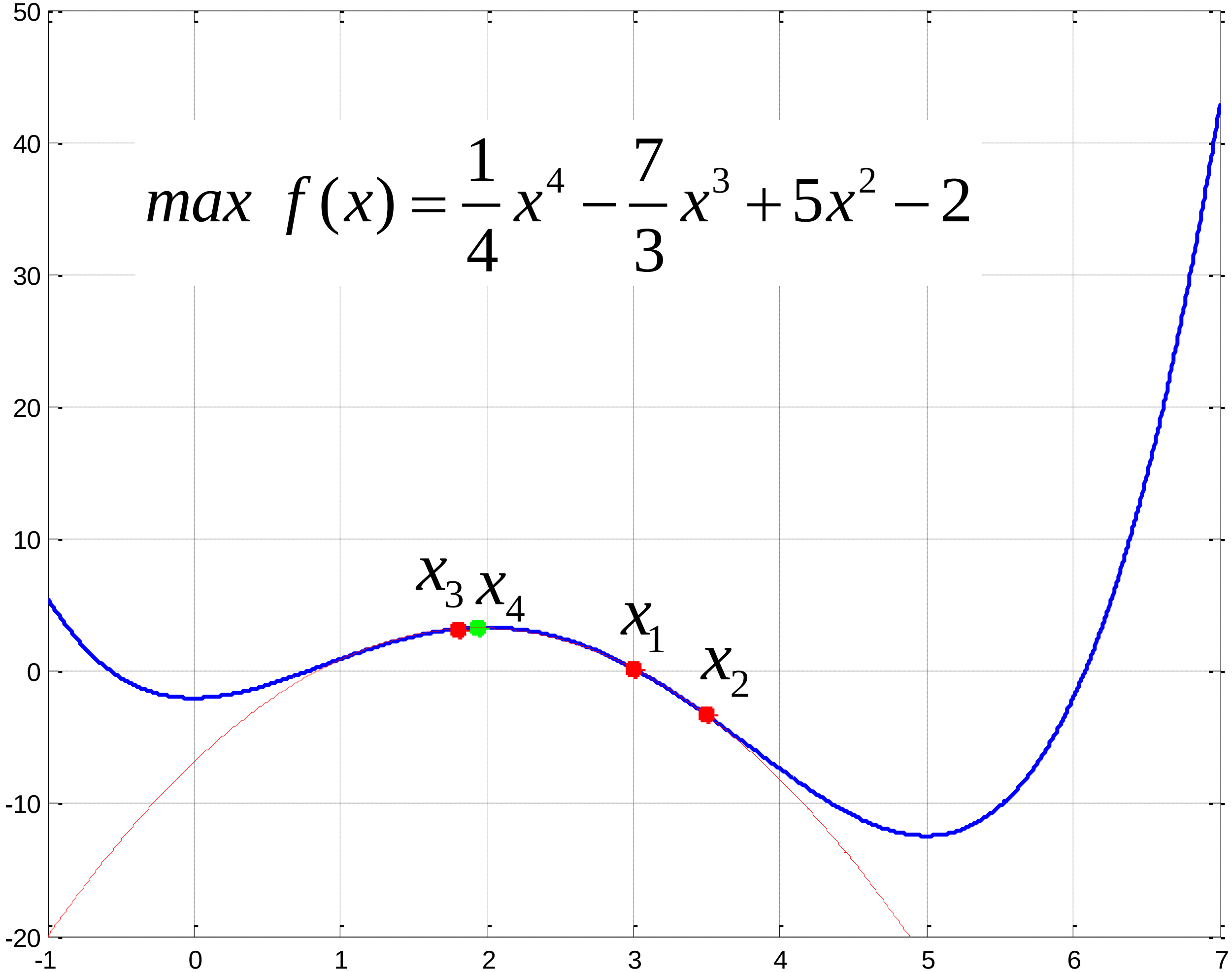


¿Cómo elijo los nuevos puntos?

