

ANÁLISIS NUMÉRICO II (Curso 2009-2010)

Tercer Curso de Ingeniería Técnica Informática

Tema Complementario: Optimización No Lineal

FUNCIONES CONVEXAS. CRITERIOS DE OPTIMALIDAD

Un problema de optimización suele constar de tres componentes:

- una función objetivo que se desea maximizar o minimizar,
- un conjunto de incógnitas o variables que afectan a la función objetivo y
- un conjunto de restricciones sobre los valores que pueden tomar las incógnitas.

El problema de optimización consiste en encontrar los valores de las variables que minimicen (o maximicen) la función objetivo cuando se satisfacen las restricciones. No obstante, hay algunas excepciones en cuanto a la función objetivo. En primer lugar, en algunos casos no se pretende optimizar nada sino sólo encontrar un conjunto de valores que satisfagan las restricciones del modelo; estos problemas se llaman de factibilidad. En segundo lugar, es frecuente encontrarse con problemas en los que hay varias funciones a optimizar simultáneamente y los valores que optimizan un objetivo no coinciden con los que optimizan otros. Este tipo de problema se encuadra en lo que se conoce como optimización multiobjetivo, que se encuentra fuera del alcance de esta asignatura.

En general, un problema de optimización no lineal tiene la forma

$$\begin{cases} \min_x f(x), & x \in \mathbb{R}^n, \\ c_j(x) \leq 0, & j \in D, \\ c_j(x) = 0, & j \in I. \end{cases}$$

Sin embargo, los métodos que se desarrollan posteriormente se refieren únicamente a optimización sin restricciones, es decir, al caso en el que los conjuntos D e I son vacíos.

En primer lugar, introduciremos conceptos y resultados elementales relativos a optimización. Para ello consideremos el problema de optimización:

$$\min_{x \in S \subset \mathbb{R}^n} f(x).$$

Un punto $x^* \in S$ se dice que es un mínimo global si $f(x) \geq f(x^*)$, $\forall x \in S$, en tanto que se dice que es un mínimo local si $\exists \epsilon > 0$, tal que $f(x) \geq f(x^*)$, $\forall x \in S$, $\|x - x^*\| < \epsilon$. De forma análoga se definen máximos locales y globales. La búsqueda de extremos globales constituye la rama llamada optimización global.

Una de las propiedades que garantizan que todo mínimo local sea global es la convexidad. En general se asume que el conjunto S donde se desea minimizar es convexo. Una función $f : S \rightarrow \mathbb{R}$, donde $S \subset \mathbb{R}^n$ es no vacío y convexo, se dice que es convexa sobre S si:

$$f(\lambda x + (1 - \lambda)y) \leq \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y),$$

para cada $x, y \in S$ y $\lambda \in (0, 1)$. Se dice que f es estrictamente convexa si la desigualdad es estricta $\forall x \neq y, \forall \lambda \in (0, 1)$, en cuyo caso un mínimo local es mínimo global único. Una función es cóncava si $-f$ es convexa. Obsérvese que, desde el punto de vista geométrico, la condición de convexidad para una función significa que el segmento de recta que une dos puntos de la gráfica está por encima de la propia gráfica. Las funciones convexas son tales que sus conjuntos de nivel, es decir, los conjuntos $\{x \in S : f(x) \leq a\}$, son convexas.

Las funciones convexas sobre conjuntos convexas tienen la propiedad de que los mínimos locales son también mínimos globales. Si además la función es estrictamente convexa, entonces tiene a lo sumo un mínimo global. En el siguiente teorema se resumen los resultados más relevantes.

Teorema.

1. Sea $f : S \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, donde S es un conjunto convexo no vacío.

- Si f es diferenciable en S , entonces f es convexa si y sólo si

$$f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)(y - x), \quad \forall x, y \in S.$$

- Si $f \in \mathcal{C}^2(S)$, entonces f es convexa si y sólo si la matriz hessiana de f , $H_f(x) = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}\right)$ es semidefinida positiva $\forall x \in S$.

2. Condiciones necesarias: Sea $f : S \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, donde S es abierto.

- Si f es diferenciable y x^* es un mínimo local, entonces $\nabla f(x^*) = 0$.
- Si $f \in \mathcal{C}^2(S)$ y x^* es un mínimo local, entonces $H_f(x^*)$ es semidefinida positiva.

