Instituto de Estadística
Pontificia Universidad Católica de Valparaíso

Computación Estadística III

Métodos unidimensionales

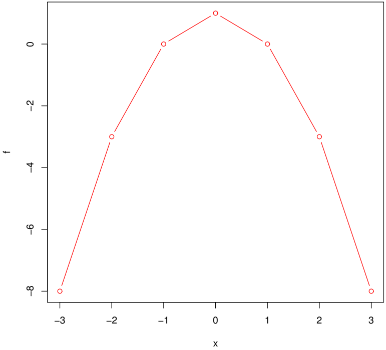
Daira Velandia[1] M. & Juan Zamora O.[2]
[1]daira.velandia , [2]juan.zamora *@pucv.cl*

5 de septiembre de 2018

Función unimodal

Una función f es (estrictamente) unimodal con moda (máximo) en x si y solo si f es estrictamente creciente para $y < x$ y estrictamente decreciente para $x < y$.

$$f(x) = -x^2 - 1$$



- Encontrar los máximos y mínimos de la función en el intervalo dado. Despues, graficar e identicar los puntos de la gráfica donde se encuentren los

$$f(x) = 3x^4 - 4x^3, x \in [-1, 2]$$

Dada una función suficientemente diferenciable $f : A \subset \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$, definida en un intervalo abierto de $\mathbb{R}$, el procedimiento para hallar los extremos de esta función es el siguiente:

1. Se halla la primera derivada de f, $f'(x)$.
2. Se halla la segunda derivada de f, $f''(x)$.
3. Se iguala la primera derivada a 0, $f'(x) = 0$.
4. Se despeja la variable independiente y se obtienen todos los valores posibles de la misma:

$$X = \left\{ x_1, x_2, \ldots, x_n | f'(x_i) = 0 \quad \forall i = 1, 2, \ldots, n \right\}.$$

5. Se halla la imagen de cada x_i sustituyendo la variable independiente en la función.
6. Ahora, en la segunda derivada, se sustituye cada x_i:

   6.1 Si $f''(x_i) < 0$, se tiene un máximo en el punto $M(x_i, f(x_i))$.

   6.2 Si $f''(x_i) > 0$, se tiene un mínimo en el punto $m(x_i, f(x_i))$.

   6.3 Si $f''(x_i) = 0$, debemos sustituir x_i en las sucesivas derivadas hasta sea distinto de cero. Cuando se halle la derivada para la que x_i no sea nulo, hay que ver qué derivada es:

- Si el orden de la derivada es par, se trata de un extremo local; un máximo si $f^n(x_i) < 0$ y un mínimo si $f^n(x_i) > 0$,
- Si el orden de la derivada es impar, se trata de un punto de inflexión, pero no de un extremo.

- Sea $f(x) = 2x - 3x^{\frac{2}{3}}$
  1. Grafique f en $[-1, 3]$.
  2. Calcule la derivada en $x = 0$.

Una función es derivable (o diferenciable) en x si su derivada en x existe, y derivable en un intervalo abierto (a, b) si es derivable en todos y cada uno de los puntos del intervalo.

  3. ¿Es f diferenciable?.
  4. ¿Puede aplicar el procedimiento dado anteriormente para encontrar el máximo de la función $f(x)$?

¿Puede encontrarse el máximo de una función f si f' no es conocida o la información es poco confiable?

Busqueda en lattice

Problema: Encontrar el máximo de una función unimodal f en un conjunto discreto de puntos $\{1, 2, \ldots, m\}$ (un lattice).

Ejemplo 1

Sea $f(x) = 2 - |x - 2|$, determine la moda de la función.

m	1	2	3	4	5	6	7
f	1	0	-1	-2	-3	-4	-5

La estrategia de busqueda en lattice se describe como:

1. Encontrar estrategias de buen fin determinar la moda en un pequeño conjunto de puntos y luego
2. Emplear inducción hacia atrás para la iniciar la estrategia correcta para alcanzar el resultado optimo.

Estrategia optima significa menos evaluaciones de la función f que podrían resolver el problema.

Ejemplo 2

Suponga que se evaluó la función f en 12 puntos y se obtuvo los resultados dados en la siguiente tabla:

m	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
f	0.004	0.321	0.1156	0.2580	0.3976	0.4463	0.3727	0.2312	0.1040	0.0321	0.0061	0.0005

¿Aplique el procedimiento de búsqueda en lattice para determinar la moda?

Números de Fibonacci

El misterio de la estrategia optima en la búsqueda en lattice es develado con la introducción de los números de Fibonacci.

n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
F_n	1	2	3	5	8	13	21	34	55	89

Cuadro 1: Números de Fibonacci

La sucesión comienza con los números 0 y 1 y a partir de estos, cada término es la suma de los dos anteriores.

$$F_0 = F_1 = 1, F_2 = 2, F_3 = 3, F_4 = 5, F_5 = 8, \ldots, F_{n+1} = F_{n-1} + F_n$$

La estrategia optima para la búsqueda del máximo de una función unimodal en un lattice de puntos $\{1, 2, \ldots, m = F_n - 1\}$ es comenzar evaluando en los puntos F_{n-2} y F_{n-1}.