Nos quedamos con los tres últimos

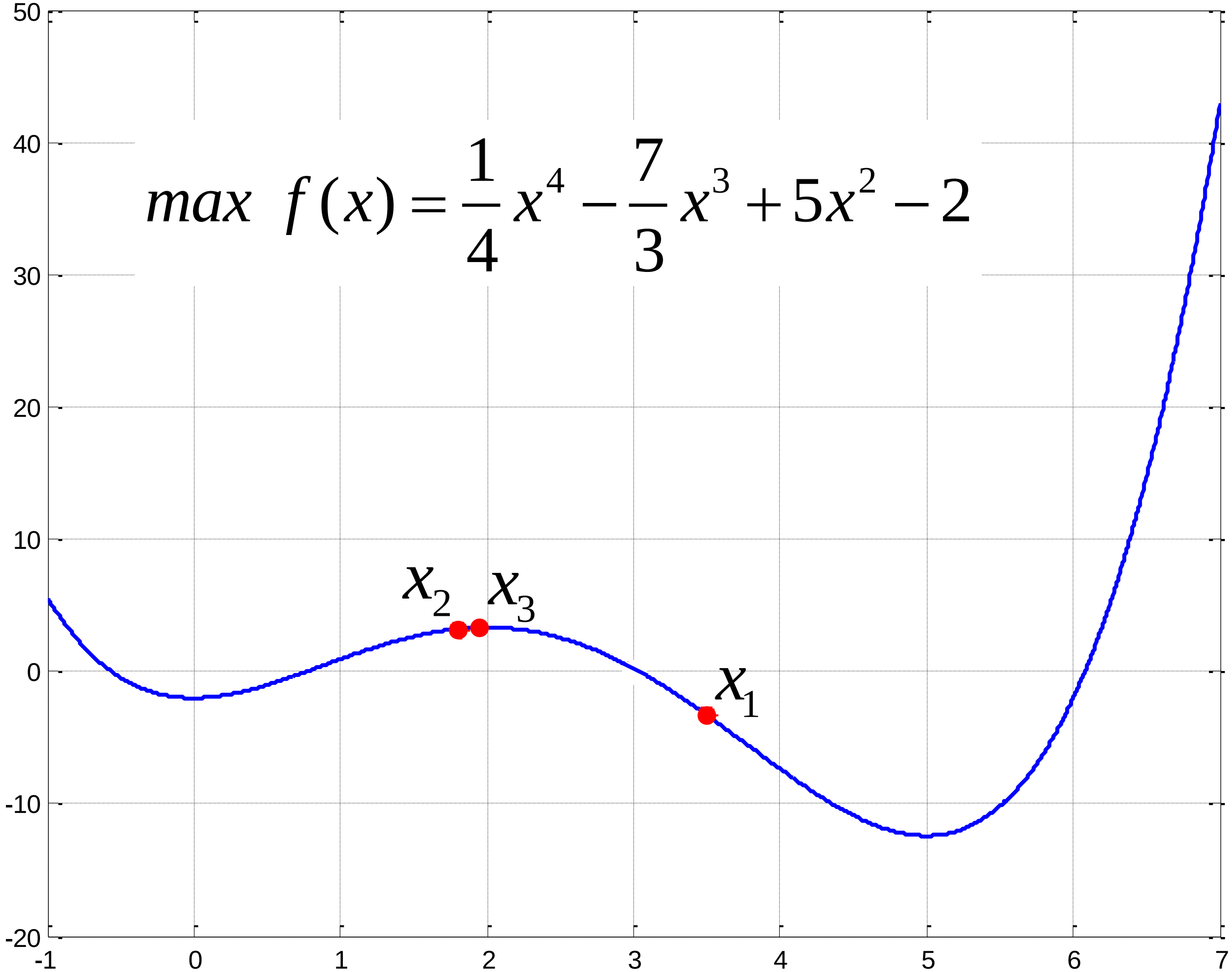


Continuamos... hasta satisfacer la tolerancia

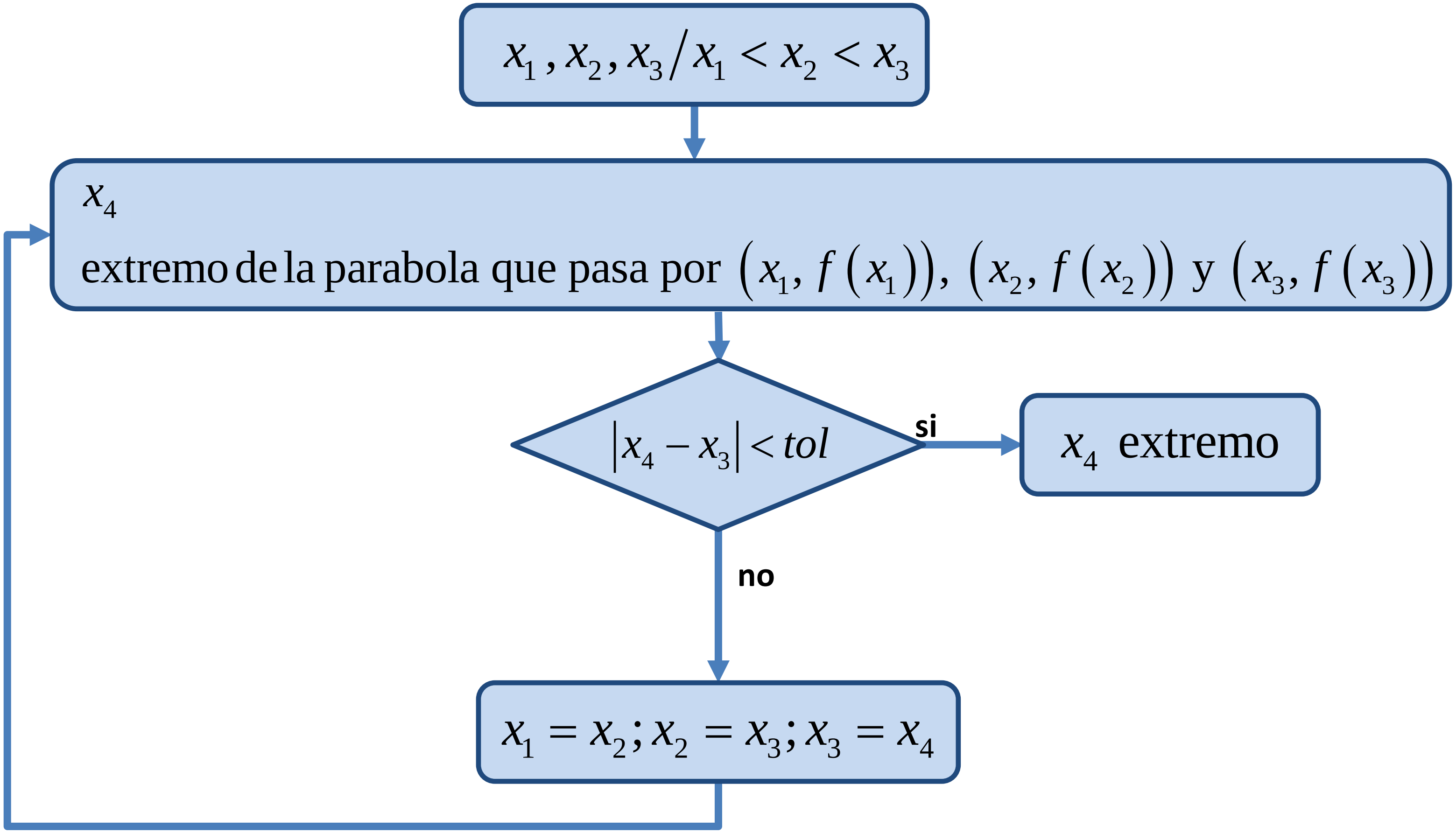


¿Cómo elijo los nuevos puntos?
Nos quedamos con los tres últimos

$$\max\ f(x)=\frac{1}{4}x^4-\frac{7}{3}x^3+5x^2-2$$



