Optimización Numérica de Funciones en Varias Variables

Ingeniería en Computadores
Instituto Tecnológico de Costa Rica

CE-3102: Análisis Numéricos para Ingeniería

Juan Pablo Soto Quirós
jusoto@tec.ac.cr

- Esta presentación explica algunos aspectos matemáticos y computacionales sobre dos métodos iterativos para resolver problemas de minimización para funciones en varias variables.
- En especial, daremos énfasis en los siguientes dos métodos:
  - Método de Descenso Coordinado
  - Método del Gradiente Conjugado

Función multivariable

Una función escalar de n variables $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, asigna a cada punto $(x_1, ..., x_n) \in \mathbb{R}^n$, un único número real denotado con $f(x_1, ..., x_n) \in \mathbb{R}$.

Problema

Sea $\mathbf{x} = (x_1, ..., x_n)$. El objetivo de esta presentación es explicar un conjunto de métodos iterativos que permitirán dar una solución al problema de minimización

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

- En resumen, los pasos para resolver el problema

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} f(\mathbf{x})$$

en un curso de cáluclo en varias variables son los siguientes:

1. Calcular los puntos críticos (Gradiente).
2. Calcular el Hessiano Orlado (Hessiano Orlado).
3. Evaluar puntos críticos en el Hessiano Orlado.
4. Calcular determinantes de las submatrices principales.
5. Interpretar resultado.

- La solución del problema $\min\limits_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} f(\mathbf{x})$ se realizará a través de métodos iterativos.

- Es decir, dado un valor inicial $\mathbf{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n$, cada método iterativo generará una sucesión de puntos

$$\{\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, ..., \mathbf{x}^{(k)}, ...\},$$

  donde $\mathbf{x}^{(j)} \in \mathbb{R}^n$, para todo $j = 1, 2, ...$

- La sucesión de puntos puede tener tres criterios de convergencia:

  1. La sucesión converge a la solución del problema.
  2. La sucesión converge a a un punto que no es solución del problema.
  3. La sucesión no converge.

- El método de descenso coordinado (DC) actualiza solo una de las variables mientras las otras variables son "fijadas".
- Existen varias reglas para seleccionar cual variable es actualizadas. Las tres reglas más utilizadas son:
  1. **Regla de Jacobian:** en cada iteración k, las n variables son actualizadas, utilizando exactamente los valores de la iteración anterior $k-1$.

$$x_j^{(k)} \in \arg\min_{x_j \in \mathbb{R}} f\left(x_1^{(k-1)}, \ldots, x_{j-1}^{(k-1)}, x_j, x_{j+1}^{(k-1)}, \ldots, x_n^{(k-1)}\right),$$

para $j = 1, \ldots, p$. Esta actualización se puede hacer en paralelo.

2. **Reglas de Gauss-Seidel:** en cada iteración k, las n variables son actualizadas, utilizando exactamente los valores de la iteración anterior $k-1$, y los valores de la iteración k calculados anteriormente.

$$x_j^{(k)} \in \arg\min_{x_j \in \mathbb{R}} f\left(x_1^{(k)}, \ldots, x_{j-1}^{(k)}, x_j, x_{j+1}^{(k-1)}, \ldots, x_n^{(k-1)}\right),$$

para $j = 1, \ldots, n$.

3. **Reglas Aleatorizada:** es una variación de la regla de Gauss-Seidel, pero la selección de la variable se hace de manera aleatoria, sin seguir un orden establecido.

Observación: De las 3 reglas mencionadas, la regla de Gauss-Seidel es la más utilizada.