- Si $f(F_{n-2}) > f(F_{n-1})$, es decir, el punto de la izquierda es mayor, entonces los puntos $\{F_{n-1}, \ldots, m\}$ son descalificados dejando el subproblema con el conjunto $\{1, \ldots, F_{n-1} - 1\}$ y con la evaluación de F_{n-2} pecfectamente colocada.
- Si $f(F_{n-2}) < f(F_{n-1})$, entonces el subproblema tiene el conjunto $\{F_{n-2} + 1, \ldots, F_{n-1}\}$, el cual también tiene $F_{n-1} - 1$ elementos y con la evaluación de F_{n-1} pecfectamente colocada.

Un problema con F_{n-1} puntos requiere $n-1$ evaluaciones a resolver.

- Si los valores de la función son los mismos en F_{n-2} y F_{n-1}, entonces, dado que la función es estrictamente unimodal, la moda debe estar entre los dos puntos (en este caso no importa que parte es descartada).
- Si el número de puntos m para el problema a mano no es uno menos que el número de Fibonacci, entonces rellenar el enrejado con puntos en cualquiera de los extremos para llegar a uno menos que el número de Fibonacci, donde el valor de la función en cualquiera de esos puntos adicionales es $-\infty$.

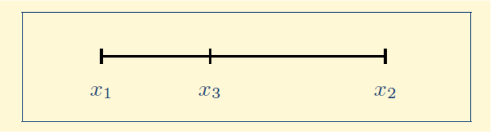
Método de la sección dorada

Ahora el problema consiste en buscar el máximo de una función unimodal en un conjunto continuo, como el intervalo unidad $(0,1)$.

La estrategia de este método se basa en tres puntos iniciales: dos considerados los extremos de un intervalo $(x_1 \quad y \quad x_2)$ y el tercero (x_3) entre los dos primeros de tal suerte que relación entre la distancia de este punto interno al extremo $x_2 (x_2 - x_3)$ y la distancia entre los extremos $(x_2 - x_1)$ es siempre una constante:

$$\frac{x_2 - x_3}{x_2 - x_1} = \tau = 0{,}618034\ldots$$

Note que el punto x_3 divide al segmento $[x_1 : x_2]$ en dos partes: la parte $[x_1 : x_3]$ es más pequeña que la parte $[x_3 : x_2]$: el segmento $[x_3 : x_2]$ es el $61{,}80\,\%$ de $[x_1 : x_2]$, mientras que $[x_1 : x_3]$ tiene una longitud que es el $38{,}19\,\%$.



El método itera generando un siguiente punto x_4 en $[x_3 : x_2]$ (la parte más amplia) de manera que se cumple:

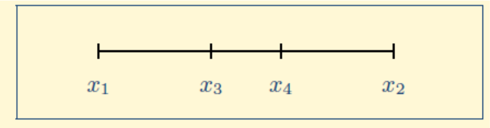
$$\frac{x_4 - x_1}{x_2 - x_1} = \tau$$

Note que las fórmulas convenientes para el cálculo de x_3 y x_4 son:

$$x_4 = (1-\tau)x_1 + \tau x_2$$

$$x_3 =_1 +(1-\tau)x_2$$

la razón es porque en estas fórmulas no se requiere que $x_1 < x_2$.



Dependiendo de la función a maximizar, el algoritmo escoge tres puntos de los cuatro disponibles de manera que la situación se repite en las proporciones de los intervalos. En general, si I_i es la longitud del intervalo en la iteración i se cumple que:

$$I_n = \tau^{n-1} I_1$$

Por tanto, conociendo el intervalo inicial (I_1) y sabiendo a qué precisión se desea estimar el punto (I_n), es fácil estimar el total de iteraciones requeridas para que este método se aproxime al valor requerido:

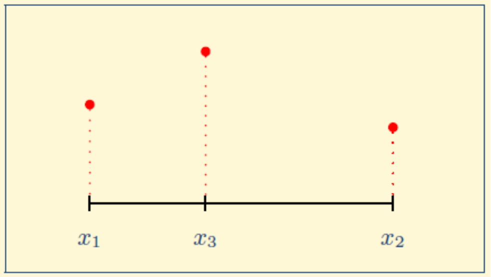
$$n = 1 + \frac{\ln(I_n) - \ln(I_1)}{\ln(\tau)}$$

Ubicación del intervalo

El método de la sección dorada requiere de la ubicación de los tres primeros puntos $x_1, x_2 \quad y \quad x_3$ como se describen anteriormente. Cuando el método se aplica a la determinación de un máximo de una función $f(x)$, los puntos deben satisfacer:

$$f(x_1) < f(x_3) \quad y \quad f(x_3) \geq f(x_2)$$

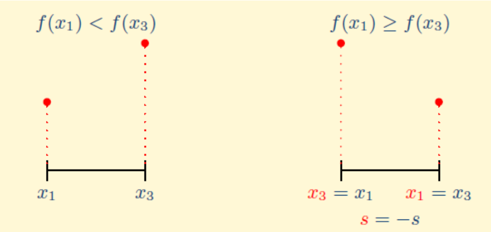
Es decir, la función sube y cae.