Método de interpolación parabólica sucesivas



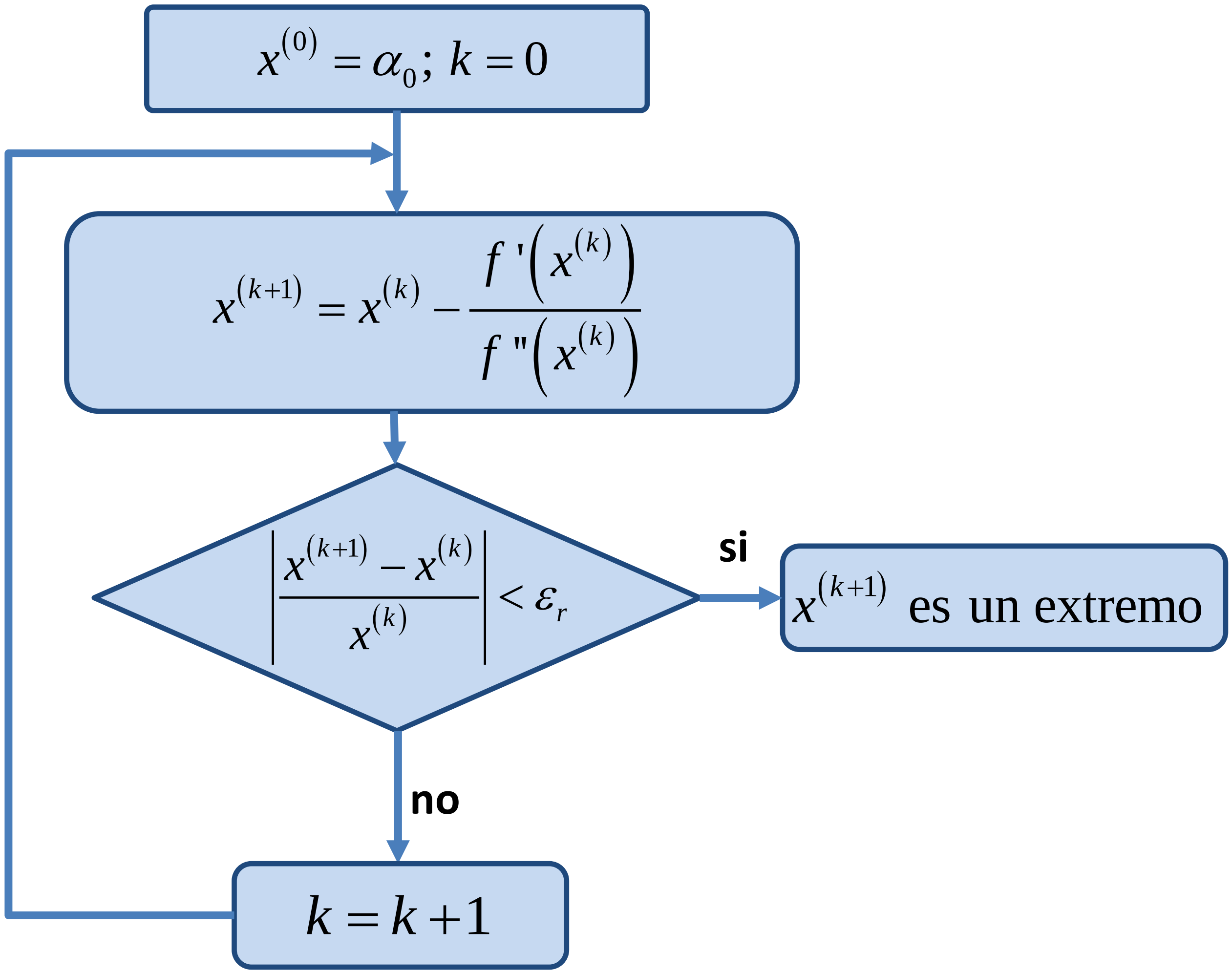
Búsqueda Lineal en Scilab con MIPS

```
function alfa=linesearchMIPS(fun, xk,d,a_0)
x1 = a_0*0.98;
x2 = a_0;
x3 = a_0*1.02;
for i= 1:100
        A=[x1^2 x1 1
           x2^2 x2 1
           x3^2 x3 1 ];
        b=[fun(xk + x1*d)
           fun(xk + x2*d)
           fun(xk + x3*d)];
        xx=A\b;
        x4=-xx(2)/(2*xx(1));
        if norm(x4-x3) < 1e-6
        alfa=x4;
        break
        end
        x1=x2; x2=x3; x3=x4;
end
if i==100
alfa=[];
end
endfunction
```

