

# Ejercicio 1

El método de Newton es altamente eficiente en funciones convexas, pero su comportamiento puede ser impredecible en funciones no convexas. Este ejercicio explora la sensibilidad del método al punto inicial y la naturaleza de los puntos críticos que encuentra. Consideremos la función “Three-Hump Camel”, una prueba estándar para algoritmos de optimización, definida como:

$$f(x,y) = 2x^2 - 1.05x^4 + x^6/6 + xy + y^2$$

## 1. Derivación analítica:

- a. Calcule el vector gradiente  $\nabla f(x,y)$  y la matriz Hessiana  $Hf(x,y)$  de la función.

## 2. Implementación:

- a. implemente el método de Newton multivariado para encontrar los mínimos de esta función. El código debe permitir especificar un punto de partida inicial.

## 3. Experimentación:

- a. Ejecute su algoritmo desde los siguientes tres puntos iniciales:
  - i.  $x_0 = (1.5, 1.0)$
  - ii.  $x_0 = (-1.5, -1.0)$
  - iii.  $x_0 = (0.1, -0.2)$ , cerca de un máximo local
4. Para cada caso, informe el punto final al que converge el algoritmo, el valor de la función en ese punto y el número de iteraciones requeridas.
5. Genere un gráfico de contorno de la función y trace la trayectoria de optimización (los puntos  $x_k$  en cada iteración) para cada uno de los tres puntos iniciales.
6. Discuta por qué diferentes puntos de partida conducen a diferentes resultados y analice el comportamiento del algoritmo cuando se inicia cerca de un punto no mínimo.

Soluciones:

Función de manera de Código de lenguaje R

```
1 f_objetivo <- function(x,y){
2   return (2*(x**2) - 1.05*(x**4) + ((x**6)/6) + x*y + y**2 )
3 }
4 #-----
5
6 # definir parametros
7 f <- function(param){
8   x <- param[1]
9   y <- param[2]
10
11   return(f_objetivo(x,y))
12 }
13 #-----
```

Gradiente de la función y se matriz Hessiana mediante código de lenguaje R

```
14
15 # definimos el tirnagulo F
16 gran_f <- function(param){
17   x <- param[1]
18   y <- param[2]
19
20   dx <- 4*x - (1.05*4*(x**3)) + (x**5) + y
21   dy <- x + 2*y
22
23   return(c(dx,dy))
24 }
25 #-----
26
27 # Definimos la matriz hessianade la función
28 hess_f<-function(param){
29   x <-param[1]
30   y <-param[2]
31
32   # Segundas derivadas
33   d2x <- 4 - 1.05*12*(x**2) + 5*(x**4)
34   d2y <- 2
35   dxdy <- 1
36
37   return(matrix(c(d2x, dxdy,
38                   dxdy, d2y),
39                 ncol = 2, byrow = TRUE))
40 }
41
42 #-----
```

Cómo obtener el nuevo X mediante código en lenguaje R

```
58
59 ▾ for (i in 1:max_iter) {
60
61   #guardamos los parametros "nuevos"
62   historial_x[i] <- x_actual[1]
63   historial_y[i] <- x_actual[2]
64   historial_f[i] <- f(x_actual)
65 ▾   #-----
66
67   #  $X = (hessiano^{-1} * gradiente f)$ 
68   x_nuevo <- x_actual - solve(hess_f(x_actual)) %*% gran_f(x_actual)
69 ▾   #-----
70
71 ▾   if (norm(gran_f(x_nuevo), "2") < tol){
72     cat("Convergió en iteración:", i, "\n")
73     break
74 ▾   }
75 ▾   #-----
76
77   x_actual <- x_nuevo
78 ▾ }
79
```

X inicial en el punto (1.5 , 1)

```
> print(resultados)
$punto_minimo
[1] 1.7475524 -0.8737762

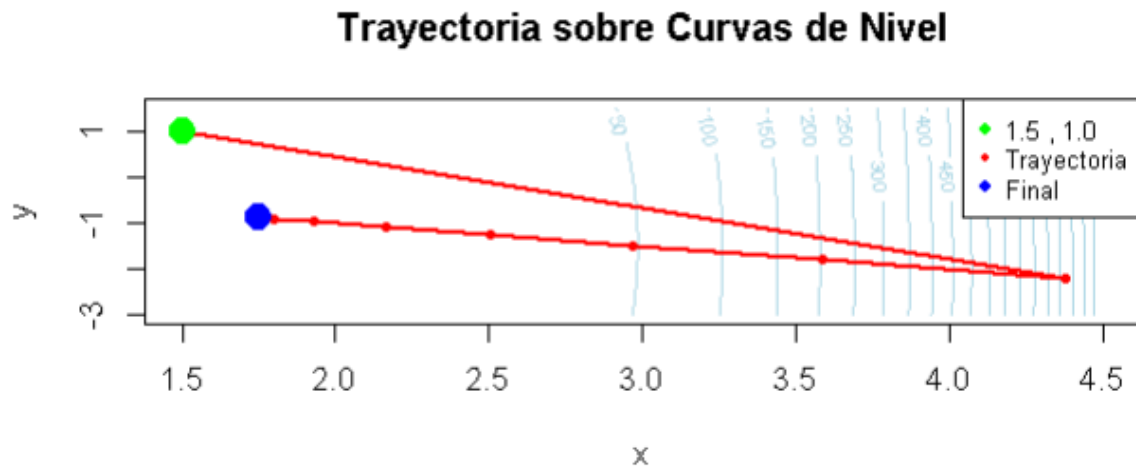
$valor_minimo_Fx
[1] 0.2986384

$iteraciones
[1] 10

$gradiente
[1] 4.292686e-07

>
```

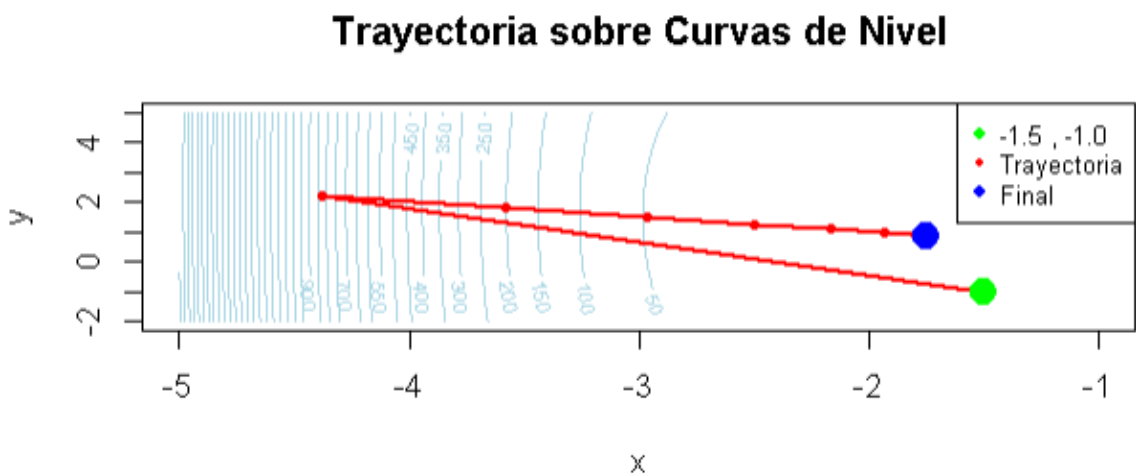
Gráfico



X inicial en punto (-1.5 , -1)

```
$punto_minimo  
[1] -1.7475524  0.8737762  
  
$valor_minimo_Fx  
[1] 0.2986384  
  
$iteraciones  
[1] 10  
  
$gradiente  
[1] 4.292686e-07
```