La estrategia inicia a partir de un punto x_1 y teniendo un incremento de x inicial s. Se genera un siguiente punto

$$x_3 = x_1 + s$$

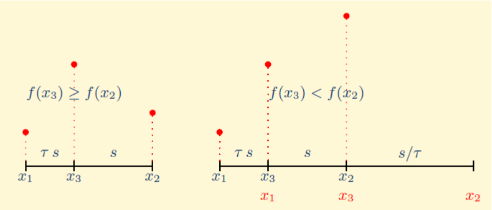
Si $f(x_1) \geq f(x_3)$ habrá que buscar hacia atrás cambiando intercambiando los puntos y el signo del incremento. Si $f(x_1) < f(x_3)$, el incremento se agranda en la proporción τ por medio de la fórmula $s = \frac{s}{\tau}$.

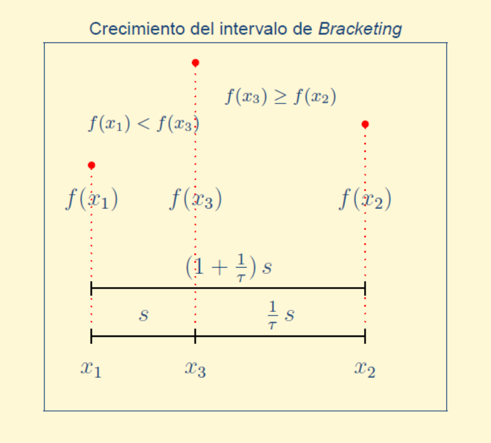


Un siguiente punto se genera hacia adelante

$$x_2 = x_3 + s$$

Si $f(x_3) \geq f(x_2)$ los tres puntos buscados están determinados. Si $f(x_3) < f(x_2)$, entonces el procedimiento se repite tomando $x_1 = x_3, x_2 = x_3$ y $s = \frac{s}{\tau}$. Observe que el intervalo de bracketing va creciendo en la proporción $1/\tau (\approx 1{,}618)$.




Crecimiento del intervalo de *Bracketing*
$f(x_3) \geq f(x_2)$
$f(x_1) < f(x_3)$
$f(x_1)$
$f(x_3)$
$f(x_2)$
$\left(1 + \frac{1}{\tau}\right) s$
s
$\frac{1}{\tau} s$
x_1
x_3
x_2

Ejemplo

Encuentre el máximo de la función $f(x) = -x^2 - 1$ partiendo de $x_1 = -1$ y con un primer intervalo de $s = 0{,}5$

x_1	$f(x_1)$	s	$x_3 = x_1 + s$	$f(x_3)$	$¿f(x_1) < f(x_3)?$
-1	-2	0.5	-0.5	-1.25	si

Cuadro 2: Determinación de la dirección de avance

x_1	$f(x_1)$	s	x_3	$f(x_3)$	$\frac{s}{\tau}$	$x_2 = x_3 + s$	$f(x_2)$	$¿f(x_2) < f(x_3)?$
-1.0	-2.0	0.5	-0.5	-1.25	0.80906	0.30906	-1.09552	no
-0.5	-1.25	0.80906	0.30906	-1.09552	1.30916	1.61822	-3.61864	si

Cuadro 3: Ubicación

$\tau = 0{,}618034$.

Bisección

Se requiere ubicar los puntos de evaluación lo más cerca posible del centro para reducir el intervalo de incertidumbre a la mitad.

Supongamos que la derivada de la función f estuviera disponible, o que pudiera emplearse alguna técnica de diferenciación que convierta el problema de encontrar el máximo de una función unimodal f a encontrar la raíz de una función monótona g en el mismo intervalo. El resultado es la técnica de búsqueda conocida como **bisección o el método de Bolzano**.

Sin pérdida de generalidad, sea (a, b) y $g(a) < 0 < g(b)$. Luego, con una evaluación única en el punto medio $\frac{(a+b)}{2}$, el intervalo de incertidumbre puede reducirse a la mitad. Si $g(\frac{(a+b)}{2}) < 0$ entonces la raíz está en el intervalo $(\frac{(a+b)}{2}, b)$; de lo contrario, el nuevo intervalo es $(a, \frac{(a+b)}{2})$.