

Tarea 4: Ceros de funciones en el caso multivariable y optimización

Elaborado por Giselt Parra
Lunes, 9 de Noviembre de 2020.

Ceros de funciones multivariables

Como en los trabajos anteriores, la motivación de los métodos a exponer es hallar un punto donde la función f sea igual a cero. Hasta ahora se ha tocado el tema cuando hablamos de funciones que dependen de una sola variable. Métodos iterativos tales como el método de Newton y el método de la secante pueden extenderse para hallar ceros en funciones multivariables.

Método de Newton. Caso Multivariable

Recordemos que para el método de Newton cada iteración k consistía en encontrar una aproximación a la raíz de la función de esta manera:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \quad \forall k \in \mathbb{N} \quad (1)$$

Consideremos que en el caso estudiado en las tareas anteriores se trabajaba con una función $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. Para el caso multivariable la función estará definida como $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ y será evaluado en un vector $x \in \mathbb{R}^n$.

Sea $F(x) = [f_0(x), f_1(x), \dots, f_{n-1}(x)]^T$ con cada elemento que compone este vector columna como $f_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, si para $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ entonces para su derivada $f' : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. En el caso de F sabiendo cómo se define, su derivada se denota como $F' : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}$ donde F' se le conoce como la matriz Jacobiana y posee esta estructura

$$J(x_0, x_1, \dots, x_n) = \begin{bmatrix} f_0(x_0, x_1, \dots, x_n) \\ f_1(x_0, x_1, \dots, x_n) \\ \vdots \\ f_n(x_0, x_1, \dots, x_n) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_0}{\partial x_0} & \cdots & \frac{\partial f_0}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_1}{\partial x_0} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_0} & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix} \quad (2)$$

Reescribiendo la expresión (1), de manera análoga para el método de Newton en el caso multivariable queda definido como

$$x_{k+1} = x_k - \frac{F(x_k)}{J(x_k)} \quad \forall k \in \mathbb{N} \quad (3)$$

donde para para cada iteración k se debe resolver el sistema de ecuaciones lineal dado por $J(x_k)s_k = -F(x_k)$ para obtener s_k para ser sumado con el vector x_k para si obtener x_{k+1} . Note que para hallar ceros con este método se requiere la resolucio de un sistema de ecuaciones lineales por cada iteración, esto puede resultar inconveniente tomando en cuenta que la matriz J puede estar mal condicionada o ser singular.

Método de la Secante o Quasi-Newton. Caso Multivariable

Al igual que en el caso univariable, la principal desventaja del método de Newton es el obtener la derivada de la función, en el caso vectorial, las derivadabas parciales se deben a tener a disposición para poder obtener la matriz de coeficientes en el sistema de ecuaciones. Ahora bien, de la misma manera como partimos del método de Newton en el caso escalar para el multivariable, se puede obtener el modelo extendido del método de la secante para funciones con multiples variables basandonos en la ecuación de la secante. Recordemos que cada iteración consistia en obtener las aproximaciones a la raíz reemplazando el uso de la derivada como denominador del segundo término por el cálculo de diferencias finitas

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{\frac{f(x_{k-1}) - f(x_k)}{x_{k-1} - x_k}} \quad \forall k \in N \quad (4)$$

siendo

$$a_k = \frac{f(x_{k-1}) - f(x_k)}{x_{k-1} - x_k} \quad (5)$$

pues ahora tendremos una matriz A_k que aproximará a la matriz Jacobiana y que será

$$A_k = \frac{F(x_{k-1}) - F(x_k)}{x_{k-1} - x_k} \quad (6)$$

por lo que la manera de aproximarse a la raíz basados en la construcción de planos secantes a la función F será

$$x_{k+1} = x_k - \frac{F(x_k)}{A_k} \quad \forall k \in N \quad (7)$$

El problema de esta forma es que la construcción de A_k genera un sistema de ecuaciones lineales com más incognitas que ecuaciones, la implicación en esto es que el sistema posee infinitas soluciones por las n^2 incognitas y n condiciones a satisfacer. Una solución para hallar una matriz con solución única en cada iteración fue propuesta por C. G. Broyden conocido como el método de Broyden. Éste metodo propone tener la matriz A_{k+1} que sea lo más cercana posible a la matriz A_k como

$$A_{k+1} = A_k + \frac{(y_k - A_k p_k) p_k^T}{p_k^T p_k} \quad (8)$$

donde p_k viene dada por la solución del sistema $A_k p_k = -F(x_k)$ y $y_k = F(x_{k+1}) - F(x_k)$

