Breve intro a la Optimización Matemática y Mínimos Cuadrados

Johanna Frau

Un poquito de mí ...

UNSE
Universidad Nacional de Santiago del Estero

Lic. en Matemática
UNSE
2014

FAMAF
Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación

Doctorado en Matemática
FAMAF -UNC
2021 (?)

Data Scientist
Pi Data Strategy & Consulting
2019

Mathematical optimization

Mathematical optimization is the process of maximizing or minimizing an objective function by finding the best available values across a set of inputs.

https://deepai.org/machine-learning-glossary-and-terms/mathematical-optimization

The branch of mathematics concerned with the theory and methods for solving problems on finding the extrema of functions on sets defined by linear and non-linear constraints (equalities and inequalities) in a finite-dimensional vector space.

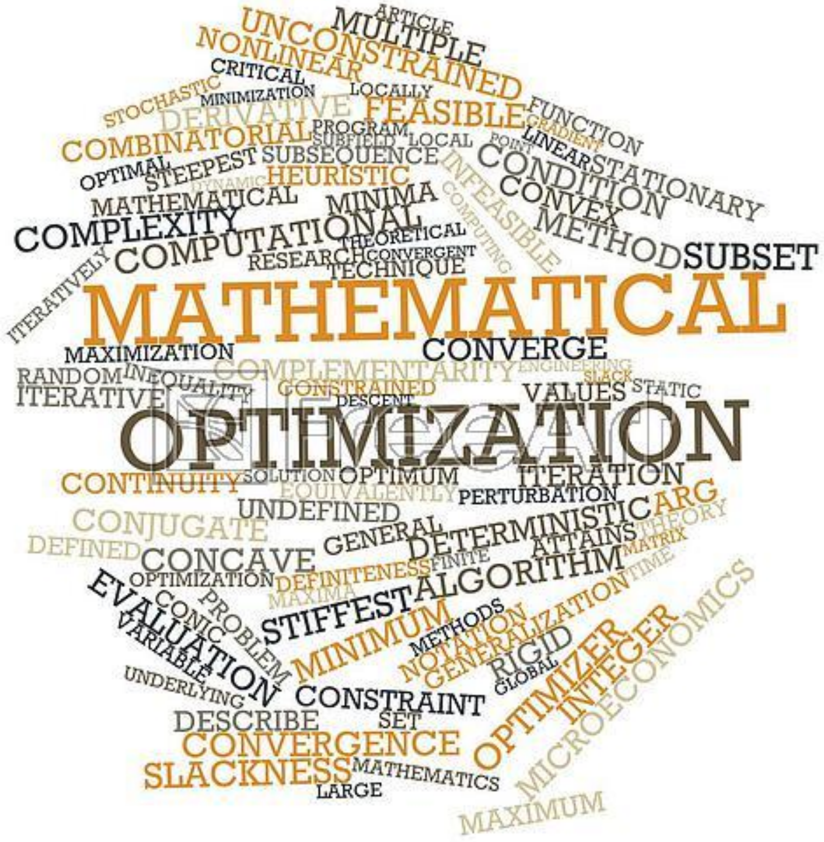
https://encyclopediaofmath.org/wiki/Mathematical_programming

Mathematical optimization or mathematical programming is the selection of a best element (with regard to some criterion) from some set of available alternatives.

https://en.wikipedia.org/wiki/Mathematical_optimization

Mínimo costo

Diseño óptimo



Optimización del transporte

Máxima ganancia

Manejo óptimo de recursos

Mínimo error

Máximo rendimiento

Problema de optimización

Un problema de optimización consiste en maximizar o minimizar cierta función sobre algún conjunto predefinido de antemano.

$$
\begin{aligned}
\underset{x}{\text{minimizar}} \quad & f(x_1, x_2, \ldots, x_n) \\
\text{sujeto a} \quad & g_1(x_1, x_2, \ldots, x_n) \leq 0 \\
& g_2(x_1, x_2, \ldots, x_n) \leq 0 \\
& \vdots \\
& g_m(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0 \\
& g_n(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0 \\
& l_i \leq x_i \leq u_i \\
& x_i \in I \ \text{variable entera}
\end{aligned}
$$

$\boxed{\text{max = -min}}$

Algunos conceptos importantes

$$
\begin{aligned}
\underset{x}{\text{minimizar}} \quad & \boxed{f(x_1, x_2, \ldots, x_n)} \\
\text{sujeto a} \quad & g_1(x_1, x_2, \ldots, x_n) \leq 0 \\
& g_2(x_1, x_2, \ldots, x_n) \leq 0 \\
& \vdots \\
& g_m(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0 \\
& g_n(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0 \\
& l_i \leq x_i \leq u_i \\
& x_i \in I \text{ variable discreta}
\end{aligned}
$$

Función objetivo/costo

$$f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$$

Restricciones de desigualdad

Restricciones de igualdad

Restricciones de cotas en las variables continuas

Restricciones de las variables discretas

Conjunto de restricciones

Conjunto factible S

Son todos los posibles puntos que satisfacen todas las restricciones.

$$(x_1, x_2, \ldots, x_n) \in S \Rightarrow (x_1, x_2, \ldots, x_n)$$

es un *punto factible*.