Matemática Superior Aplicada

Método de Newton

UTN



Búsqueda Lineal en Scilab con Newton

$$f\left(\underline{x}^{(k)}+\lambda\underline{d}\right)$$

$$\frac{df\left(\underline{x}^{(k)}+\lambda\underline{d}\right)}{d\lambda}=\frac{\partial f}{\partial x_1}\frac{\partial x_1}{\partial \lambda}+\frac{\partial f}{\partial x_2}\frac{\partial x_2}{\partial \lambda}+\ldots+\frac{\partial f}{\partial x_n}\frac{\partial x_n}{\partial \lambda}$$

$$\frac{df\left(\underline{x}^{(k)}+\lambda\underline{d}\right)}{d\lambda}=\frac{\partial f}{\partial x_1}d_1+\frac{\partial f}{\partial x_2}d_2+\ldots+\frac{\partial f}{\partial x_n}d_n$$

$$\frac{df\left(\underline{x}^{(k)}+\lambda\underline{d}\right)}{d\lambda}=\nabla f\left(\underline{x}^{(k)}+\lambda\underline{d}\right)^T\underline{d}$$

Búsqueda Lineal en Scilab con Newton

$$\frac{df\left(\underline{x}^{(k)}+\lambda\underline{d}\right)}{d\lambda}=\frac{\partial f}{\partial x_1}d_1+\frac{\partial f}{\partial x_2}d_2+\ldots+\frac{\partial f}{\partial x_n}d_n$$

$$\frac{d^2 f\left(\underline{x}^{(k)}+\lambda\underline{d}\right)}{d\lambda^2}=\frac{\partial^2 f}{\partial {x_1}^2}\frac{\partial x_1}{\partial\lambda}d_1+\ldots+\frac{\partial^2 f}{\partial {x_n}^2}\frac{\partial x_n}{\partial\lambda}d_n$$

$$\frac{d^2 f\left(\underline{x}^{(k)}+\lambda\underline{d}\right)}{d\lambda^2}=\frac{\partial^2 f}{\partial {x_1}^2}d_1d_1+\ldots+\frac{\partial^2 f}{\partial {x_n}^2}d_nd_n$$

$$\frac{d^2 f\left(\underline{x}^{(k)}+\lambda\underline{d}\right)}{d\lambda^2}=\sum_{i=1}^{n}\nabla^2_{ii}f\left(\underline{x}^{(k)}+\lambda\underline{d}\right)d_id_i$$

Búsqueda Lineal en Scilab con Newton

```
function alfa=linesearchMN(Fun, Grad, Hess, xk, d, a_0)
a=a_0;
for i=1:100
        fp = Grad(xk + a*d)'*d;
        fpp= (d.*diag(Hess(xk + a*d)))'*d;
        a=a-fp/fpp;
        if norm(fp/fpp) < 1e-5
        alfa=a;
        break
        end
end
if i==100
        alfa=[];
end
endfunction
```

Ejemplo

$$Min.\quad f\left(\underline{x}\right)=\left(x_1^{\,2}+x_2-11\right)^2+\left(x_1+x_2^{\,2}-7\right)^2$$

$$\nabla f\left(\underline{x}\right)=\begin{bmatrix}2\left(x_1^{\,2}+x_2-11\right)2x_1+2\left(x_1+x_2^{\,2}-7\right)\\2\left(x_1^{\,2}+x_2-11\right)+2\left(x_1+x_2^{\,2}-7\right)2x_2\end{bmatrix}$$

$$\nabla^2 f\left(\underline{x}\right)=\begin{bmatrix}8x_1^{\,2}+4\left(x_1^{\,2}+x_2-11\right)+2 & 4x_1+4x_2\\4x_1+4x_2 & 2+8x_2^{\,2}+4\left(x_1+x_2^{\,2}-7\right)\end{bmatrix}$$