Estudio de la convergencia para los métodos Quasi-Newton

Desde el estudio de problemas con una sola variable se conoce que los métodos cerrados tales como Newton y Secante, con el fin de garantizar la convergencia se debe iniciar los métodos en entónor cercano a la raíz. Esta consideración también debe ser tomada en cuenta para la construcción e implementación de los métodos estudiados en esta tarea. Existen muchas variaciones del método de la Secante para el caso multivariable, sin embargo y por razones ya mencionadas, se escoge al método de Broyden para así obtener la aproximación a la matriz Jacobiana que permita tener así una solución única para cada sistema de ecuación a resolver por iteración.

Una manera de verificar si el método alcanzará la convergencia viene dada por una propiedad denominada como Propiedad del Deterioro Acotado.

Propiedad del Deterioro Acotado (PDA)

Se dice que el método cumple con la propiedad de PDA si para todas las iteraciones k alguna norma inducida tiene esta característica

$$\|A_{k+1} - J(x_*)\| \leq \|A_k - J(x_*)\| + \frac{s}{2}(\|e_k\| + \|e_{k+1}\|)$$

con $e_k = (x_k - x_*)$ y $s > 0$ siendo la constante Lipschitz de la función.

Otro punto a destacar para el estudio de la convergencia en los métodos Quasi-Newton es que poseerán una convergencia de velocidad q-superlineal de cumplirse que

$$\frac{\|(A_k - J(x_*))s_k\|}{\|s_k\|} = 0 \quad (9)$$

y $x_k \rightarrow x_*$. De cumplirse estas condiciones entonces no será necesario la convergencia de las matrices A_k hacia la matriz Jacobiana.

Por último, se enuncia y se evaluará un método Quasi Newton llamado el método de Newton Modificado con velocidad q-lineal que consiste en usar para todas las iteraciones la matriz Jacobiana evaluada en el vector inicial por lo que cada paso queda definido de esta forma

$$x_{k+1} = x_k - \frac{F(x_k)}{J(x_0)} \quad \forall k \in N \quad (10)$$

Resultados

Código

CerosMultivariable.m

En la implementación, el método de Broyden requirió un número mayor de iteraciones para alcanzar a la convergencia. Debido a problemas para el despliegue de gráficas, a continuación se presentará una tabla con los valores de norma Euclidiana de la función evaluada en el vector x_{k+1} cada iteración.

Prueba 1

$[x^2 - 2y + 1, 2x + x^2 - 3]^T$ vector inicial = $[2, 2]^T$ root = $[1, 1]^T$ tol = 1e-06		
Iteración	Método de Newton	Método de Broyden
1	0.94668	9.4668e-01
2	0.078206	2.6420e-01
3	5.5387e-04	9.5920e-02
4	3.4774e-08	3.3808e-02
5	-	7.0941e-04
6	-	5.3746e-06
7	-	4.5960e-09

Cuadro comparativo de la norma Euclidiana para cada nuevo punto por iteración

Para esta prueba, el método de Newton Modificado con matriz Jacobiana fija ($J(x_0)$) le toma 17 iteraciones para alcanzar la convergencia

Prueba 2

$[x^2 + xy^3 - 9, 3xy - y^3 - 4]^T$ vector inicial = $[1.5, 1.5]^T$ root = $[1.6628, 1.5536]^T$ tol = 1e-06			
Iteración	Método de Newton	Método de Newton Modificado	Método de Broyden
1	0.12571	0.12571	0.12571
2	6.8273e-04	0.020754	0.013598
3	2.6262e-08	0.0034228	1.6585e-04
4	-	5.6978e-04	2.6902e-06
5	-	9.4884e-05	1.7156e-08
6	-	1.5805e-05	-
7	-	2.6328e-06	-
9	-	4.3858e-07	-

Como se puede observar el método de Broyden le toma unas interacciones adicionales para llegar al cero de la función. Para el cuadro se agregó el valor de la norma por iteración para el método modificado de Newton para observar su comportamiento y qué tanto puede o no variar con respecto a los valores de entrada. Se procede a mostrar el rendimiento del método con un vector inicial más alejado.

