AMPLIACIÓN DE ESTADÍSTICA Y OPTIMIZACIÓN

Francisco J. Aragón Artacho
francisco.aragon@ua.es

Dpto. Matemáticas, Universidad de Alicante
Curso 2022-2023

AMPLIACIÓN DE ESTADÍSTICA Y OPTIMIZACIÓN

Contenidos para el curso 2021-22

BLOQUE DE OPTIMIZACIÓN (45 horas: 35h. teóricas + 10h. prácticas)

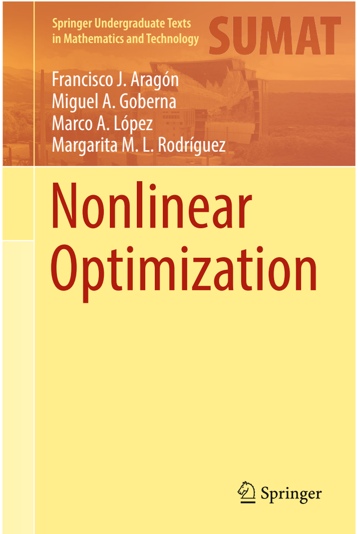
- Modelos de optimización y herramientas básicas: modelización, herramientas de cálculo básicas, convexidad, condiciones de optimalidad en puntos interiores.
- Optimización sin restricciones: optimización cuadrática, problemas de mínimos cuadrados, optimización convexa, algoritmos de búsqueda lineal, el método de Newton, algoritmos que no usan derivadas.
- Optimización con restricciones: optimización lineal, condiciones de optimalidad, métodos de penalización y barrera, programación cuadrática secuencial.

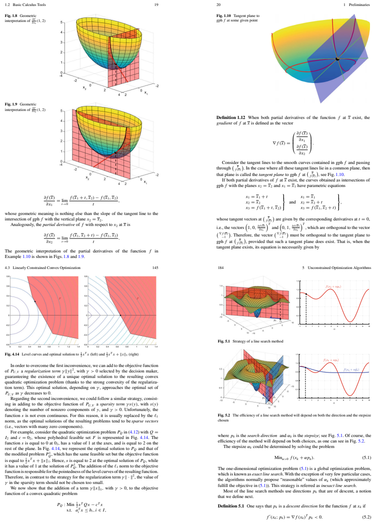
BLOQUE DE ESTADÍSTICA (15 horas: 10 h. teóricas + 5h. prácticas)

Muestreo. Estadísticos y Distribuciones muestrales. Estimadores y propiedades. Estimación puntual, por intervalo, intervalos de confianza y contraste de hipótesis.

Bibliografía del bloque de Optimización

Mathematics for machine learning
(M.P. Deisenroth, A.A. Faisal, C.S. Ong)