Algorithm 1 Método de Optimización Alternada

Requires: $\mathbf{x}^{(0)} = (x_1^{(0)}, \ldots, x_n^{(0)}) \in \mathbb{R}^n$
Returns: $\mathbf{x}^{(k)} = (x_1^{(k)}, \ldots, x_n^{(k)}) \in \mathbb{R}^n$

```
for k = 1, 2, ... do
    for j = 1, ..., n do
        x_j^(k) = Usando la regla de Jacobi o Gauss-Seidel
    end
    if el criterio de parada se cumple then
        return x^(k) = (x_1^(k), ..., x_n^(k))
    end
end
```

Ejemplo 1

Considere la función $f(x, y) = (x - 2)^2 + (y + 3)^2 + xy$. Aplique el método DC con la regla de Gauss-Seidel y $\mathbf{x}^{(0)} = (1, 1)^t$, utilizando 9 iteraciones.

Solución:

- **Iteración 1**: Calcular vector $\mathbf{x}^{(1)} = (x^{(1)}, y^{(1)})^t$
  - Calcular $x^{(1)}$. Para esto, se resuelve el problema

$$x^{(1)} = \arg\min_{x\in\mathbb{R}} \; f(x, y^{(0)}) = \arg\min_{x\in\mathbb{R}} \; f(x, 1) = \arg\min_{x\in\mathbb{R}} \; (x^2 - 3x + 20) = 1.5$$

  - Calcular $y^{(1)}$. Para esto, se resuelve el problema

$$y^{(1)} = \arg\min_{y\in\mathbb{R}} \; f(x^{(1)}, y) = \arg\min_{y\in\mathbb{R}} \; f(1.5, y) = \arg\min_{x\in\mathbb{R}} \; \frac{4y^2 + 30y + 37}{4} = -3.75.$$

Por lo tanto, $\mathbf{x}^{(1)} = (1.5, -3.75)^t$.

Solución (Continuación):

- **Iteración 2**: Calcular vector $\mathbf{x}^{(2)} = (x^{(2)}, y^{(2)})^t$
    - Calcular $x^{(2)}$. Para esto, se resuelve el problema

$$x^{(2)} = \arg\min_{x\in\mathbb{R}} \; f(x, y^{(1)}) = \arg\min_{x\in\mathbb{R}} \; \frac{16x^2 - 124x + 73}{16} = 3.875.$$

    - Calcular $y^{(2)}$. Para esto, se resuelve el problema

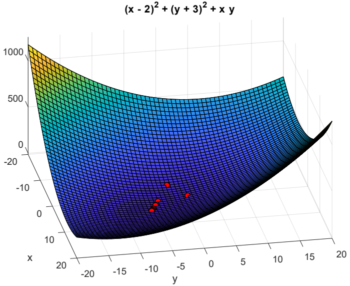
$$y^{(2)} = \arg\min_{y\in\mathbb{R}} \; f(x^{(2)}, y) = \arg\min_{y\in\mathbb{R}} \; \frac{8y^2 + 79y + 87}{8} = -4.9375.$$

Por lo tanto, $\mathbf{x}^{(2)} = (3.875, -4.9375)^t$.

Solución (Continuación):

Repitiendo el proceso varias veces, obtenemos los siguientes resultados:

k	$\mathbf{x}^{(k)}$	$f(\mathbf{x}^{(k)})$
0	$(1,1)$	18
1	$(1.5,-3.75)$	-4.8125
2	$(3.875,-4.9375)$	-11.8633
3	$(4.4688,-5.2344)$	-12.3040
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
9	$(4.666,-5.333)$	-12.3333



Ejemplo 2

Considere la función $f(x,y,z) = x^3 + y^3 + z^3 - 2xy - 2xz - 2yz$. Aplicando el método OA con la regla de Gauss-Seidel y $\mathbf{x}^{(0)} = (1,1,1)^t$, obtenemos los siguientes resultados.