$[x^2 + xy^3 - 9, 3xy - y^3 - 4]^T$ vector inicial = $[2, 2]^T$ root = $[1.6628, 1.5536]^T$ tol = 1e-06			
Iteración	Método de Newton	Método de Newton Modificado	Método de Broyden
1	2.1295	2.1295	2.1295
2	0.17864	0.88032	0.64385
3	0.0021677	0.40965	0.10107
4	4.6720e-07	0.20059	0.017856
5	-	0.10076	0.0018138
6	-	0.013554	6.2610e-05
7	-	0.0036164	3.1941e-07
9	-	0.0018706	-
10	-	9.6802e-04	-
11	-	5.0106e-04	-
12	-	2.5939e-04	-
13	-	1.3430e-04	-
14	-	6.9532e-05	-
15	-	3.6002e-05	-
16	-	1.8641e-05	-
17	-	9.6520e-06	-
18	-	4.9977e-06	-
19	-	2.5877e-06	-
20	-	1.3399e-06	-
21	-	6.9379e-07	-

Con una diferencia de 0.5 en los valores de entrada de la primera ejecución con esta función se observa la notable desmejora cuando se toman vectores iniciales más alejados al vector que estamos buscando. Note que el cambio respecto a ambas ejecuciones tanto para el método de Newton original como el método de Broyden no es tan severo como el de este tercer método.

Podemos concluir que si bien es cierto que fijar la matriz Jacobiana como la matriz de coeficientes resultante al evaluarla en el punto inicial resulta una alternativa lenta, desde el punto de vista de efectividad, si el método cumple con las condiciones comentadas en la sección de convergencia de los métodos de Quasi-Newton, funciona.

Prueba 3

Para esta prueba, se evidenciará una desventaja para el método de Newton modificado

Para la función $[x + y - 1, \sin(\pi x/2) + y]^T$ se contabilizó en un principio el número de iteraciones requerido para el método converger siendo 40 el número máximo de iteraciones

permitidas

```
Iteraciones necesitadas con Newton:
7
Iteraciones necesitadas con Newton Modificado
40
Iteraciones necesitadas con Broyden:
11
```

Ejecución con un máximo de 40 iteraciones permitidas

Dado a que con esos resultado podría parecer que el método no converge, se procedió a extender el número de iteraciones permitidas a 300 dado a que afirmamos en la prueba anterior que el método es efectivo. Los resultados fueron los siguientes

```
Iteraciones necesitadas con Newton:
7
Iteraciones necesitadas con Newton Modificado
152
Iteraciones necesitadas con Broyden:
11
```

Ejecución con un máximo de 300 iteraciones permitidas

por lo que esta prueba no hace el papel de contraejemplo de la efectividad de la modificación para el método de Newton.

De antemano sabemos que éste es un método lento, sin embargo, se quiso ahondar en el comportamiento de la función con respecto al vector inicial y por qué resulta un inconveniente para el método modificado de Newton.

$[x^2 + y^2 - 1, \sin(\pi x/2) + y^3]^T$ vector inicial = $[1, 1]^T$ root = $[0.47610, -0.87939]^T$ tol = $1e-06$			
Iteración	Método de Newton	Método de Newton Modificado	Método de Broyden
1	1.1086	1.1086	1.1086
2	10.439	1.0939	1.2671
3	3.4243	1.1305	2.7456
4	0.94383	1.1027	0.90804
5

Los resultados de la norma tanto en el método de Newton original como el método de Broyden nos indican que en la trayectoria que toman éstos métodos la convergencia claramente no es