3. Condición suficiente: Si $f \in \mathcal{C}^2(S)$ donde S es un conjunto abierto, y x^* cumple que $\nabla f(x^*) = 0$ y $H_f(x^*)$ es definida positiva, entonces x^* es un mínimo local.

El teorema anterior puede aplicarse al caso de máximos sin más que cambiar f por $-f$.

MÉTODOS DE DESCENSO DE MAYOR PENDIENTE Y DE NEWTON

En esta sección consideramos el problema no restringido: $\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$, y suponemos que tenemos garantizada la existencia de mínimo global. Por ejemplo, si f es continua y $f(x) \rightarrow +\infty$ para $\|x\| \rightarrow +\infty$ podemos garantizar dicha existencia: bastaría con restringirnos a un conjunto cerrado y acotado (por ejemplo, $\{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leq f(\tilde{x})\}$), y utilizar que toda función continua tiene un mínimo sobre un conjunto compacto.

Los algoritmos numéricos usualmente consisten en generar, a partir de un punto inicial $x^{(0)}$, una sucesión de puntos $x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(k)}, x^{(k+1)}, \dots$, tal que $f(x^{(k+1)}) < f(x^{(k)})$. En cada $x^{(k)}$, se elige una dirección $d = d_k$, y se determina un paso t_k de forma que $x^{(k+1)} = x^{(k)} + t_k d_k$.

El método del descenso más rápido. En este método, la dirección d_k que se elige es la de máximo decrecimiento de la función (que se produce, como ya se estudió en la asignatura de Cálculo, en la dirección opuesta al gradiente de la función). Los métodos de descenso son, por tanto, de la forma:

- Paso 0 (Inicialización). Se escogen el punto inicial $x^{(0)}$, la tolerancia $\epsilon > 0$, y (posiblemente) el número máximo de iteraciones. Se inicializa el contador de la sucesión: $k = 0$.
- Paso 1 (Test de parada). Calculamos $\nabla f(x^{(k)})$; si $\|\nabla f(x^{(k)})\| \leq \epsilon$, PARAR.
- Paso 2 (Determinación de la dirección). Elegimos la dirección de descenso más rápido:

$$d_k = -\nabla f(x^{(k)}).$$

- Paso 3 (Cálculo del paso: búsqueda lineal). Encontramos un valor de paso $t_k > 0$ apropiado, que satisfaga

$$f(x^{(k)} + t_k d_k) < f(x^{(k)}).$$

- Paso 4 (Iteración). Hacemos $x^{(k+1)} = x^{(k)} + t_k d_k$, incrementamos k y volvemos al Paso 1.

Si en el Paso 3 se determina t_k de forma que minimice la función $q(t) = f(x^{(k)} + t d_k)$, se habla del método del descenso más rápido con búsqueda lineal exacta. Sin embargo, este método, a pesar de gozar de propiedades teóricas de convergencia en determinadas condiciones, suele ser muy lento en la práctica. De hecho, descender por la dirección opuesta al gradiente impone pasos muy pequeños, con lo que la sucesión suele ser zigzagueante. El método se debería olvidar a no ser porque es la base de todos los métodos que se utilizan actualmente.

Búsqueda lineal. Supongamos que se ha determinado una *buena* dirección de búsqueda d y que queremos determinar el paso de avance. Consideremos, como hicimos anteriormente, la función $q : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $q(t) := f(x + t d)$ y supongamos que $q'(0) < 0$.

El problema que ahora tenemos es encontrar el valor de t en el que la función q alcanza el mínimo. Este proceso da lugar a lo que se conoce como búsqueda lineal exacta. No obstante, nuestro objetivo principal es minimizar f , y la minimización de q es un problema subsidiario: aplicar un algoritmo de minimización para q en cada paso puede ser muy costoso en relación al objetivo planteado.

Para evitar este problema se pueden utilizar algoritmos de búsqueda lineal imprecisa, en los que se establece un test con tres opciones: dado un valor de $t > 0$, el test decide si: (a) t es satisfactorio, (b) t es muy grande o, (c) t es muy pequeño.

Si el valor de t no es satisfactorio, se utiliza un método para calcular un nuevo valor de t (por ejemplo, mediante bisección, utilizando un ajuste cúbico de la función q , etc.).