Solución:

k	$\mathbf{x}^{(k)}$	$f(\mathbf{x}^{(k)})$
0	$(1,1,1)$	3
1	$(1.1547, 1.1985, 1.2525)$	3.4366
2	$(1.2641, 1.2953, 1.3062)$	3.5392
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
8	$(1.333, 1.333, 1.333)$	3.5556

Criterio de Parada

Dado una tolerancia $tol > 0$, dos criterios de parada para el método DC es considerar las siguientes expresiones booleanas:

$$\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}\|_2 < tol \quad \text{ó} \quad \|\nabla f(\mathbf{x}^{(k+1)})\|_2 < tol$$

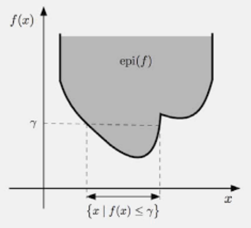
donde $\mathbf{x}^{(k)} \in \mathbb{R}^n$ es la k-esima iteración generada por el método DC y $\|\cdot\|_2$ es la norma euclideana definida por $\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{\displaystyle\sum_{i=1}^{n} x_i^2}$.

Algunas definiciones

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

- El **epigrafo** de f se define como el conjunto

$$\text{epi}(f) = \{(\mathbf{x}, \gamma) : f(\mathbf{x}) \leqslant \gamma, \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \gamma \in \mathbb{R}\}.$$



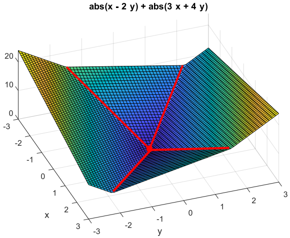
- Una función f es **cerrada** si su epigrafo es cerrado.

Algunas definiciones (continuación)

- Un punto $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ se llama **mínimo coordenado** si

$$f(\mathbf{x}^*) \leqslant f(\mathbf{x}^* + \alpha \cdot \mathbf{e}_j),$$

para $j = 1, \ldots, n$ y $\alpha \in \mathbb{R}$. Aquí, $\{\mathbf{e}_1, \ldots, \mathbf{e}_n\}$ es la base canónica en $\mathbb{R}^n$.



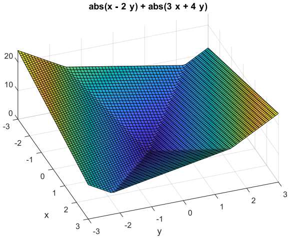


Figura: Gráfica de la función $f(x, y) = |x - 2y| + |3x + 4y|$.

Algunas definiciones (continuación)

- Una función $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ se llama convexa si cualesquiera dos puntos $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$, y para cada $\alpha \in [0, 1]$, se cumple que

$$f(\alpha\mathbf{x} + (1-\alpha)\mathbf{y}) \leqslant \alpha f(\mathbf{x}) + (1-\alpha)f(\mathbf{y}).$$

- Una función $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ es una función **apropiada** si no existe ningún punto $\mathbf{x}$ tal que $f(\mathbf{x}) = -\infty$ y cuyo dominio no es vacío.

Teorema de Convergencia del Método DC

Sea $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ una función apropiada y cerrada, la cual es continua en su dominio. Si se cumple que

1. el problema $\min\limits_{x_j \in \mathbb{R}} f\left(x_1^{(k)}, \ldots, x_{j-1}^{(k)}, x_j, x_{j+1}^{(k-1)}, \ldots, x_n^{(k-1)}\right)$ tiene una solución única, para todo $j = 1, \ldots, n$
2. para cualquier $\mathbf{x}^{(0)}$, el conjunto $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : f(\mathbf{x}) \leqslant f(\mathbf{x}^{(0)})\}$ es un conjunto acotado

entonces la sucesión generada por el método DC converge a un mínimo coordenado.

Nota: Si $f(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) + \sum\limits_{i=1}^{n} h_i(x_i)$, donde g es una función convexa y diferenciable, y cada h_i es convexa (no necesariamente diferenciable), entonces un mínimo coordenado de f es también un mínimo global de f.

Ejercicios

1. Considere la función

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

Aplique el método DC con un valor inicial $\mathbf{x}^{(0)} = (1, 1, 1)^t$, con una tolerancia de 10^{-3}.