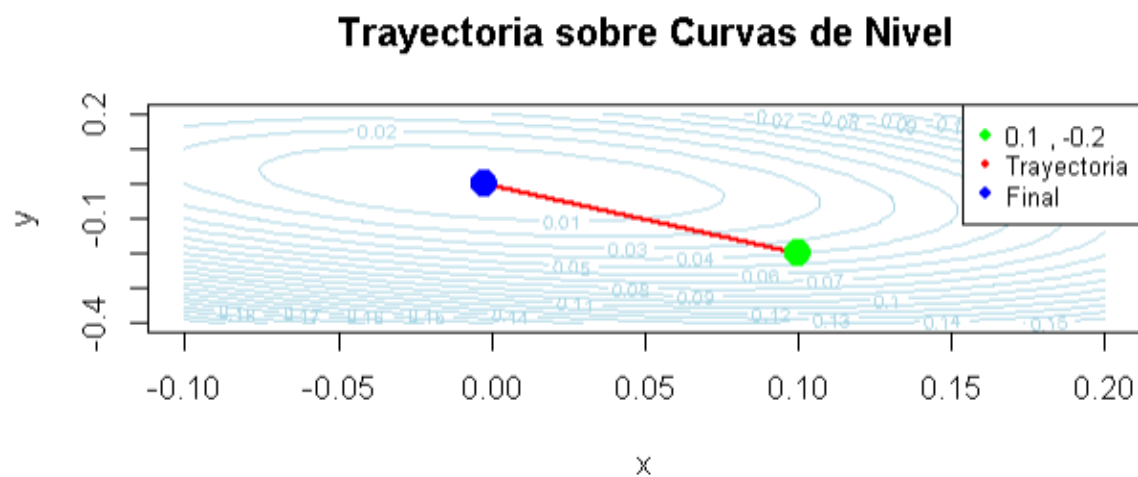
Gráfico



X inicial en el punto (0.1 , -0.2)

```
$punto_minimo  
[1] 3.649305e-08 -1.824652e-08  
  
$valor_minimo_Fx  
[1] 2.330549e-15  
  
$iteraciones  
[1] 2  
  
$gradiente  
[1] 1.277257e-07
```

Gráfico



La razón de porqué distintos inicios generan distintos puntos mínimos es porque cada uno es mínimo pero puede ser unos locales y el otro global, y esta caída en un mínimo local y no en uno global se debe que esta función solo se acerca el mínimo más cercano de su punto inicial por eso también si elegimos un punto cerca del mini global se obtiene aquel mínimo, pero si elegimos un punto inicial lejano al mínimo global lo más probable es que llegue a un mínimo local. También hay que mencionar que entre más lejano esté el punto inicial de un mínimo ( ya sea local o global) más iteraciones le tomará llegar

# Ejercicio 2

En ingeniería, es común necesitar ajustar un modelo teórico a datos experimentales. Este ejercicio consiste en usar el método de Newton para encontrar los parámetros de un modelo de oscilación 1 amortiguada, un problema fundamental en el procesamiento de señales y el control de sistemas. Se ha medido una señal que sigue el modelo:

$$y(t) = Ae^{-\lambda t} \cos(\omega t + \phi)$$

El objetivo es encontrar el vector de parámetros  $\beta = [A, \lambda, \omega, \phi]$  que mejor se ajuste a un conjunto de mediciones  $(t_i, y_i)$ . Para ello, se debe minimizar la suma de los errores al cuadrado (problema de mínimos cuadrados no lineales):

$$S(\beta) = \sum_{i=1}^m (y_i - Ae^{-\lambda t_i} \cos(\omega t_i + \phi))^2$$

## 1. Base de datos dada

```
158 #-----
159 # Base de datos
160 t_data <- c(0.01585558, 0.07313676, 0.20858986, 0.33697873, 0.52537301, 0.6164369,
161 0.67744082, 0.77372499, 1.24299318, 1.28798218, 1.38339642, 1.38848687,
162 1.42076869, 1.46404696, 1.50057502, 1.62121603, 1.70114607, 1.94117773,
163 1.96511879, 2.22784082, 2.27602643, 2.34135203, 2.34449634, 2.41064538,
164 2.46308469, 2.49806005, 2.56570644, 2.59826844, 2.61573859, 3.05457166,
165 3.28683793, 3.33196052, 3.80886595, 3.84728936, 4.00492237, 4.00529043,
166 4.01024845, 4.23964951, 4.38247821, 4.43925851, 4.48290057, 4.56513696,
167 4.58015693, 4.61305888, 4.64543839, 4.6630282, 4.73071767, 4.82119210,
168 4.93766455, 4.95449219)
169
170 y_data <- c(3.30604951, 1.63304262, -2.46669298, -4.67216227,
171 -2.65183759, -0.11931208, 1.58435298, 3.20604040, -2.25300509,
172 -3.43019723, -4.02265257, -3.46359790, -3.36545235, -2.97468372,
173 -2.74451778, 0.12791535, 1.61615275, 2.82364845, 2.71400979,
174 -2.18062097, -2.39741066, -2.82599835, -3.27902725, -3.04151353,
175 -2.52012235, -2.40448523, -0.90204355, -0.69802758, -0.45049201,
176 0.99303212, -2.27801465, -2.64637196, 2.37675322, 2.28167791,
177 1.25167305, 1.60197788, 1.19320954, -1.10650603, -2.31930834,
178 -1.98134768, -1.55041113, -0.89272659, -0.75329989, -0.09842116,
179 -0.05934957, 0.67373312, 0.93814889, 1.54737425, 1.69100012,
180 1.18712468)
181
```

2. **.Derivación para el método de Newton:** Minimizar  $S(\beta)$  con el método de Newton requiere su gradiente y su Hessiana. En problemas de mínimos cuadrados, la Hessiana se puede aproximar eficientemente (aproximación de Gauss-Newton) como

$$HS(\beta) \approx 2J^T J,$$

donde J es la matriz Jacobiana del modelo.