Para el test se han desarrollado distintas reglas de búsqueda, siendo la más usada la denominada regla de Wolfe: en primer lugar se escogen dos coeficientes $0 < m_1 < \frac{1}{2} < m_2 < 1$ (valores comunes para m_1 y m_2 son 0.001 y 0.9, respectivamente) y:

- (a) t es satisfactorio si $q(t) \leq q(0) + m_1 t q'(0)$ y $q'(t) \geq m_2 q'(0)$.
- (b) t es muy grande si $q(t) > q(0) + m_1 t q'(0)$.
- (c) t es muy pequeño si $q(t) \leq q(0) + m_1 t q'(0)$ y $q'(t) < m_2 q'(0)$.

Las condiciones anteriores implican que la función f no decrezca demasiado (con lo que $x^{(k+1)}$ no estará muy lejos de $x^{(k)}$) y que la derivada se incremente bastante (con lo que $x^{(k+1)}$ no estará muy cerca de $x^{(k)}$).

El método de Newton. Si suponemos que la función a minimizar $f \in \mathcal{C}^2(\mathbb{R}^n)$, podemos sustituirla por su aproximación de segundo orden mediante el desarrollo de Taylor:

$$f(x^{(k)} + d) \approx f(x^{(k)}) + d^T \nabla f(x^{(k)}) + \frac{1}{2} d^T H_f(x^{(k)}) d.$$

En el método de Newton, se toma $x^{(k+1)} = x^{(k)} + d_k$, donde d_k se obtiene imponiendo que el gradiente de la aproximación de Taylor se anule, es decir:

$$\nabla f(x^{(k)}) + H_f(x^{(k)}) d = 0. \tag{1}$$

Es inmediato comprobar que, si la matriz hessiana H_f es invertible en $x^{(k)}$, entonces la dirección de búsqueda que utiliza el método de Newton es $d_k = -(H_f(x^{(k)}))^{-1} \nabla f(x^{(k)})$.

La ventaja del método de Newton es su convergencia cuadrática:

Teorema. Sea $f \in \mathcal{C}^3(\mathbb{R}^n)$ y supongamos que H_f es invertible cerca de la solución x^* . Entonces, el método de Newton converge cuadráticamente ($\|x^{(k+1)} - x^*\| \leq \beta \|x^{(k)} - x^*\|^2$, para algún $\beta > 0$) si se parte de un punto $x^{(0)}$ suficientemente cercano a x^* .

Obsérvese que la convergencia del método de Newton no es global, en general diverge. También requiere calcular el hessiano en cada iteración, lo cual es costoso. Una vez calculado el hessiano hay que resolver un sistema de ecuaciones para obtener $(H_f(x^{(k)}))^{-1} \nabla f(x^{(k)})$. El cálculo del hessiano requiere la evaluación de $O(n^2)$ derivadas parciales en el punto en cuestión, el gradiente la evaluación de n derivadas y la resolución de un sistema de n ecuaciones $O(n^3)$ operaciones. Finalmente, la sucesión generada por este método probablemente tenderá al punto estacionario más cercano; si éste es un máximo local, la propiedad de descenso $f(x^{(k+1)}) < f(x^{(k)})$ no está garantizada.

Mínimos cuadrados no lineales: Gauss-Newton. Muchos problemas de optimización consisten en ajustar una determinada función a un conjunto de datos: se pretende encontrar aquella función que minimice la suma de los cuadrados de los residuos (diferencia entre el valor teórico y el observado o experimental). En este apartado trataremos este tipo de problemas, el de minimizar funciones $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ de la forma:

$$f(x) = \frac{1}{2} (F_1^2(x) + \dots + F_m^2(x)).$$

Si definimos $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m : F(x) = (F_1(x), \dots, F_m(x))^T$, entonces

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_j} = \sum_{i=1}^m F_i(x) \frac{\partial F_i(x)}{\partial x_j}.$$

Así:

$$\nabla f(x) = \sum_{i=1}^m \nabla F_i(x) F_i(x) = J_F(x)^T F(x).$$

Derivando de nuevo, obtenemos

$$\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_k \partial x_j} = \sum_{i=1}^m \frac{\partial F_i(x)}{\partial x_k} \frac{\partial F_i(x)}{\partial x_j} + \sum_{i=1}^m F_i(x) \frac{\partial^2 F_i(x)}{\partial x_k \partial x_j},$$

o matricialmente:

$$H_f(x) = J_F(x)^T J_F(x) + \sum_{i=1}^m F_i(x) H_{F_i}(x),$$

donde $J_F(x) = \left(\frac{\partial F_i(x)}{\partial x_j} \right)_{ij}$ denota a la matriz jacobiana de la función F .