TIPOS DE PROBLEMAS

Optimización continua

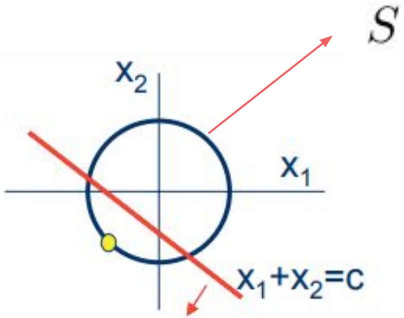
Problemas sin restricciones o irrestrictos
(unconstrained optimization problems)

$$\underset{x \in \mathbb{R}^2}{\text{minimizar}} \quad f(x, y) = x^2 + y^2$$

$$S = \mathbb{R}^2$$

Problemas con restricciones
(constrained optimization problems)

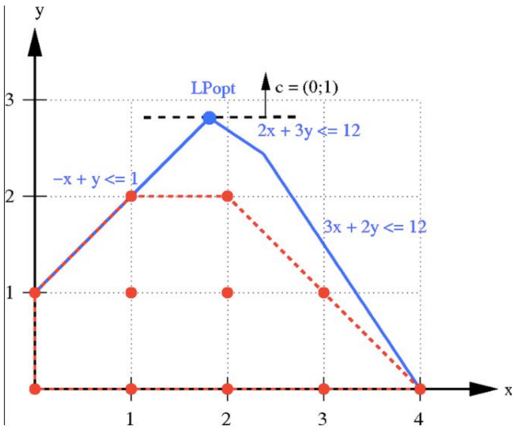
$$\begin{array}{ll} \underset{x}{\text{minimizar}} & f(x_1, x_2) = x_1 + x_2 \\ \text{sujeto a} & x_1^2 + x_2^2 = 4 \end{array}$$



TIPOS DE PROBLEMAS

Optimización discreta/entera
(entera pura)

$$\max y$$
$$-x + y \leq 1$$
$$3x + 2y \leq 12$$
$$2x + 3y \leq 12$$
$$x, y \geq 0$$
$$x, y \in \mathbb{Z}$$



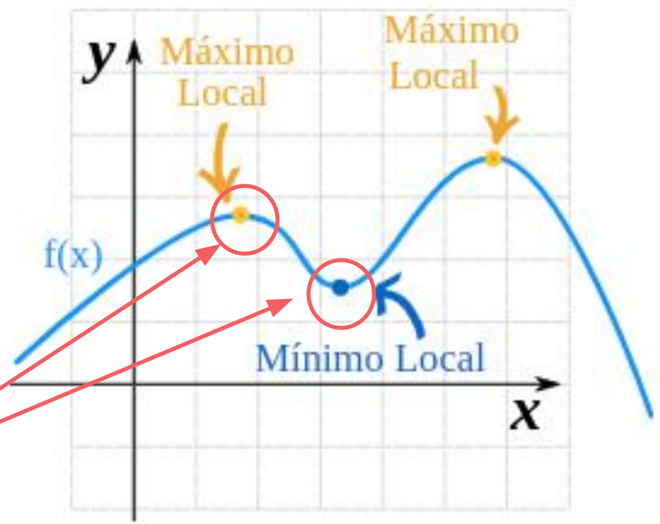
También tenemos problemas de Optimización entera MIXTA

Tipos de optimización (algunos!)

No es lineal! 👀

Programación lineal	La función objetivo y las funciones que definen las restricciones son lineales.	$\begin{aligned} \min \quad & 2x_1 + x_2 \\ & x_1 + x_2 \leq 1 \\ & x_1 \geq 0 \\ & x_2 \geq 0 \end{aligned}$
Programación NO lineal	Al menos una de las funciones no es lineal.	$\begin{aligned} \min \quad & -(x_1 - \tfrac{1}{2})^2 - (x_2 - \tfrac{1}{2})^2 \\ & x_1 + x_2 \geq 1 \\ & x_1 \leq 1 \\ & x_2 \leq 1 \end{aligned}$

Mínimos locales vs. mínimos globales



Valen en un entornito

Derivadas si, derivadas no ...

Recordando un poco de Cálculo/Análisis 1 ...

$f'(x)$ - Crecimiento de la función.

$f''(x)$ - Concavidad de la función.

Obtener Máximos y mínimos!

