Guía de Ejercicios No. 6

1) La función de Rosenbrock representa un desafío para muchos algoritmos de optimización, debido a que presenta un mínimo dentro de un valle muy curvado relativamente llano. Encuentre un mínimo de la función de Rosenbrock:

$$f(\mathbf{x}) = (1 - x_1)^2 + 100 (x_2 - x_1^2)^2$$
, con $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$.

Utilizar la función minimize de Scipy:

- a) Leer el tutorial de minimize en https://docs.scipy.org/doc/scipy-1.13.0/tutorial.
- b) Seleccionar el método BFGS.
- c) Fijar el máximo número de iteraciones en 200, y la tolerancia de la función objetivo, ftol, en 10⁻⁸. ¿Cómo se define esta tolerancia?.
- d) Utilizar el punto inicial $\mathbf{x}_0 = \begin{bmatrix} 3 & 2,5 \end{bmatrix}^\mathsf{T}$.
- e) Resolver (i) suministrando, y (ii) sin suministrar el gradiente de la función objetivo al resolvedor. En cada caso, contar el número de iteraciones y el número de evaluaciones de la función objetivo.
- f) Verificar que el algoritmo terminó correctamente.
- g) Presentar la solución óptima obtenida y el valor óptimo de la función objetivo.
- h) Presentar el script se Python utilizado, con explicaciones comentadas de cada paso.
- i) Utilizando matplotlib, y la ayuda de ChatGPT, crear un gráfico de contorno de la función de Rosenbrock en el dominio $x_1 \in [-2,2], x_2 \in [-1,3]$ (emplear una grilla fina de 400×400). Incluir los siguientes niveles de contorno: [0,1,1,10,100,500,1000,2000,3000,4000]. Incluir en el gráfico el punto óptimo obtenido como un punto azul.
- 2) Considerar el siguiente problema de optimización:

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2} f(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2 + \log(x_1 x_2)$$
s.t. $1 - x_1 x_2 \le 0$
 $0.1 \le x_1, x_2 \le 10$.

Utilizar la función minimize de Scipy:

- a) Leer el tutorial de minimize en https://docs.scipy.org/doc/scipy-1.13.0/tutorial.
- b) Seleccionar el método SLSQP. El método SLSQP implementa un método SQP mejorado, con actualización de la matriz hesiana de la función Lagrangiana en cada iteración empleando la fórmula BFGS, y búsqueda lineal usando una función de mérito.
- c) Fijar la tolerancia de terminación del punto solución, **xtol**, la tolerancia de la función objetivo, **ftol**, y la tolerancia de las restricciones, **tol**, en 10⁻⁷. ¿Cómo se define cada una de estas tolerancias?
- d) Utilizar el punto inicial $\mathbf{x}_0 = \begin{bmatrix} 2 & 1 \end{bmatrix}^\mathsf{T}$.
- e) Proveer a minimize las expresiones analíticas de los gradientes de la función objetivo y las restricciones.
- f) Verificar que el algoritmo terminó correctamente.
- g) Presentar la solución óptima obtenida y el valor óptimo de la función objetivo.
- h) ¿El algoritmo SQP convergió a la solución óptima sin quitar la región factible? ¿Cómo lo podría verificar?
- i) Presentar el script de Python utilizado, con explicaciones comentadas de cada paso.
- 3) Resolver el problema de optimización del ejercicio 2, empleando el solver IPOPT disponible en Pyomo. Las instrucciones de instalación de Pyomo y IPOPT se pueden encontrar en el documento Pyomo-Workshop-December-2023.pdf. IPOPT implementa un método de punto interior, basado en el uso de funciones barrera.
 - a) Crear un modelo concreto en Pyomo. Definir las variables, la función objetivo, y las restricciones.
 - b) Fijar la tolerancia de terminación del punto solución y la tolerancia de la función objetivo en 10^{-7} .
 - c) Resolver utilizando el solver IPOPT, tomando como punto inicial $\mathbf{x}_0 = \begin{bmatrix} 2 & 1 \end{bmatrix}^\mathsf{T}$.
 - d) Solicitar que IPOPT devuelva el valor de los multiplicadores de Lagrange en la solución óptima.
 - e) Resolver nuevamente, tomando como punto inicial un punto infactible. Comentar los resultados.
 - f) Presentar el script de Python utilizado, con explicaciones comentadas de cada paso.
- 4) Considerar el siguiente problema NLP:

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3} f(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_1 x_2 + 2x_2^2 - 6x 1 - 2x_2 - 12x_3$$
s.t. $g_1(\mathbf{x}) = 2x_1^2 + x_2^2 - 15 \le 0$
 $g_2(\mathbf{x}) = -x_1 + 2x_2 + x_3 - 3 \le 0$
 $x_1, x_2, x_3 > 0$.

- a) Hallar una solución óptima \mathbf{x}^* del problema utilizando un resolvedor adecuado:
 - Fijar las tolerancias de terminación del punto solución y de la función objetivo, y la tolerancia de las restricciones en 10^{-7} .
 - Utilizar el punto inicial $\mathbf{x}_0 = [1, 1, 1]^\mathsf{T}$.
 - Resolver el NLP aproximando primero los gradientes de la función objetivo y las restricciones mediante diferencias finitas. Luego resolver el problema suministrando al resolvedor las expresiones analíticas del gradiente de la función objetivo y de las restricciones.
 - Verificar que el algoritmo terminó correctamente.
 - Presentar el código de Python utilizado, la solución óptima obtenida y el valor óptimo de la función objetivo.
- b) Repetir la optimización numérica comenzando desde un nuevo punto inicial: $\mathbf{x}_0 = [4, 0, 0]^\mathsf{T}$. ¿La solución óptima obtenida es la misma que en el caso anterior? Justificar.
- c) Obtener los valores de los multiplicadores de Lagrange ν^* asociados a la solución óptima \mathbf{x}^* , así como también los valores de los gradientes de la función objetivo y de las restricciones. Verificar que la solución óptima es (i) un punto regular de las restricciones, y (ii) un punto KKT.
- d) Considerar el problema perturbado:

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3} f(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_1 x_2 + 2x_2^2 - 6x 1 - 2x_2 - 12x_3$$
s.t.
$$g_1(\mathbf{x}, \theta) = 2x_1^2 + x_2^2 \le \theta$$

$$g_2(\mathbf{x}) = -x_1 + 2x_2 + x_3 - 3 \le 0$$

$$x_1, x_2, x_3 \ge 0,$$

donde θ es el parámetro de perturbación. Resolver el problema perturbado para N valores igualmente espaciados de θ en el intervalo [0, 30] (ej., usar una resolución de 0.2 para θ). Denotar el valor óptimo de la función objetivo como $\xi^*(\theta)$ y el valor óptimo del multiplicador de Lagrange asociado a la restricción perturbada como $\omega^*(\theta)$.

- Utilizando matplotlib, graficar $\xi^*(\theta)$ versus θ , y estimar la pendiente de la curva en $\theta = 15$. ¿Qué representa dicho valor de la pendiente?
- Utilizando matplotlib, graficar $\omega^*(\theta)$ versus θ . Comentar el gráfico y, en particular, explicar el comportamiento observado en $\theta = 0$.