Si las funciones $F_i(x)$ son casi lineales, o bien la solución en mínimos cuadrados proporciona un buen ajuste y, por tanto, las $F_i(x)$ son pequeñas, entonces el segundo sumando se puede despreciar, con lo que nos resulta un método donde $H_f(x) \approx G(x) = J_F(x)^T J_F(x)$. De esta forma, la ecuación (1), en este caso particular, resulta:

$$J_F(x^{(k)})^T J_F(x^{(k)}) d_k = G(x^{(k)}) d_k = -J_F(x^{(k)})^T F(x^{(k)})$$

cuya dirección d_k es la dirección del método de Gauss-Newton en el paso k -ésimo. Observe que el método de Gauss-Newton está bien definido siempre que $G(x^{(k)})$ sea definida positiva.

El método de Gauss-Newton es aplicable a la resolución de sistemas de ecuaciones no lineales: cualquier solución del sistema

$$\begin{cases} F_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ F_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \dots \\ F_m(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{cases}$$

es un mínimo global de la función

$$\|F(x)\|^2 = \sum_{i=1}^m F_i^2(x).$$

MÉTODOS CUASI-NEWTON

Ya comentamos anteriormente que uno de los inconvenientes del método de Newton es el alto coste del cálculo del hessiano en cada iteración y la resolución del correspondiente sistema lineal (1), que proporciona la dirección del método de Newton. Para solventar este inconveniente, una posibilidad es sustituir la inversa del hessiano por una matriz a calcular en cada iteración:

$$W_k \approx (H_f(x))^{-1}.$$

Esto da lugar a una familia de métodos, denominados cuasi-Newton. En concreto, en estos métodos se escoge una matriz inicial definida positiva W_1 . En la etapa k -ésima, se calcula $d_k = -W_k \nabla f(x^{(k)})$, para posteriormente calcular la nueva matriz W_{k+1} recursivamente de la forma: $W_{k+1} = W_k + B_k$. Las correcciones B_k se escogen de forma que W_k sea simétrica definida positiva para todo k .

En lo que sigue denotaremos por $s_k := x^{(k+1)} - x^{(k)}$ e $y_k := \nabla f(x^{(k+1)}) - \nabla f(x^{(k)})$. La llamada ecuación cuasi-Newton: $W_{k+1} y_k = s_k$, se impone por analogía con la que verifica el valor medio de $H_f(x)$ entre $x^{(k)}$ y $x^{(k+1)}$, es decir,

$$H_f(\bar{x}) s_k = H_f(\bar{x}) (x^{(k+1)} - x^{(k)}) = \nabla f(x^{(k+1)}) - \nabla f(x^{(k)}) = y_k,$$

forzando así a que W_{k+1} actúe como $(H_f(\bar{x}))^{-1}$ en el subespacio de dimensión 1 determinado por y_k .

El primer método cuasi-Newton fue el llamado de Davidon-Fletcher-Powell (**DFP**) que tiene la forma:

$$W_{k+1} = W_k + \frac{s_k s_k^T}{y_k^T s_k} - \frac{W_k y_k y_k^T W_k}{y_k^T W_k y_k}.$$

Hoy en día sin embargo, es más usado el método encontrado independientemente por Broyden, Fletcher, Goldfarb y Shanno (**BFGS**):

$$W_{k+1} = W_k - \frac{s_k y_k^T W_k + W_k y_k s_k^T}{y_k^T s_k} + \left[1 + \frac{y_k^T W_k y_k}{y_k^T s_k} \right] \frac{s_k s_k^T}{y_k^T s_k}.$$

CUESTIONES

Ejercicio 1. Analizar la convexidad de la función

$$f(x, y) = 2(y - x^2)^2 - 10$$

sobre los siguientes conjuntos

1. $S_1 = [-1, 1] \times [-1, 1]$,
2. un subconjunto convexo de $S_2 = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : x^2 \geq y\}$.

Ejercicio 2. Calcule analíticamente los puntos críticos (donde el gradiente se anula) de la función:

$$f(x, y) = x^4 - 2x^2 + y^2$$

y clasifique el comportamiento de f en ellos mediante el hessiano.

Ejercicio 3. Estimar el mínimo en \mathbb{R}^2 de la función cuadrática

$$f(x, y) = x^2 - xy + y^2 - 3y$$

mediante un paso del método de descenso de mayor pendiente con búsqueda lineal exacta y partiendo del origen. Determinar el error cometido en norma euclídea.

