412 MÉTODO DE NEWTON - TAREA 2

October 17, 2025

Pregunta 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:

$$f(x, y) = 2x^2 - 1.05x^4 + \frac{x^6}{6} + xy + y^2$$

Actividades:

1. **Derivación analítica:** Calcule el vector gradiente $\nabla f(x, y)$ y la matriz Hessiana $\mathbf{H}_f(x, y)$ de la función.
2. **Implementación:** 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:** Ejecute su algoritmo desde los siguientes tres puntos iniciales:
   - $\mathbf{x}_0 = (1.5, 1.0)$
   - $\mathbf{x}_0 = (-1.5, -1.0)$
   - $\mathbf{x}_0 = (0.1, -0.2)$, cerca de un máximo local
4. **Análisis y visualización:**
   - 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.
   - Genere un gráfico de contorno de la función y trace la trayectoria de optimización (los puntos $\mathbf{x}_k$ en cada iteración) para cada uno de los tres puntos iniciales.
   - 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.

Pregunta 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 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 minizar la suma de los errores al cuadrado (problema de mínimos cuadrados no lineales):

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

Actividades:

1. **Conjunto de datos:**

```
t = [0.01585558, 0.07313676, 0.20858986, 0.33697873, 0.52537301, 0.6164369,
     0.67744082, 0.77372499, 1.24299318, 1.28798218, 1.38339642, 1.38848687,
     1.42076869, 1.46404696, 1.50057502, 1.62121603, 1.70114607, 1.94117773,
     1.96511879, 2.22784082, 2.27602643, 2.34135203, 2.34449634, 2.41064538,
     2.46308469, 2.49806005, 2.56570644, 2.59826844, 2.61573859, 3.05457166,
     3.28683793, 3.33196052, 3.80886595, 3.84728936, 4.00492237, 4.00529043,
     4.01024845, 4.23964951, 4.38247821, 4.43925851, 4.48290057, 4.56513696,
     4.58015693, 4.61305888, 4.64543839, 4.6630282,  4.73071767, 4.82119210,
     4.93766455, 4.95449219]

y = [3.30604951,  1.63304262, -2.46669298, -4.67216227, -2.65183759,
    -0.11931208,  1.58435298,  3.20604040, -2.25300509, -3.43019723,
    -4.02265257, -3.46359790, -3.36545235, -2.97468372, -2.74451778,
     0.12791535,  1.61615275,  2.82364845,  2.71400979, -2.18062097,
    -2.39741066, -2.82599835, -3.27902725, -3.04151353, -2.52012235,
    -2.40448523, -0.90204355, -0.69802758, -0.45049201,  0.99303212,
    -2.27801465, -2.64637196,  2.37675322,  2.28167791,  1.25167305,
     1.60197788,  1.19320954, -1.10650603, -2.31930834, -1.98134768,
    -1.55041113, -0.89272659, -0.75329989, -0.09842116, -0.05934957,
     0.67373312,  0.93814889,  1.54737425,  1.69100012,  1.18712468]
```

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 $\mathbf{H}_S(\beta) \approx 2\mathbf{J}^\top\mathbf{J}$, donde $\mathbf{J}$ 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**:

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

- Implemente funciones en R o Python que calculen el gradiente $\nabla S(\beta) = -2\mathbf{J}^\top r$ y la Hessiana aproximada $\mathbf{H}_S(\beta)$.

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 β_{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.

Pregunta 3

La principal venjata 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, 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. **Componentes del algoritmo:**
   - Calcule analíticamente el gradiente $\nabla f(x, y)$. En este ejercicio, asumiremos que la Hessiana es demasiado compleja o costosa de calcular, justificando el uso de BFGS.

- Implemente el algoritmo **Quasi-Newton con la actualización BFGS** y la **búsqueda de paso por retroceso (backtraching)**.

2. **Exploración de los mínimos:**
   - Investigue y encuentre las coordenadas de los cuatro mínimos de la función de Himmelblau.
   - Ejecute su algoritmo BFGS partiendo de los siguientes tres puntos iniciales:
     - $\mathbf{x}_0 = (0, 0)$
     - $\mathbf{x}_0 = (-1, 3)$
     - $\mathbf{x}_0 = (4, -2)$
3. **Análisis y visualización:**
   - Para cada punto de partida, informe a cuál de los cuatro mínimos convergió el algoritmo y cuántas iteraciones fueron necesarias.
   - Genere un único gráfico de contorno de la función de Himmelblau.
   - En el gráfico, marque la ubicación de los cuatro mínimos teóricos.
   - Superponga las trayectorias de optimización de sus tres ejecuciones.
   - Discuta cómo la topografía de la función (sus "valles" y "cuencas de atracción") guía al algoritmo hacia diferentes soluciones dependiendo de dónde comience.

Pregunta 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 $\mathbf{H}_f\ (x, y)$.
   - Evalúe la Hessiana en el punto $\mathbf{x}_0\ = (1.5, 0.5)$. Calcule sus valores propios (eigenvalues). ¿Es la matriz positiva definida en este punto?
2. **Implementación estándar:** Ejecute el método de Newton estándar comenzando desde $\mathbf{x}_0\ = (1.5, 0.5)$. 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: $\mathbf{H}_{\text{modificada}} = \mathbf{H} + c\mathbf{I}$, donde c es un valor pequeño pero suficiente para hacerla positiva definida.

4. **Comparación:**
   - Ejecute el algoritmo regularizado desde el mismo punto de partida $\mathbf{x}_0 = (1.5, 0.5)$.
   - 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.

Juan F. Olivares Pacheco (`jfolivar@uda.l`)

Universidad de Atacama, Facultad de Ingeniería, Departamento de Matemática