Ejemplo

```
function f=fun(x)
   f=(x(1)^2 + x(2) - 11)^2 + (x(1)+x(2)^2-7)^2
endfunction

function Gf=gradf(x)
   Gf(1,1) = 2*(x(1)^2 + x(2) - 11)*(2*x(1)) + 2*(x(1)+x(2)^2-7)
   Gf(2,1) = 2*(x(1)^2 + x(2) - 11) + 2*(x(1)+x(2)^2-7)*(2*x(2))
endfunction

function Hf=hessf(x)
   Hf(1,1) = 2*(2*x(1))*(2*x(1)) + 2*(x(1)^2 + x(2) - 11)*(2) + 2
   Hf(1,2) = 2*(2*x(1)) + 2*(2*x(2))
   Hf(2,1) = 2*(2*x(1)) + 2*(2*x(2))
   Hf(2,2) = 2 + 2*(2*x(2))*(2*x(2)) + 2*(x(1)+x(2)^2-7)*(2)
endfunction
```

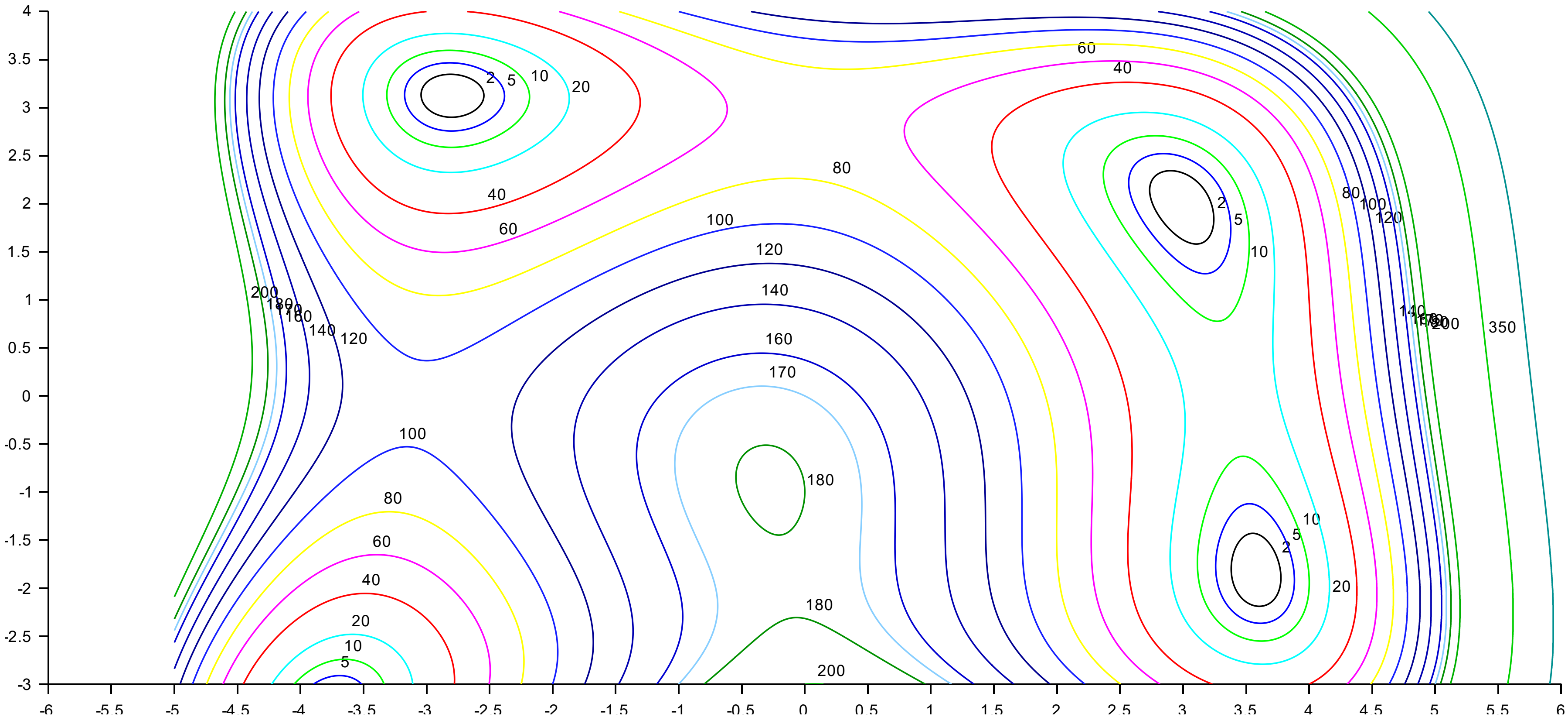
Matemática Superior Aplicada

Ejemplo

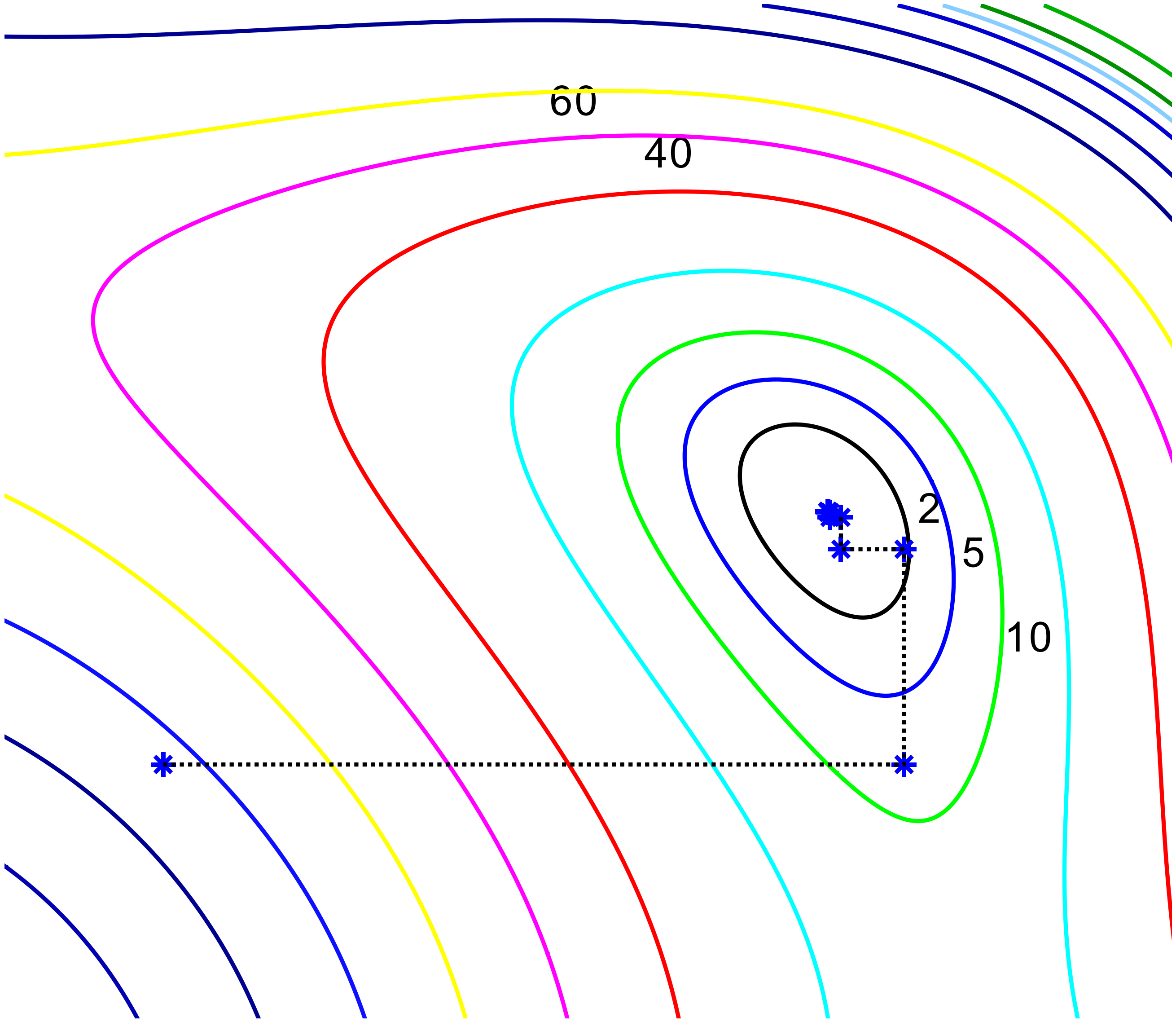
UTN

```
x1=linspace(-5,6,1000);
x2=linspace(-3,4,1000);
for i=1:length(x1)
   for j=1:length(x2)
      z(i,j)=fun([x1(i);x2(j)]);
   end
end
```