- Derive las expresiones para el vector de residuos:

$$r_i(\beta) = y_i - y(t_i, \beta)$$

- Derive las expresiones para la matriz Jacobiana:

$$J_{ij} = \partial r_i / \partial \beta_j$$

- Implemente funciones en R o Python que calculen el gradiente  $\nabla S(\beta) = -2J^T r$  y la Hessiana aproximada  $HS(\beta)$ .

### 3. Implementación y ejecución:

- Adapte su código del método de Newton para usar el gradiente y la Hessiana aproximada que acaba de derivar.
- Inicie la optimización desde un punto razonable pero no exacto (por ejemplo,  $\beta_{\text{actual}} = [4.5, 0.3, 6.0, 0.5]$ ).
- Ejecute el algoritmo para encontrar los parámetros óptimos  $\beta_{\text{estimado}}$ .

### 4. Análisis y visualización:

- Imprima los parámetros estimados y compárelos con los valores verdaderos, para este ejercicio, los valores verdaderos de los parámetros son:  $A = 5$ ,  $\lambda = 0.2$ ,  $\omega = 2\pi$  y  $\phi = \pi/4$ .
- Cree un gráfico que muestre
  - Los datos ruidosos originales (como un diagrama de dispersión).
  - La curva del modelo con los parámetros verdaderos
  - La curva del modelo ajustado con los parámetros estimados por su algoritmo.
- Discuta la precisión del ajuste y la eficacia del método para este problema de ingeniería.

Solución:

Función objetivo en lenguaje de R

```
1 modelo <- function(A, landa, w, teta, t) {  
2  
3   A * exp(-landa * t) * cos(w * t + teta)  
4 }  
5  
6  
7 funcion_objetivo <- function(beta, t_data, y_data) {  
8  
9   # parametros  
10  A <- beta[1]  
11  landa <- beta[2]  
12  w <- beta[3]  
13  teta <- beta[4]  
14  #-----  
15  # Nuevo Y o prediccion de Y  
16  y_pred <- A * exp(-landa * t_data) * cos(w * t_data + teta)  
17  #-----  
18  #  
19  sum((y_data - y_pred)^2)  
20 }
```

## Sin Jacobiano

### Código de Gradiente de la función

```
22 ▾ gradiente <- function(beta, t_data, y_data) {  
23   # Parametros  
24   A <- beta[1]  
25   landa <- beta[2]  
26   w <- beta[3]  
27   teta <- beta[4]  
28 ▾   #-----  
29   # Cuantos datos hay en t_data ( un "Len" de python)  
30   n <- length(t_data)  
31 ▾   #-----  
32   # nuevo gradiente  
33   grad <- numeric(4)  
34  
35 ▾   for(i in 1:n) {  
36     # rescribiendo t e Y  
37     t <- t_data[i]  
38     y <- y_data[i]  
39 ▾     #-----  
40     # Predicción  
41     exp_term <- exp(-landa * t)  
42     cos_term <- cos(w * t + teta)  
43     sin_term <- sin(w * t + teta)  
44     y_pred <- A * exp_term * cos_term  
45 ▾     #-----  
46     # Residuo  
47     r <- y - y_pred  
48 ▾     #-----  
49     # Derivadas parciales respecto a cada parámetro  
50  
51     dy_dA <- exp_term * cos_term           #derivada de Y segun A  
52     dy_dlanda <- -A * t * exp_term * cos_term #derivada de Y segun landa  
53     dy_dw <- -A * exp_term * sin_term * t    #derivada de Y segun W  
54     dy_dteta <- -A * exp_term * sin_term     #derivada de Y segun Teta  
55 ▾     #-----  
56     # Gradiente (regla de la cadena [N000 de nuevo jajajjja XD])  
57     grad[1] <- grad[1] - 2 * r * dy_dA  
58     grad[2] <- grad[2] - 2 * r * dy_dlanda  
59     grad[3] <- grad[3] - 2 * r * dy_dw  
60     grad[4] <- grad[4] - 2 * r * dy_dteta  
61 ▾   }  
62  
63   return(grad)  
64 ▾ }
```



## Código de la Matriz Hessiana normal

```
66 hessiana <- function(beta, t_data, y_data) {  
67  
68   # Parámetros  
69   A <- beta[1]  
70   landa <- beta[2]  
71   w <- beta[3]  
72   teta <- beta[4]  
73   #-----  
74   # Cuántos datos hay en t_data ( un "Len" de python)  
75   n <- length(t_data)  
76   #-----  
77   #Matris para la hessiana  
78   H <- matrix(0, nrow = 4, ncol = 4)  
79  
80   for(i in 1:n) {  
81     # rescribiendo t segun la base de datos  
82     t <- t_data[i]  
83     #-----  
84     # Predicción  
85     exp_term <- exp(-landa * t)  
86     cos_term <- cos(w * t + teta)  
87     sin_term <- sin(w * t + teta)  
88     #-----  
89     # Derivadas parciales respecto a cada parámetro  
90     dy_dA <- exp_term * cos_term #derivada de Y segun A  
91     dy_dlanda <- -A * t * exp_term * cos_term #derivada de Y segun landa  
92     dy_dw <- -A * exp_term * sin_term * t #derivada de Y segun w  
93     dy_dteta <- -A * exp_term * sin_term #derivada de Y segun Teta  
94     #-----  
95     # Derivadas parciales respecto a cada parámetro  
96     dy_dA <- exp_term * cos_term #derivada de Y segun A  
97     dy_dlanda <- -A * t * exp_term * cos_term #derivada de Y segun landa  
98     dy_dw <- -A * exp_term * sin_term * t #derivada de Y segun w  
99     dy_dteta <- -A * exp_term * sin_term #derivada de Y segun Teta  
100    #-----  
101    # Derivadas de segundo orden (aproximación de Gauss-Newton)  
102    # H = 2 * J**T * J (ignorando términos de segundo orden con residuos)  
103    J <- c(dy_dA, dy_dlanda, dy_dw, dy_dteta)  
104    H <- H + 2 * outer(J, J)  
105  }  
106  
107  return(H)  
108 }
```