2. Considere la matriz $X = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$ y el vector $\mathbf{y} = (-2, 3)^t$. Usando el método DC, resuelva el problema de optimización

$$\min_{\mathbf{z}\in\mathbb{R}^2} \frac{1}{2}\|\mathbf{y} - X\mathbf{z}\|_2^2,$$

con un valor inicial $\mathbf{z}^{(0)} = (0.5, 0.5)^t$, con una tolerancia de 10^{-3}.

- El método del gradiente conjugado no lineal (GCNL) es un algoritmo para resolver numéricamente el problema de optimización

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}),$$

donde f es una función continuamente diferenciable.

- Dado un valor inicial $\mathbf{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n$, el objetivo del método GCNL es crear una sucesión de puntos $\{\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, ..., \mathbf{x}^{(k)}, ...\}$.

- Esta sucesión se genera mediante la siguiente fórmula

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{d}^{(k)}$$

donde

  - $\alpha_k > 0$ es un tamaño de paso obtenido por una búsqueda lineal
  - $\mathbf{d}^{(k)} \in \mathbb{R}^n$ es una dirección de descenso en $\mathbf{x}^{(k)}$ de f

Selección de la dirección $\mathbf{d}^{(k)}$

- La dirección $\mathbf{d}^{(k)}$ is generada por la regla

$$\mathbf{d}^{(0)} = -\mathbf{g}^{(0)}, \qquad \mathbf{d}^{(k+1)} = -\mathbf{g}^{(k+1)} + \beta_k \mathbf{d}^{(k)},$$

  donde $\mathbf{g}^{(k)} = \nabla f(\mathbf{x}^{(k)})^t$ es el gradiente de f representado como un vector columna.

- La constante $\beta_k > 0$ es un parámetro de actualización del método GCNL.

- Diferentes métodos GCNL corresponden a diferentes elecciones para el escalar β_k.

$\beta_k^{HS} = \dfrac{\mathbf{g}_{k+1}^{\mathsf{T}}\mathbf{y}_k}{\mathbf{d}_k^{\mathsf{T}}\mathbf{y}_k}$	(1952)	in the original (linear) CG paper of Hestenes and Stiefel [59]
$\beta_k^{FR} = \dfrac{\Vert\mathbf{g}_{k+1}\Vert^2}{\Vert\mathbf{g}_k\Vert^2}$	(1964)	first nonlinear CG method, proposed by Fletcher and Reeves [45]
$\beta_k^{D} = \dfrac{\mathbf{g}_{k+1}^{\mathsf{T}}\nabla^2 f(\mathbf{x}_k)\mathbf{d}_k}{\mathbf{d}_k^{\mathsf{T}}\nabla^2 f(\mathbf{x}_k)\mathbf{d}_k}$	(1967)	proposed by Daniel [39], requires evaluation of the Hessian $\nabla^2 f(\mathbf{x})$
$\beta_k^{PRP} = \dfrac{\mathbf{g}_{k+1}^{\mathsf{T}}\mathbf{y}_k}{\Vert\mathbf{g}_k\Vert^2}$	(1969)	proposed by Polak and Ribière [84] and by Polyak [85]
$\beta_k^{CD} = \dfrac{\Vert\mathbf{g}_{k+1}\Vert^2}{-\mathbf{d}_k^{\mathsf{T}}\mathbf{g}_k}$	(1987)	proposed by Fletcher [44], CD stands for "Conjugate Descent"
$\beta_k^{LS} = \dfrac{\mathbf{g}_{k+1}^{\mathsf{T}}\mathbf{y}_k}{-\mathbf{d}_k^{\mathsf{T}}\mathbf{g}_k}$	(1991)	proposed by Liu and Storey [67]
$\beta_k^{DY} = \dfrac{\Vert\mathbf{g}_{k+1}\Vert^2}{\mathbf{d}_k^{\mathsf{T}}\mathbf{y}_k}$	(1999)	proposed by Dai and Yuan [27]
$\beta_k^{N} = \left(\mathbf{y}_k - 2\mathbf{d}_k\dfrac{\Vert\mathbf{y}_k\Vert^2}{\mathbf{d}_k^{\mathsf{T}}\mathbf{y}_k}\right)^{\mathsf{T}}\dfrac{\mathbf{g}_{k+1}}{\mathbf{d}_k^{\mathsf{T}}\mathbf{y}_k}$	(2005)	proposed by Hager and Zhang [53]