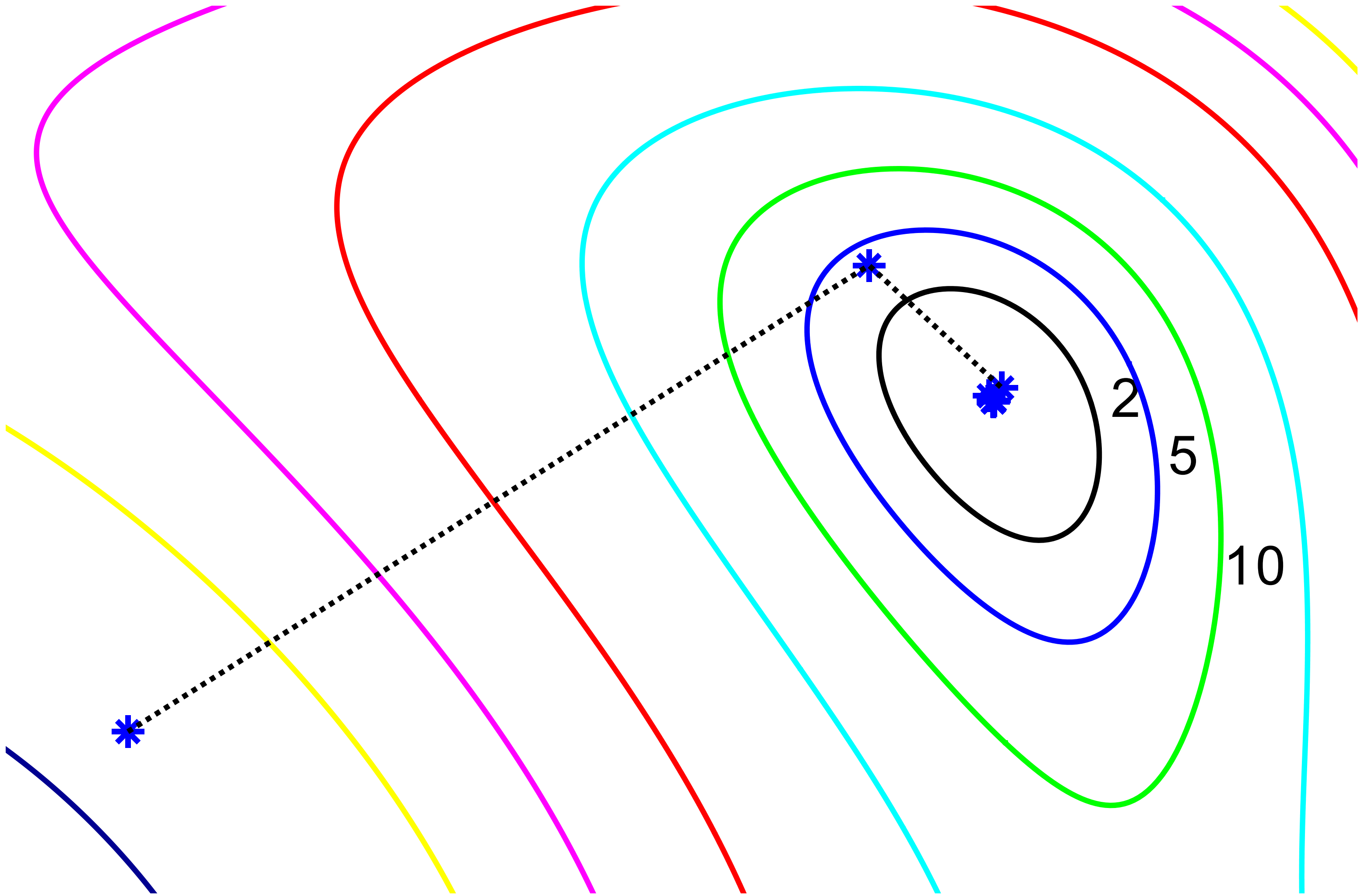
```
contour(x1,x2,z,[2 5 10 20:20:160 170 180 200 350 500])
```



Ejemplo – 1 variable a la vez



Ejemplo – Descenso mas pronunciado



Ejemplo – Newton