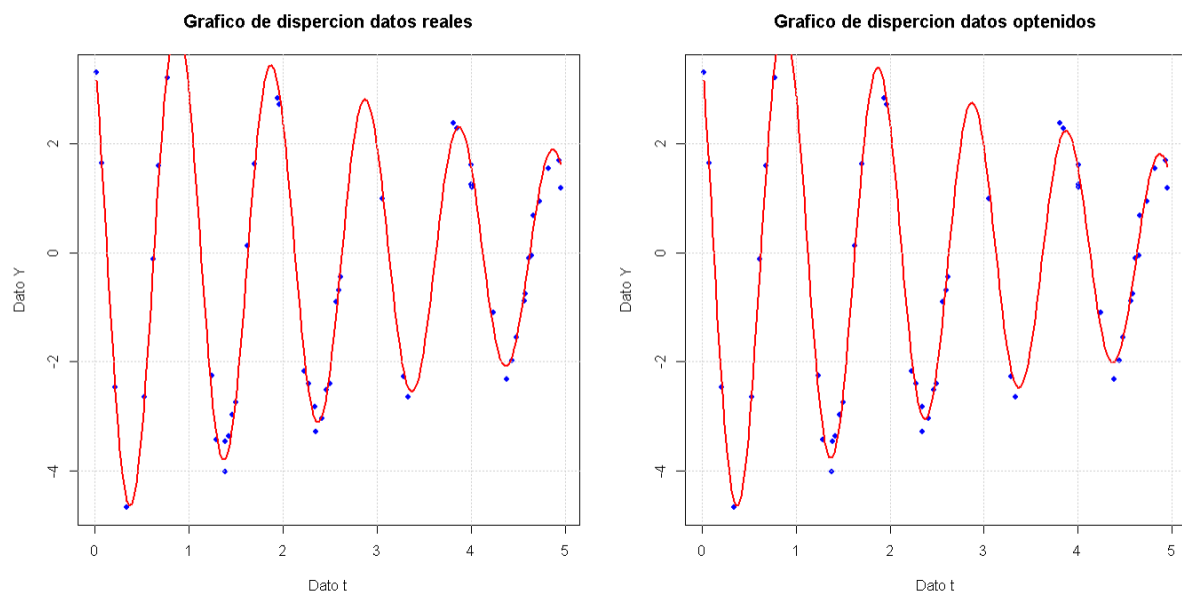
Código de Newton para calcular los nuevos valores de A, Lambda, Omega y Phi

```
105 > newton <- function(beta_0, t_data, y_data, tol = 1e-6, max_iter = 100) {  
106   #BETA tiene los valores de A, landa, W y TETA  
107   beta <- beta_0  
108   historial <- matrix(NA, nrow = max_iter + 1, ncol = 5)  
109   colnames(historial) <- c("iter", "A", "landa", "w", "teta")  
110  
111   historial[1, ] <- c(0, beta)  
112  
113   for(k in 1:max_iter) {  
114     grad <- gradiente(beta, t_data, y_data)  
115     H <- hessiana(beta, t_data, y_data)  
116  
117     # Resolver  $H * \delta = -grad$   
118     delta <- tryCatch({  
119       solve(H, -grad)  
120     }, error = function(e) {  
121       # Si la Hessiana es singular (signo incorrecto), usar pseudo-inversa  
122       MASS::ginv(H) %*% (-grad)  
123     })  
124  
125     beta_nuevo <- beta + delta  
126     historial[k + 1, ] <- c(k, beta_nuevo)  
127   }
```

Datos de los datos obtenidos sin la Matriz Jacobiana

```
=== RESULTADOS Sin JACOBIANO===  
> cat("A obtenido      =",resultado$beta[1],"    y A buscado      =",A_real,"\n")  
A obtenido      = 5.024849    y A buscado      = 5  
> cat("Su precision es =",precision_a,"\n")  
Su precision es = 99.50302  
> cat("Landa obtenido =",resultado$beta[2],"    y Landa buscad =",landa_rea  
l,"\n")  
Landa obtenido = 0.2091545    y Landa buscad = 0.2  
> cat("Su precision es =",precision_landa,"\n")  
Su precision es = 95.42277  
> cat("W obtenido      =",resultado$beta[3],"    y W buscado      =",w_real,"\n")  
W obtenido      = 6.279533    y W buscado      = 6.283185  
> cat("Su precision es =",precision_w,"\n")  
Su precision es = 99.94188  
> cat("teta obtenido  =",resultado$beta[4],"    y teta buscado =",teta_real,"\n")  
teta obtenido  = 0.7909172    y teta buscado = 0.7853982  
> cat("Su precision es =",precision_teta,"\n")  
Su precision es = 99.2973  
> cat("Iteraciones necesarias = ",resultado$iteraciones,"\n")  
Iteraciones necesarias = 8  
> cat("Valor de la Funcion( $\beta$ ) =", resultado$valor_f, "\n")  
Valor de la Funcion( $\beta$ ) = 2.029891  
> cat("La precision del progra es =",precision_total)  
La precision del progra es = 99.50302
```

## Gráficos de los resultados sin Jacobiano



## Con Jacobiano

### Calculo de Jacobiano

```
22 ▾ #-----
23 ▾ calcular_jacobiana <- function(beta, t_data) {
24   # Parametros
25   A <- beta[1]
26   landa <- beta[2]
27   w <- beta[3]
28   teta <- beta[4]
29 ▾ #-----
30
31   # Cuantos datos hay en t_data ( un "Len" de python)
32   n <- length(t_data)
33 ▾ #-----
34
35   # Creacion de la matriz jacobiana
36   J <- matrix(0, nrow = n, ncol = 4)
37
```

```

36 J <- matrix(0, nrow = n, ncol = 4)
37
38 for(i in 1:n) {
39   # rescribiendo t e Y
40   t <- t_data[i]
41
42   #-----
43   # Predicción
44   exp_term <- exp(-landa * t)
45   cos_term <- cos(w * t + teta)
46   sin_term <- sin(w * t + teta)
47
48   #-----
49   # Derivadas parciales respecto a cada parámetro
50   J[i, 1] <- -exp_term * cos_term #derivada de J segun A
51   J[i, 2] <- A * t * exp_term * cos_term #derivada de J segun landa
52   J[i, 3] <- A * exp_term * sin_term * t #derivada de J segun w
53   J[i, 4] <- A * exp_term * sin_term #derivada de J segun Teta
54
55 }
56 return(J)
57 }
58 #-----

```

### Cálculo de Residuo ( r )

```

60 calcular_r <- function(beta, t_data, y_data) {
61   A <- beta[1]
62   landa <- beta[2]
63   w <- beta[3]
64   teta <- beta[4]
65   #-----
66
67   # Predicciones del modelo
68   y_pred <- A * exp(-landa * t_data) * cos(w * t_data + teta)
69   #-----
70
71   # Vector de residuos
72   r <- y_data - y_pred
73
74   return(r)
75 }
76 #-----