Un breve recordatorio sobre cómo calcularlas:

$$f(x) = 5x^3 + 2x$$
$$f'(x) = 15x^2 + 2$$
$$f''(x) = 30x$$

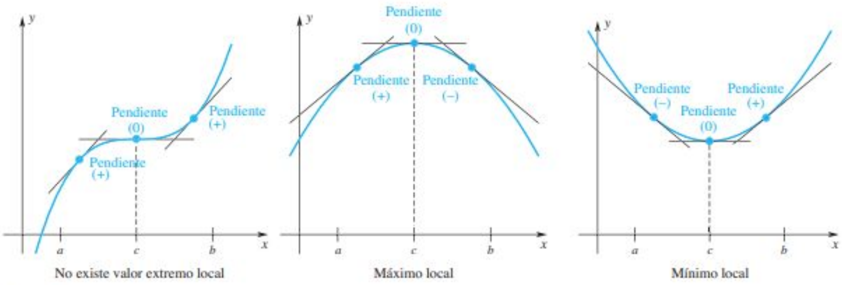
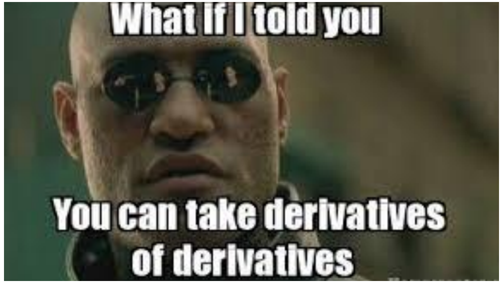


Figura 3

Derivable = Diferenciable = Suave

Gradiente y Hessiana



Recordando un poco de Cálculo más avanzado ....

$$\boxed{f(x_1, x_2, x_3) = x_1^5 + \cos(x_2) + \ln(x_3)}$$

$$\underbrace{\nabla f(x_1, x_2, x_3) = \begin{pmatrix} 5x_1^4 \\ -\sin(x_2) \\ \frac{1}{x_3} \end{pmatrix}}_{\text{Vector gradiente}}$$

Derivada con respecto a x1

Derivada con respecto a x2

Derivada con respecto a x3

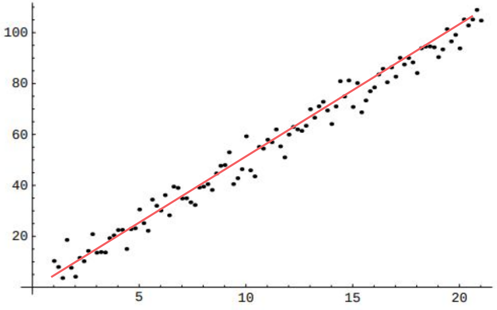
Vector gradiente

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1\,\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1\,\partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2\,\partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2\,\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n\,\partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n\,\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{bmatrix} = H_{f(x_1,x_2,x_3)} = \begin{pmatrix} 20x_1^3 & 0 & 0 \\ 0 & -\cos(x_2) & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{x_3^2} \end{pmatrix}$$

Matriz hessiana

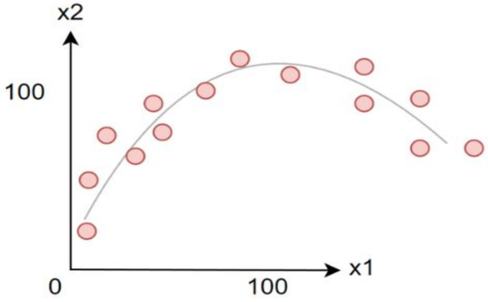
Mínimos cuadrados
(Least squares method)

Consideremos el problema de aproximar una nube de puntos por una ***función***.



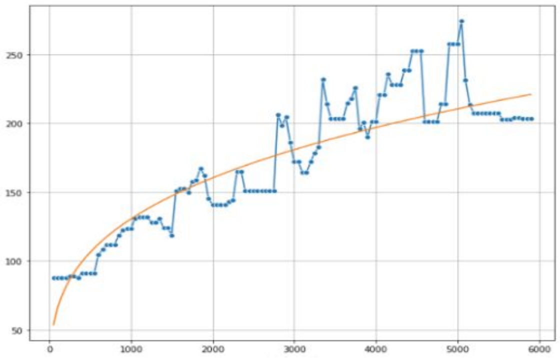
Lineal

$$y = ax + b$$



Polinomio (cuadrático)

$$y = ax^2 + bx + c$$



No lineal (Raíz cuadrada por ejemplo)

$$y = cx^a$$

¿Cómo obtener los coeficientes?

Podemos cambiar por la función que queramos aproximar!

$$\sum_{i=1}^{n}(y_i - f(x_i))^2$$

Ejemplo: Función lineal

- Definimos el error $$E \equiv E_2(a_0, a_1) = \sum_{i=1}^{m} [y_i - (a_1 x_i + a_0)]^2.$$
- Derivamos el error, igualamos a 0.
- Resolvemos un sistema de ecuaciones y obtenemos los coeficientes.

Por suerte, python hace todo por nosotros!

Veamos un problema de aplicación real!