Figura: Posibles elecciones para el parámetro β_k. (Nota: $\mathbf{y}_k = \mathbf{g}_{k+1} - \mathbf{g}_k$)

Selección del tamaño de paso α_k

- En cada iteración del método GCNL, el paso α_k se escoge de resolver el siguiente problema de optimización:

$$\min_{\alpha \geqslant 0} f(\mathbf{x}^k + \alpha \mathbf{d}^k).$$

- En la práctica, uno no resuelve este problema. Una alternativa es encontrar la constante α_k que satisface la siguiente desigualdad

$$f(\mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{d}^k) - f(\mathbf{x}^k) \leqslant \delta \alpha_k (\mathbf{g}^{(k)})^t \mathbf{d}^k, \tag{1}$$

donde $\delta \in]0, 1[$, el cual se elige de manera aleatoria.

- Dado $\alpha_k = 1$, se prueba α_k en la desigualdad (1). Si la desigualdad no se cumple, entonces se divide α_k por un número entero positivo (por ejemplo 2). El proceso se repite hasta que la desigualdad sea verdadera.

Algoritmo del método GCNL

REQUIRE: $\mathbf{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n$. **ENSURE:** $\mathbf{x}^{(k+1)} \in \mathbb{R}^n$

$\mathbf{g}^{(0)} = \nabla f(\mathbf{x}^{(0)})^t; \quad \mathbf{d}^{(0)} = -\mathbf{g}^{(0)}$

for $k = 0, 1, 2, ...$ **do**

$\alpha_k = 1; \quad \delta \in]0, 1[$

while $\neg[f(\mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{d}^k) - f(\mathbf{x}^k) \leqslant \delta \alpha_k (\mathbf{g}^{(k)})^t \mathbf{d}^k]$ **do**

$\alpha_k = \alpha_k / 2$

end

$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{d}^{(k)}$

if *stopping criterion is satisfied* **then**

Return $\mathbf{x}^{(k+1)}$

end

$\mathbf{g}^{(k+1)} = \nabla f(\mathbf{x}^{(k+1)})^t; \quad$ Choose β_k rule

$\mathbf{d}^{(k+1)} = -\mathbf{g}^{(k+1)} + \beta_k \mathbf{d}^{(k)}$

end

Ejemplo 3

Considere la función $f(x,y) = (x-2)^4 + (x-2y)^2$. Aplique el método GCNL con $\mathbf{x}^{(0)} = (0,3)^t$, utilizando 13 iteraciones, y usando la regla de de Fletche y Reeves $\beta_k = \frac{\|\mathbf{g}^{(k+1)}\|^2}{\|\mathbf{g}^{(k)}\|^2}$.

Solución: Sea $\nabla f(\mathbf{x}) = (4x^3 - 24x^2 + 50x - 4y - 32, -4x + 8y)$. Luego, se define $\mathbf{g}^{(0)} = \nabla f(\mathbf{x}^{(0)})^t = (-44, 24)^t$ y $\mathbf{d}^{(0)} = -\mathbf{g}^{(0)}$

- Iteración 1:
  - Usando $\delta = 0.5$, buscamos el α_0 que cumple la condición (1) (Ver bloque azul en Algoritmo GCNL). En este caso, $\alpha_0 = 0.0625$.
  - Se aproxima la primera iteración

$$\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{x}^{(0)} + \alpha_0 \mathbf{d}^{(0)} = (1.375, 2.25)^t$$