```

### Gradiente de la función con Jacobiano

```

78 gradiente <- function(beta, t_data, y_data) {
79   # Calcular jacobiana y residuos
80   J <- calcular_jacobiana(beta, t_data)
81   r <- calcular_r(beta, t_data, y_data)
82   #-----
83
84   # Gradiente:  $\nabla S(\theta) = -2 \cdot J^T \cdot r$ 
85   grad <- 2 * t(J) %*% r
86   #-----
87
88   # Convertir matriz (4x1) a vector
89   return(as.vector(grad))
90 }
91 #-----

```

### Código de la matriz Hessiana con Jacobiano

```
93 ▾ hessiana <- function(beta, t_data, y_data) {  
94   # Calcular Jacobiana  
95   J <- calcular_jacobiana(beta, t_data)  
96 ▾   #-----  
97  
98   # Hessiana aproximada:  $H \approx 2 \cdot J^T \cdot J$   
99   H <- 2 * t(J) %*% J  
100  
101   return(H)  
102 ▴ }  
103 ▾ #-----  
104
```

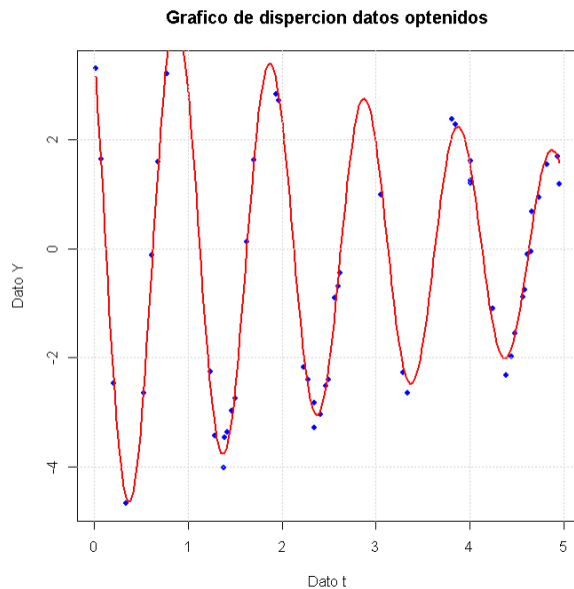
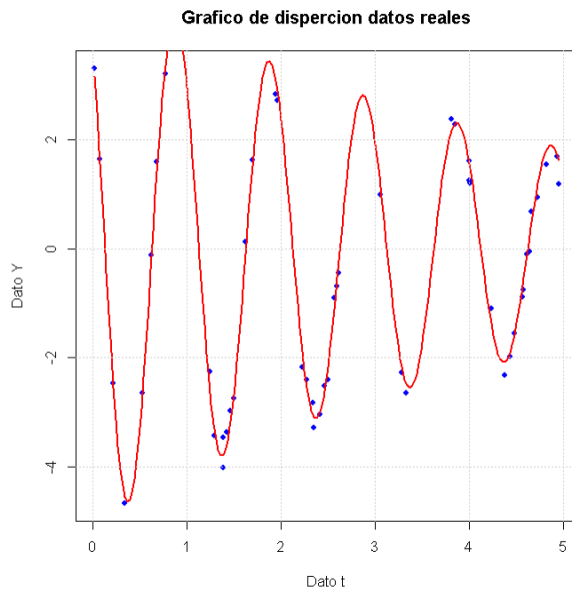
### Código de Newton para calcular los nuevos valores de A, Lambda, Omega y Phi

```
105 ▾ newton <- function(beta_0, t_data, y_data, tol = 1e-6, max_iter = 100) {  
106   # BETA tiene los valores de A, lambda, w y TETA  
107   beta <- beta_0  
108   historial <- matrix(NA, nrow = max_iter + 1, ncol = 5)  
109   colnames(historial) <- c("iter", "A", "lambda", "w", "teta")  
110  
111   historial[1, ] <- c(0, beta)  
112  
113 ▾   for(k in 1:max_iter) {  
114     grad <- gradiente(beta, t_data, y_data)  
115     H <- hessiana(beta, t_data, y_data)  
116  
117     # Resolver  $H \cdot \text{delta} = -\text{grad}$   
118 ▾     delta <- tryCatch({  
119       solve(H, -grad)  
120 ▾     }, error = function(e) {  
121       # Si la Hessiana es singular (signo incorrecto), usar pseudo-inversa  
122       MASS::ginv(H) %*% (-grad)  
123 ▴     })  
124  
125     beta_nuevo <- beta + delta  
126     historial[k + 1, ] <- c(k, beta_nuevo)  
127
```

## Datos de los datos obtenidos Con la Matriz Jacobiana

```
=== RESULTADOS Con JACOBIANO===
> cat("A obtenido      =",resultado$beta[1],"    y A buscado      =",A_real,"\n")
A obtenido      = 5.024849    y A buscado      = 5
> cat("Su precision es =",precision_a,"\n")
Su precision es = 99.50302
> cat("Landa obtenido =",resultado$beta[2],"    y Landa buscado =",landa_real,
1,"\n")
Landa obtenido = 0.2091545    y Landa buscado = 0.2
> cat("Su precision es =",precision_landa,"\n")
Su precision es = 95.42277
> cat("W obtenido      =",resultado$beta[3],"    y W buscado      =",w_real,"\n")
W obtenido      = 6.279533    y W buscado      = 6.283185
> cat("Su precision es =",precision_w,"\n")
Su precision es = 99.94188
> cat("teta obtenido  =",resultado$beta[4],"    y teta buscado =",teta_real,"\n")
teta obtenido  = 0.7909172    y teta buscado = 0.7853982
> cat("Su precision es =",precision_teta,"\n")
Su precision es = 99.2973
> cat("Iteraciones necesarias = ",resultado$iteraciones,"\n")
Iteraciones necesarias = 8
> cat("Valor de la Funcion( $\beta$ ) =", resultado$valor_f, "\n")
Valor de la Funcion( $\beta$ ) = 2.029891
> cat("La precision del progra es =",precision_total)
La precision del progra es = 99.50302
>
```

## Gráficos de los datos con Matriz Jacobiano



Por alguna razón los resultados obtenidos a través de la Hessiana sin Jacobiano y la Hessiana con Jacobiano dan los mismos resultados para todos los valores.

	Sin Jacobiano	Con Jacobiano	Teórico
A	5.024849	5.024849	5
Landa	0.2091545	0.2091545	0.2
Omega	6.279533	6.279533	6.283185
Phi	0.7909172	0.7909172	0.7853982
Iteraciones	8	8	-----
Valor de la función	2.029891	2.029891	-----

Con esta tabla se puede observar que los datos obtenidos son muy similares a los datos obtenidos.