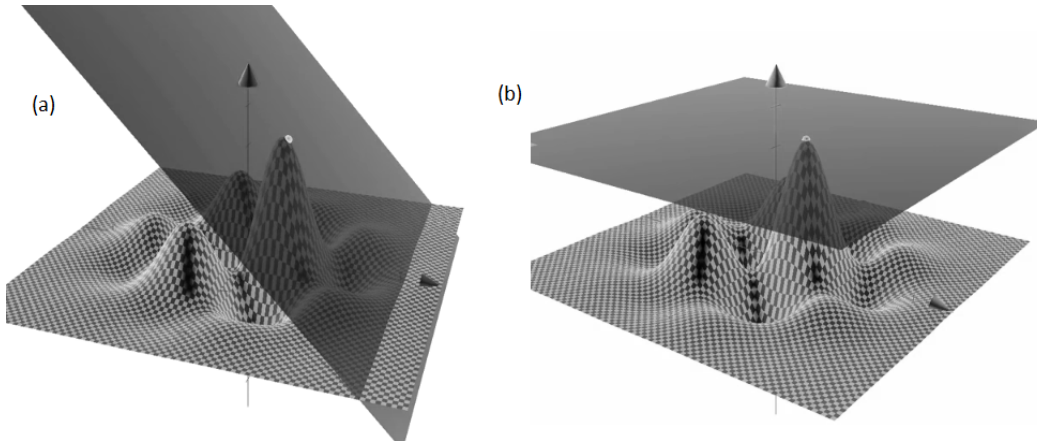
monótona, como se indica en en los valores resaltados en rojo. Esto es interpretado por la autora de esta tarea como un cambio de sentido en la dirección de paso del vector p_k en esas iteraciones, siendo la idea intiutiva que la dirección de paso sea de descenso, resultaría una contradicción que ocurra este fenómeno, sin embargo, esto podría implicar que entre el vector inicial del método y el cero de la función se encuentre una superficie con máximo (o llamado informalmente, una subida). De ser así, el hecho de que el método soporte este tipo de situaciones, lo hace un método más robusto a uno que esté forzado a que la los valores de la norma sean estrictamente descendentes para todas las iteraciones.

Desde luego, sea o no esta interpretación acertada, la magnitud del incremento de la norma en los métodos de Newton como de Broyden (aunque de menor manera) son mayores a los que se presentan en la modificacion del método de Newton, razón a la que podría atribuirse la lentitud del método.

Optimización

En los problemas de optimización se tiene como objetivo principal la búsqueda para hallar minimos y máximos de una función. El tratamiento para hallar estos valores es muy similar a lo estudiado en el caso de cero de funciones. Lo que se busca ahora es encontrar los valores donde las derivadas parciales de la función f sean iguales a cero

$$\nabla f = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_0}{\partial x} \\ \frac{\partial f_1}{\partial x} \\ \vdots \\ \frac{\partial f_{n-1}}{\partial x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad (11)$$



(a) Representación del plano tangente en una función de tres dimensiones
(b) Representación del plano tangente cuando se calcula desde un punto crítico donde las derivadas parciales de la función son cero

Siendo ahora ∇f la función a la cual hallarle los ceros así como la matriz Hessiana representará nuestra matriz Jacobiana en el método anteriormente presentado. La matriz Hessiana está definida como

$$H(x_0, x_1, \dots, x_{n-1}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f_0}{\partial x_0^2} & \cdots & \frac{\partial f_0}{\partial x_0 x_{n-1}} \\ \frac{\partial^2 f_1}{\partial x_1 x_0} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_1 x_{n-1}} \\ \vdots & & \\ \frac{\partial^2 f_{n-1}}{\partial x_0 x_{n-1}} & \cdots & \frac{\partial f_{n-1}}{\partial x_{n-1}^2} \end{bmatrix} \quad (12)$$

por lo que cada paso en los métodos para hallar mínimos viene dado como

$$x_{k+1} = x_k - \frac{\nabla f(x_k)}{H_k} \quad \forall k \in N \quad (13)$$

donde el sistema de ecuaciones a resolver será $H_k p_k = -\nabla f(x_k)$

Para hallar el mínimo entonces se deben cumplir que teniendo un vector x_* , $\nabla f(x_*) = 0$ y $\nabla^2 f(x_*)$ debe ser simétrica y semidefinida. Si la matriz H es simétrica y positivo definida, entonces x_* es mínimo local.

Método de BFGS

Como ha sido mencionado en párrafos anteriores, para hallar el mínimo se requiere que $\nabla^2 f(x_*)$ sea simétrica semipositiva. Generalizaciones del método de la secante en el caso multivariable tal como el método de Broyden tiene el inconveniente principal para extenderse en problemas de optimización al no preservar la simetría de la matriz Hessiana, por lo que basarnos sólo en la ecuación de la secante no es suficiente. Una mejora a éste método es con el uso de matrices simétricas de rango uno que así como su nombre lo indica, preserva la simetría de la matriz generada pero no garantiza que sea semipositiva. Así que para preservar tanto la simetría como la propiedad donde $x^T H x > 0$ para todo vector x distinto de cero, se imponen estas condiciones junto a la ecuación de la secante, resultando así el cálculo de la aproximación a la matriz Hessiana como

$$H_{k+1} = H_k + \alpha(y_k y_k^T) + \beta(\nabla f(x_{k+1}) \nabla f(x_k)^T) \quad (14)$$