Ejercicio 4. Obtener el punto resultante de aplicar búsqueda lineal, partiendo del punto $(0, 0)$ y con dirección $(1, 2)$, a la función

$$f(x, y) = 5x^2 + 5y^2 + -xy - 11x + 11y + 11.$$

¿Es dicho punto mínimo local de f en \mathbb{R}^2 ?

Ejercicio 5. Considere la función de dos variables

$$f(x, y) = (x - 2)^4 + (x - 2y)^2.$$

Estimar el mínimo de f mediante un paso del método de Newton partiendo del punto $(0, 3)$. Calcular el error cometido en norma euclídea.

Ejercicio 6. Realizar búsqueda lineal exacta para la función $f(x, y) = xy - 2x$, partiendo de $(0, 0)$ y siguiendo la bisectriz de los cuatro cuadrantes.

Ejercicio 7. Estimar el mínimo de la función $f(x, y) = x^2 + y^2$, mediante un paso del método de Newton, partiendo de $(1, 3)$.

Ejercicio 8. Estimar una solución del sistema

$$\begin{cases} x^2 + y^2 = 4 \\ xy = 2 \end{cases}$$

mediante un paso del método de Gauss-Newton sin búsqueda lineal y partiendo de $(1, 0)$.

PROBLEMAS

Problema 1. Considere la función cuadrática $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx - b^T x$, siendo

$$Q = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 3 & 6 & 10 \\ 1 & 4 & 10 & 20 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 18 \\ 189 \\ 114 \\ 151 \end{bmatrix}.$$

1. Demuestre analíticamente que el problema de minimizar la función f en todo \mathbb{R}^4 tiene solución única y obtenga dicho mínimo mediante la resolución del correspondiente sistema de ecuaciones lineales.
2. Compruebe analíticamente que para funciones cuadráticas definidas positivas

$$x \in \mathbb{R}^n \rightarrow \frac{1}{2}x^T Qx - b^T x \in \mathbb{R},$$

la fórmula para determinar la búsqueda lineal exacta, partiendo de un vector w y usando como dirección (se supone que no nula) $d = b - Qw$, es

$$t = \frac{d^T d}{d^T Q d}.$$

3. Diseñe una función en MATLAB que implemente el método de descenso con búsqueda lineal exacta y tal que las iteraciones se paren cuando la tolerancia tomada como la norma euclídea de la diferencia de dos puntos consecutivos sea menor que un cierto valor. Los argumentos de entrada deben ser la matriz Q , el vector b , el vector inicial $x^{(0)}$ y la tolerancia.

- Utilizando la función anterior, partiendo del origen y con tolerancia 10^{-3} , 10^{-4} estime el mínimo global de f . ¿Cuántas iteraciones fueron necesarias en ambos casos? ¿era previsible dicho número?
- En la expresión de f , cambie la matriz Q por la matriz $Q - 0.5I$, y repita el apartado anterior para la nueva función con las mismas especificaciones que antes. ¿Por qué el resultado ahora no es razonable?

Problema 2. Considere la función de Rosenbrock

$$f(x, y) = 100(x^2 - y)^2 + (1 - x)^2.$$

- Determine analíticamente los mínimos de la función anterior. ¿Es f convexa en todo el plano?
- Utilizando las ordenes `meshgrid` y `contour`, obtenga un esquema de las curvas de nivel de la función anterior en el rectángulo $[-2, 2] \times [-1, 3]$. ¿Por qué cree que se considera a esta función un buen test para medir la eficiencia de algoritmos de optimización sin restricciones?
- Partiendo del punto $(-1.9, 2)$, aplique la orden `fminsearch` para estimar el mínimo de f , primero sin imponer vector de opciones y después exigiendo que la terminación por tolerancia en el vector sea 10^{-8} . Repita el proceso pero partiendo ahora del punto $(1.9, 2)$.
- Diseñar sendas funciones de MATLAB para evaluar el gradiente y la matriz hessiana en cada punto, aplicando la fórmula de la diferencia central para las derivadas primera y segunda, respectivamente.
- Diseñe una función que implemente el método de Newton en la que los argumentos de entrada sean la función, el punto inicial y la tolerancia y los de salida, la aproximación al mínimo y el número de iteraciones. Aplique dicha función al cálculo del mínimo de la función de Rosenbrock.