La precisión obtenida en el programa es de 99.50302%

Como la precisión es alta se puede decir que su eficiencia también es alta

# Ejercicio 3

La principal ventaja de los métodos Quasi-Newton es que evitan el cálculo explícito de la Hessiana, lo que los hace ideales para funciones complejas. En este ejercicio, se utilizará el algoritmo BFGS para explorar la superficie de una función con múltiples mínimos y analizar cómo el punto de partida determina el resultado.

Utilice la función de Himmelblau, una prueba clásica para optimización que tiene cuatro mínimos locales idénticos:

$$f(x,y) = (x^2 + y - 11)^2 + (x + y^2 - 7)^2$$

El valor del mínimo de la función es  $f(x,y) = 0$ . Actividades:

1. 1. Componentes del algoritmo:
  - a. Calcule analíticamente el gradiente  $\nabla f(x,y)$ . En este ejercicio, asumimos que la Hessiana es demasiado compleja o costosa de calcular, justificando el uso de BFGS.
  - b. Implemente el algoritmo Quasi-Newton con la actualización BFGS y la búsqueda de paso por retroceso (backtracking).
2. Exploración de los mínimos:
  - a. Investigue y encuentre las coordenadas de los cuatro mínimos de la función de Himmelblau.
  - b. Ejecute su algoritmo BFGS partiendo de los siguientes tres puntos iniciales:
    - i.  $x_0 = (0,0)$
    - ii.  $x_0 = (-1,3)$
    - iii.  $x_0 = (4,-2)$
3. Análisis y visualización:
  - a. Para cada punto de partida, informe a cuál de los cuatro mínimos converge el algoritmo y cuántas iteraciones fueron necesarias.
  - b. Genere un único gráfico de contorno de la función de Himmelblau.
  - c. En el gráfico, marque la ubicación de los cuatro mínimos teóricos.
  - d. Superponga las trayectorias de optimización de sus tres ejecuciones.
  - e. Discuta cómo la topografía de la función (sus “valles” y “cuencas de atracción”) guía al algoritmo hacia diferentes soluciones dependiendo de dónde comience.



Solución :

Función de manera código en lenguaje Python

```
optimización-matemática-2023 > whisael 2023_23 > Unidad 2 > tarea_2 > Ejercicio_3 > tarea_2_3.py > ...
1  from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D # Necesario para proyecciones 3D
2  from matplotlib.widgets import TextBox
3  import matplotlib.pyplot as plt
4  import numpy as np
5  import random
6  import time
7  # encontrar la funcion
8  # f(x,y) = (x^2 + y -11)^2 + (x + y^2 -7)^2
9
10 |
11 #funcion inicial respecto a X["x","y"]
12 def f(x):
13     return ((x[0]**2 + x[1] -11)**2 + (x[0] + x[1]**2 -7)**2)
14 #-----
```

Gradiente

```
16 #funcion gradiente de la funcion inicial
17 def gradiente_f(x):
18     #el comando "np.array" sirve para definir que el valor sera un vector
19     #separado por la ","
20     dx = ((2*(x[0]**2 + x[1] -11)*(2*x[0])) + 2*(x[0] + x[1]**2 -7))
21     dy = (2*(x[0]**2 + x[1] -11)) + (2*(x[0] + x[1]**2 -7)*(2*x[1]))
22     return np.array([dx,dy])
23 ##-----
24
```

Codigo hessiana

```
58
59 #calcular H nuevo
60 def Hk1(x, xk1, gradiente_f, H):
61     Sk = xk1 - x #calcular Sk= X_nuevo - X_original
62     Yk = gradiente_f(xk1) - gradiente_f(x) #Calcular Yk= Gradeinte de X_nuevo - Gradiente de X_original
63     I = np.identity(len(x)) #I va hacer la matriz identidad
64     # Evitar división por cero
65     Yk_Sk = np.dot(Yk, Sk) #Producto punto entre Yk * Sk
66     if abs(Yk_Sk) < 1e-10: #si este resultado es muy pequeño conseguimos
67         return H #el K nuevo
68     #-----
69     # Fórmula BFGS
70     term1 = I - np.outer(Sk, Yk) /Yk_Sk
71     term2 = I - np.outer(Yk, Sk) /Yk_Sk
72     term3 = np.outer(Sk, Sk) /Yk_Sk
73     #-----
74     Hk_1 = term1 @ H @ term2 + term3
75
76     return Hk_1
77 #-----
78
```

### Codigo Hessiana inversa

```
24
25 #similimar a la matriz hessiana inversa
26 def Pk(Hk, gradiente):
27     # Se usa la multiplicación matricial @
28     pk = -Hk @ gradiente
29     return pk
30 #-----
```

### Codigo para calcular Alpha

```
31
32 #Calcular alpha nuevo
33 def alfa(pk, x, gradiente, funcion_ini):
34     c = 0.0001
35     iteraciones_alpha = 100 #valor para cambiar alpha si es que esta nunca es suficnetemente menor
36     alpha = 1.0
37     Pk_grad = np.dot(gradiente, pk) #para el PC es mas facil hacer esta operacion por separado
38     #-----
39
40     for _ in range(iteraciones_alpha):
41         n = x + (alpha * pk) #se necesita un valor tipo vector para usar la funcion
42         auxiliar = f(n)
43         #mientras que:
44         #La funcion inicial segun el vector N sea mayor a
45         #funcion inicial original + c * alpha y * el gradiente inversa * Pk
46         if auxiliar <= funcion_ini + (c * alpha * Pk_grad):
47             break # Condición cumplida
48         alpha *= 0.5 # Reducir el paso
49
50     return alpha
51 #-----
```

### Codigo de BFGS

```
79 #main
80 def BFGS(x_inicial):
81     #el H inicial es la matriz identidad
82     H = np.identity(2)
83     #-----
84     #el valor inicial de X es el punto -10 y +10
85     x = x_inicial
86     max_iteraciones = 1000
87     tolerancia = 1e-6
88     cont=0
89     #-----
90     # Almacenar trayectoria
91     trayectoria = [x.copy()]
92
93     for i in range(max_iteraciones):
94         cont=cont+1
95         #-----
```

```

95 #-----
96
97 # Calcular función y gradiente
98 funcion = f(x)
99 gradiente = gradiente_f(x)
100 #-----
101
102 # Verificar convergencia
103 norma_grad = np.linalg.norm(gradiente)
104 if norma_grad < tolerancia:
105     print(f"Convergencia alcanzada en iteración {i}")
106     break
107 #-----
108
109 #calcular cosas nuevas
110 pk = Pk(H, gradiente) # Calcular dirección de búsqueda
111 alpha = alfa(pk, x, gradiente, funcion) # Búsqueda de línea
112 X = x1(x, alpha, pk) # Actualizar x
113 H = Hk1(x, X, gradiente_f, H) # Actualizar Hk
114 #-----
115
116 #el X original sera el valor de X nuevo
117 x = X
118 trayectoria.append(x.copy())
119
120 return x, trayectoria