con los valores de $\alpha = \frac{1}{y_k^T p_k}$, $\beta = -\frac{1}{p_k^T \nabla f(x_k)}$ y $y_k = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)$, por lo que la expresión completa para cada aproximación de la matriz H_k será

$$H_{k+1} = H_k - \frac{y_k y_k^T}{y_k^T p_k} + \frac{\nabla f(x_{k+1}) \nabla f(x_k)^T}{p_k^T \nabla f(x_k)} \quad (15)$$

importante resaltar que $y_k y_k^T > 0$ para funciones convexas. Más aún, si la función es convexa, entonces el método posee convergencia global. Siendo el método de BFGS una extensión

mejorada al método de Broyden, cumple que si la constante de Lipschitz es continua y mayor es cero la convergencia local será q-superlineal.

De las ventajas principales del método de BFGS es que la matriz Hessiana no necesita ser invertida si no que se aproxima por cada iteración.

Resultados

Código

optimizacion.m

Prueba 1

$e^{x_1-1} + e^{-x_2+1} + (x_1 - x_2)^2$ <p>vector inicial = $[0, 0]^T$ root = $[0.79607, 1.20383]^T$ tol = $1e-04$</p>		
Iteración	Método de Newton	Método de BFGS
1	0.67259	0.67259
2	0.077191	0.45993
3	7.1376e-04	0.20011
4	7.0263e-08	0.15943
5	-	0.042036
6	-	0.021844
7	-	0.010825
8	-	0.0054407
9	-	0.0027239
10	-	0.0013631
11	-	6.8184e-04
12	-	3.4099e-04
13	-	1.7051e-04
14	-	8.5261e-05

Cuadro comparativo de la norma Euclidiana para cada nuevo punto por iteración

Prueba 2

$\begin{aligned} &x^2 - 2x + y^2 - z + 1 \\ &xy^2 - x - 3y + yz + 2 \\ &xz^2 - 3z + yz^2 + xy \end{aligned}$ <p>vector inicial = $[0, 0, 0]^T$ root = $[1.09888, 0.36764, 0.14493]^T$ tol = $1e-04$</p>		
Iteración	Método de Newton	Método de BFGS
1	0.57282	0.57282
2	0.11749	0.22491
3	0.026388	0.15583
4	0.0060876	0.073787
5	0.0012636	0.049503
6	1.6177e-04	0.022804
7	4.8173e-06	0.016640
8	-	0.0080466
9	-	0.0055028
10	-	0.0026271
11	-	0.0016407
12	-	7.7376e-04
13	-	4.7266e-04
14	-	2.3067e-04
15	-	1.3929e-04
16	-	6.8806e-05

Cuadro comparativo de la norma Euclidiana para cada nuevo punto por iteración

Comentarios: En ambas pruebas no ocurre que se cumplan las condiciones para una convergencia local de velocidad q-superlineal, por lo tanto, la diferencia del número de iteraciones requerida por el método de BFGS es notable.

Implementación

```
function [i,x1,l_error] = Newton(x, MaxIter, error,n)
    l_error = [];
    for i = 0:MaxIter
        F = F1(x',n);
        A = A1(x',n);
        p = -A\F;
        x1 = x + p;
        newF = F1(x1,n);
        l_error = cat(2,norm(newF),l_error);
        if(l_error(1) < error);
            break
        end
        x = x1;
    end
end
```

(a)

```
function [i,x1,l_error] = Newton(x, MaxIter, error,n)
    l_error = [];
    newF = F1(x',n);
    for i = 0:MaxIter
        F = newF;
        A = A1(x',n);
        p = -A\F;
        x1 = x + p;
        newF = F1(x1,n);
        l_error = cat(2,norm(newF),l_error);
        if(l_error(1) < error);
            break
        end
        x = x1;
    end
end
```

(b)

- (a) Métodos iterativos en la bibliografía
- (b) Método con menos costo por iteración

Un detalle a destacar en todos los métodos implementados para esta tarea es que en la bibliografía se describen los métodos como en la figura (a), esto implica que para cada nueva iteración se evaluará la función en el vector x cuando éste valor x es el vector calculado en la iteración anterior, por lo que se estaría evaluando la función cuando ya se ha evaluado previamente y fue almacenado en la variable $newF$. Esta mejora fue aplicada en cada uno de los métodos realizados.

Referencias

- [1] Biswa N. Datta, Luis M. Hernández-Ramos y Marcos Raydan. *Análisis Numérico. Teoría y Práctica*. [2018]