  - Se calcula $\mathbf{g}^{(1)} = \nabla f(\mathbf{x}^{(1)})^t = (-7.2265625, 12.5)^t$
  - Se obtiene $\beta_0 = \frac{\|\mathbf{g}^{(1)}\|^2}{\|\mathbf{g}^{(0)}\|^2} = 0.082991$
  - Se calcula $\mathbf{d}^{(1)} = -\mathbf{g}^{(1)} + \beta_0 \mathbf{d}^{(0)} = (10.878163, -14.491782)^t$

Solución: (Continuación)

- Iteración 2:
  - Usando $\delta = 0.5$, buscamos el α_1 que cumple la condición (1) (Ver bloque azul en Algoritmo GCNL). En este caso, $\alpha_1 = 0.0625$.
  - Se aproxima la segunda iteración

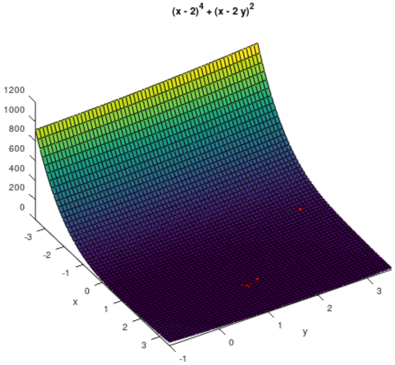
$$\mathbf{x}^{(2)} = \mathbf{x}^{(1)} + \alpha_1 \mathbf{d}^{(1)} = (2.054885, 1.344264)^t$$

  - Se calcula $\mathbf{g}^{(2)} = \nabla f(\mathbf{x}^{(2)})^t = (-4.889568, 2.534572)^t$
  - Se obtiene $\beta_2 = \frac{\|\mathbf{g}^{(2)}\|^2}{\|\mathbf{g}^{(1)}\|^2} = 0.038510$
  - Se calcula $\mathbf{d}^{(2)} = -\mathbf{g}^{(2)} + \beta_1 \mathbf{d}^{(1)} = (1.685541, -3.092645)^t$

Solución: (Continuación)

La siguiente tabla representa el cálculo de las siguientes iteraciones

k	$\mathbf{x}^{(k)}$	$\lVert\nabla f(\mathbf{x}^{(k)})\rVert$
0	$(0,3)^t$	50.12
1	$(1.375, 2.25)^t$	14.4386
2	$(2.0549, 1.3443)^t$	2.8334
3	$(2.1602, 1.1510)^t$	0.62659
4	$(2.1821, 1.1061)^t$	0.12575
5	$(2.1852, 1.0968)^t$	0.034372
6	$(2.1849, 1.0940)^t$	0.022743
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
13	$(2.0555, 1.0278)^t$	0.00062670



Convergencia del Método CGNL

Sea $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ una función apropiada, la cual es continua en su dominio. Si se cumple que

- para cualquier $\mathbf{x}^{(0)}$, el conjunto $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : f(\mathbf{x}) \leqslant f(\mathbf{x}^{(0)})\}$ es un conjunto acotado
- Existe $A \subseteq \mathbb{R}^n$, tal que para todo $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in A$, existe $L > 0$ tal que

$$\|\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y})\| \leqslant L\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|.$$

- La constante δ del Método CGNL esta en el intervalo $]0, 0.5[$.

entonces la sucesión generada por el método CGNL satisface

$$\lim_{k\to\infty} \|\nabla f(\mathbf{x}^{(k)})\| = 0.$$

Ejercicios

1. Considere la función

$$f(x_1, x_2) = xe^{-x^2-y^2}.$$

Aplique el método GCNL con un valor inicial $\mathbf{x}^{(0)} = (-0.5, -0.5)^t$, con una tolerancia de 10^{-2}.

2. Considere la matriz $X = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$ y el vector $\mathbf{b} = (4, 7)^t$. Usando el método CGNL, resuelva el problema de optimización

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^2} \left(\frac{1}{2}\mathbf{x}^t A\mathbf{x} - \mathbf{b}^t\mathbf{x} \right),$$

con un valor inicial $\mathbf{x}^{(0)} = (0.5, 0.5)^t$, con una tolerancia de 10^{-3}.