```

Codigo para calcular nuevo X

```

53 #calcular nuevo X
54 def x1(x,alpha,pk):
55     x1= x + (alpha*pk)
56     return(x1)
57 #-----

```

Valores obtenidos del primer punto inicial

```

RESULTADO 1
Punto óptimo encontrado: x = [3. 2.]
Valor de la función: f(x) = 0.0000000000
Gradiente final:  $\nabla f(x)$  = [-3.73510289e-09  6.57180976e-10]
Número de iteraciones: 10
=====

```

Valores obtenidos del segundo punto inicial

```

RESULTADO 2
Punto óptimo encontrado: x = [-2.80511809  3.13131252]
Valor de la función: f(x) = 0.0000000000
Gradiente final:  $\nabla f(x)$  = [-2.98499896e-10  5.00942683e-11]
Número de iteraciones: 7
=====

```

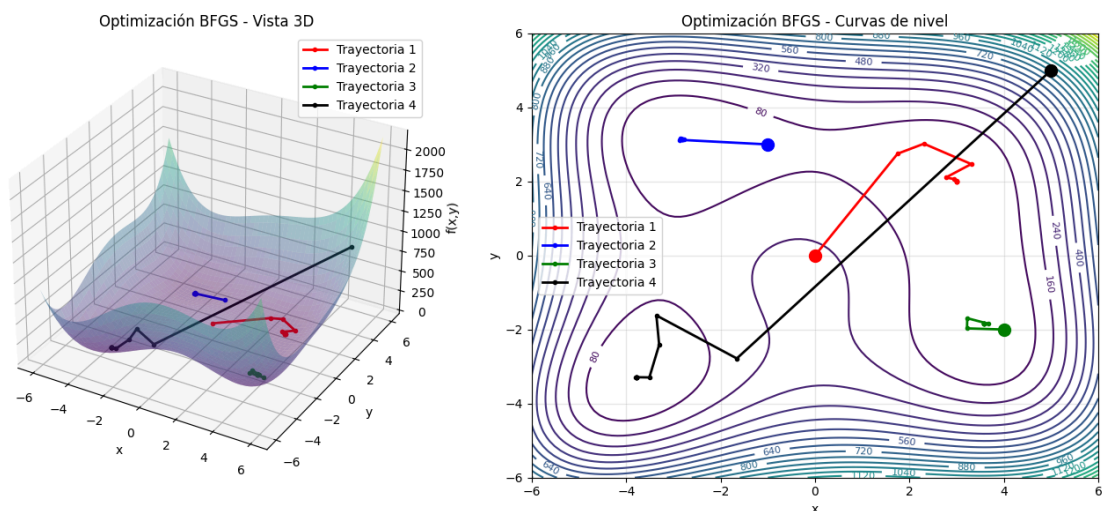
Valores obtenidos del tercer punto inicial

```
RESULTADO 3
Punto óptimo encontrado: x = [ 3.58442834 -1.84812653]
Valor de la función: f(x) = 0.0000000000
Gradiente final:  $\nabla f(x) = [1.70447506e-08 \ 4.05597003e-09]$ 
Número de iteraciones: 9
=====
```

Valores obtenidos del cuarto punto inicial

```
RESULTADO 4
Punto óptimo encontrado: x = [-3.77931025 -3.28318599]
Valor de la función: f(x) = 0.0000000000
Gradiente final:  $\nabla f(x) = [-2.82942214e-07 \ 5.21881036e-07]$ 
Número de iteraciones: 11
```

Gráfico de los puntos iniciales y sus valores



La razón de porque los puntos tienden a sus respectivos mínimos indicados es porque y en especial el punto 4, es porque la función BFGS no busca el mínimo más cercano si el mínimo más estable a través de la predicción de la hessiana y su gradiente, es decir que a través de matriz hessiana estimada se avanza en dirección del gradiente una distancia determinada.

# Ejercicio 4

Cuando la matriz Hessiana no es positiva definida, la dirección de búsqueda del método de Newton puede apuntar hacia un máximo o un punto silla, causando que el algoritmo falle. Una solución práctica es la regularización.

Considere la función:

$$f(x,y) = 0.5x^2 + 2.5y^2 - 2xy - x^3$$

Esta función tiene un mínimo local y un punto silla, lo que la hace interesante para probar la robustez. Actividades:

## 1. Análisis de la Hessiana:

- Calcule la matriz Hessiana  $H_f(x,y)$ .
- Evalúe la Hessiana en el punto  $x_0 = (1.5, 0.5)$ . Calcule sus valores propios (eigenvalues). ¿Es la matriz positiva definida en este punto?

## 2. Implementación estándar:

- Ejecuta el método de Newton estándar comenzando desde  $x_0 = (1.5, 0.5)$ . Describa lo que sucede. ¿Converge el algoritmo a un mínimo?

## 3. Implementación regularizada

- Modifique su algoritmo de Newton para incorporar la técnica de regularización descrita en clases. Específicamente, antes de calcular el paso de actualización, verifique si algún valor propio de la Hessiana es menor o igual a cero. Si es así, modifique la Hessiana sumándole una matriz identidad multiplicada por una constante:  $\text{Modificada} = H + C \cdot I$ , donde  $C$  es un valor pequeño pero suficiente para hacerla positiva definida.

## 4. Comparación:

- Ejecuta el algoritmo regularizado desde el mismo punto de partida  $x_0 = (1.5, 0.5)$ .
- Visualice en un gráfico de contorno las trayectorias del método estándar (si es posible) y del método regularizado.
- Explique por qué la regularización permite al algoritmo converger correctamente hacia un mínimo, mientras que la versión estándar falla o se comporta de manera errática.

Solución :

Función en forma de código en lenguaje R

```
1 # Definimos la función objetivo
2 f <- function(x) {
3   return(0.5*(x[1]**2) + 2.5*(x[2]**2) -2*x[1]*x[2] - x[1]**3 )
4 }
5
6 #-----
```

Gradiente

```
7 # Definimos el vector gradiente de la función
8 gradiente_f <- function(x) {
9   dx <- x[1] - 2*x[2] - 3*x[1]**2
10  dy <- 5*x[2] - 2*x[1]
11  return(c(dx, dy))
12 }
13
14 #-----
```

Hessiana normal

```
14 #-----
15 # Definimos la matriz Hessiana de la función
16 hessiana_f <- function(x) {
17   dxx <- 1 -6*x[1]
18   dxy <- -2
19   dyx <- -2
20   dyy <- 5
21   H <- matrix(c(dxx, dxy,
22                 dyx, dyy ), nrow = 2, byrow = TRUE)
23   return(H)
24 }
25
```

Hessiana regularizada

```
27 # Definimos la matriz Hessiana regularizada de la función
28 hessiana_R <- function(x, delta = 1) {
29   #llamamos a la hessiana normal
30   H <- hessiana_f(x)
31   #conseguimos los numeros de !!!VALORES PROPIOS!!!
32   descomposicion <- eigen(H)
33
34   # Ahora 'delta' está definido dentro del alcance de la función
35   #C = Buscamos el valor máximo de(DESCOMPOSICION y DELTA)
36   #Evitamos que sea exponencial
37   c <- pmax(descomposicion$values, delta)
38
39   I <- diag(nrow(H))
40
41   # Reconstruir la matriz regularizada
42   H_reg <- H - c * I
43   return(H_reg)
44 }
45
```

## Cálculo de nuevo X

```
83 # Calculamos el siguiente punto
84 paso_newton_R <- solve(hessiana_R(x_k_r)) %*% gradiente_f(x_k_r) #H^-1 * F
85 x_k1_r <- x_k_r - paso_newton_R
86
87 # Verificar si hay valores inválidos
88 if (any(is.na(x_k1_r)) || any(is.infinite(x_k1_r))) {
89   cat("Error: Valores inválidos en iteración", iteraciones_r, "\n")
90   cat("x_k1_r =", x_k1_r, "\n")
91   break
92 }
93 #print(paste(x_k1_r))
94
95 #-----
96 # Criterios de parada
97 if (all(abs(gradiente_f(x_k1_r)) < tol) || all(abs(x_k1_r - x_k_r) < tol)) {
98   cat("Hessiana regularizada paró en iteración:", iteraciones_r, "\n")
99
100   # Guardar punto final
101   historial_x_R <- c(historial_x_R, x_k1_r[1])
102   historial_y_R <- c(historial_y_R, x_k1_r[2])
103   historial_f_R <- c(historial_f_R, f(x_k1_r))
104   x_k_r <- x_k1_r
105   break
106 }
107
108 #-----
109 x_k_r <- x_k1_r
110 }
111
```

## Datos obtenidos

```
Hessiana Normal:
> cat(" Iteraciones:", iteraciones, "\n")
Iteraciones: 8
> cat(" Mínimo encontrado en x:", x_k_h[1], "\n")
Mínimo encontrado en x: 0.06686526
> cat(" Precicio del valor X = ",precicion_x_n,"\n")
Precicio del valor X = 94.92504
> cat(" Mínimo encontrado en y:", x_k_h[2], "\n")
Mínimo encontrado en y: 0.0267461
> cat(" Precicion del valor Y = ",precicion_y_n,"\n")
Precicion del valor Y = 95.39379
> cat(" Valor de la función:", f(x_k_h), "\n")
Valor de la función: 0.0001481442
>
> cat("\nHessiana Regularizada:\n")

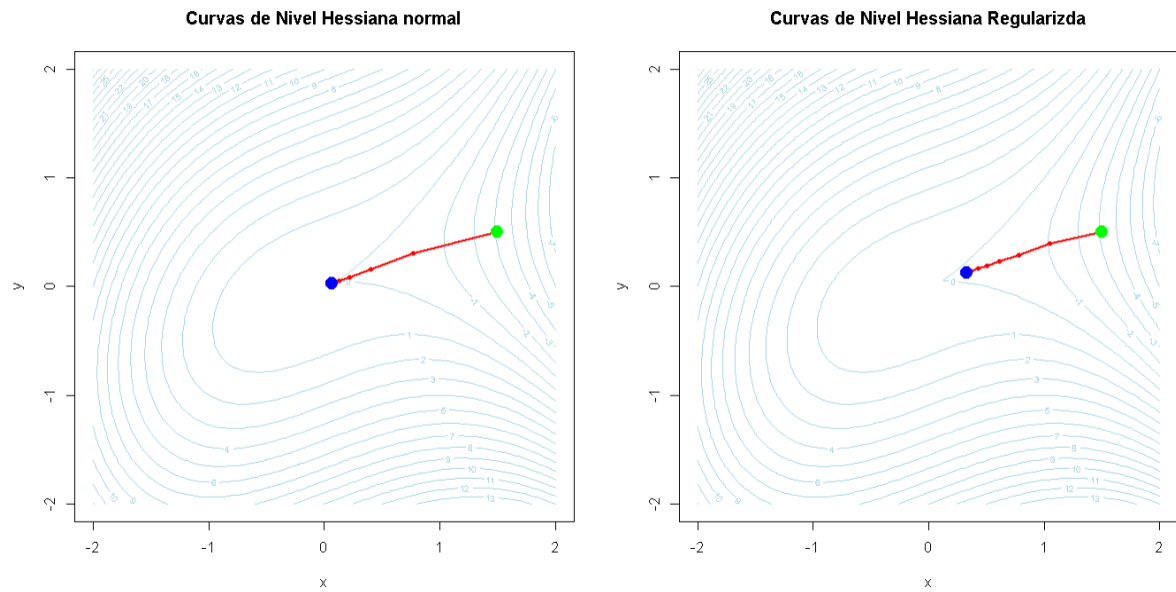
Hessiana Regularizada:
> cat(" Iteraciones:", iteraciones_r, "\n")
Iteraciones: 235
> cat(" Mínimo encontrado en x:", x_k_r[1], "\n")
Mínimo encontrado en x: 0.06669546
> cat(" Precicion del valor X = ",precicion_x_r, "\n")
Precicion del valor X = 90.56283
> cat(" Mínimo encontrado en y:", x_k_r[2], "\n")
Mínimo encontrado en y: 0.0266781
> cat(" Precicion del valor Y = ",precicion_y_r, "\n")
Precicion del valor Y = 91.38113
> cat(" Valor de la función:", f(x_k_r), "\n")
Valor de la función: 0.0001481481
>
```

Tabla de diferencia entre Hessiana Normal y Regularizada

	Hessiana normal (N)	Hessiana regularizada ®	Diferencia (R-N)
Iteraciones	8	235	227
Punto X	0,06686526	0,06669546	-0,0001698
Punto Y	0,0267461	0,0266781	-0,000068
F(X,Y)	0,0001481442	0,0001481481	0,0000000039



## Gráfico



En ambos casos con hessiana normal y regularizada se obtiene datos muy similares a tal grado que su precisión son las misma y sus puntos mínimos encontrados solo se diferencian por un error del  $1e-4$  decimales entre ambos métodos con una diferencia significativa el número de iteraciones donde para este programa el método más eficiente vendría siendo el de la hessiana normal