https://link.springer.com/book/10.1007%2F978-3-030-11184-7

AMPLIACIÓN DE ESTADÍSTICA Y OPTIMIZACIÓN

Instrumentos y criterios de evaluación 2022-23

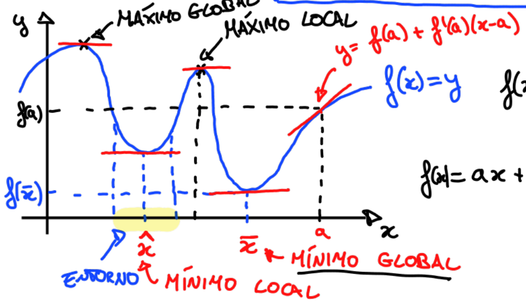
Sin datos

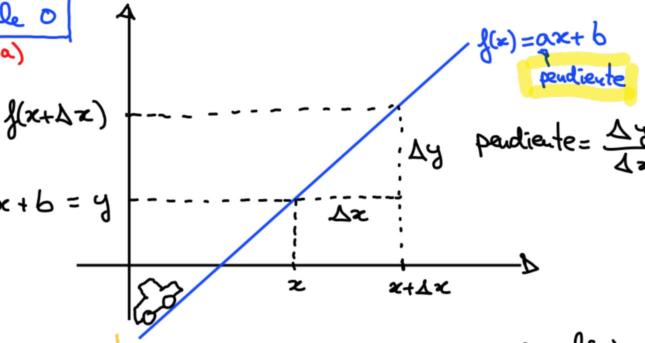
Descripción	Criterio	Tipo	Ponderación
Examen final	Prueba final que comprenda toda la asignatura.	ACTIVIDADES DE EVALUACIÓN DURANTE EL SEMESTRE	40
Informes de prácticas	Evaluación de memorias técnicas de prácticas de ordenador. Esta parte es recuperable en la convocatoria extraordinaria C4 mediante la entrega de los informes de prácticas	ACTIVIDADES DE EVALUACIÓN DURANTE EL SEMESTRE	35
Trabajo académico	Elaboración y entrega de memorias, informes o trabajos individuales o en equipo. Esta parte es recuperable en la convocatoria extraordinaria C4 mediante la entrega de los trabajos.	ACTIVIDADES DE EVALUACIÓN DURANTE EL SEMESTRE	25

IMPORTANTE: El plagio en cualquier práctica entregada supondrá un cero en la nota de Informes de prácticas. Ídem para el Trabajo académico.

Introducción

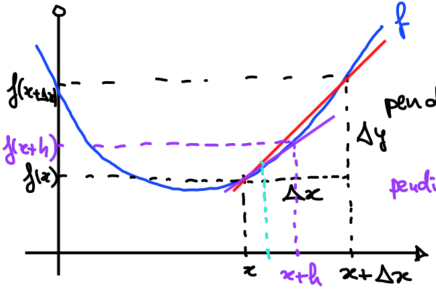
En los mín. y máximos la pendiente vale 0





$$\text{pendiente} = \frac{\Delta y}{\Delta x}$$

$$\boxed{\text{pendiente}} = \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x}$$

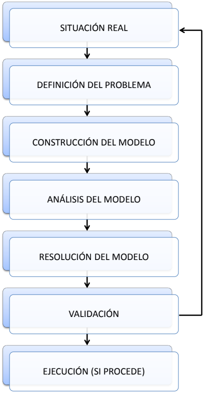


$$\text{pendiente} = \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x} = \frac{a(x+\Delta x) + b - (ax+b)}{\Delta x} = \frac{\cancel{ax} + a\Delta x + \cancel{b} - \cancel{ax} - \cancel{b}}{\Delta x} = \boxed{a}$$

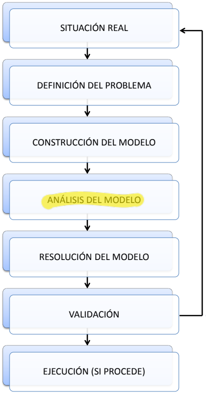
$$\text{pendiente} = \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

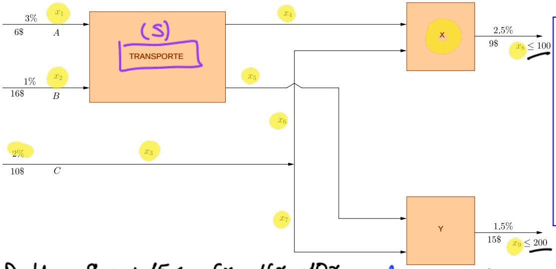
$$\text{pendiente}(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h} = f'(x)$$

Modelización



Modelización





Una petrolera debe transportar los crudos A, B y C de la forma indicada en este grafo para producir dos combustibles, X e Y, con límites en el % de azufre (S) y demandas de 100 y 200 unidades.

P: Max $9x_8 + 15x_9 - 6x_1 - 16x_2 - 10x_3$ ← función objetivo

s.a (sujeto a) ← restricciones de nuestro problema

$$x_1 + x_2 = x_4 + x_5$$
$$x_3 = x_6 + x_7$$
$$x_4 + x_6 = x_8$$
$$x_5 + x_7 = x_9$$
$$x_1, x_2, x_3, \ldots, x_9 \geq 0,\ x_8 \leq 100,\ x_9 \leq 200$$

$$\frac{\boxed{\dfrac{3x_1 + 1x_2}{x_1 + x_2}}\, x_4 + 2x_6}{x_4 + x_6} \leq 2.5$$

$$\frac{\dfrac{3x_1 + 1x_2}{x_1 + x_2}\, x_5 + 2x_7}{x_5 + x_7} \leq 1.5$$

$$\frac{3x_1 + x_2}{x_1 + x_2}\, x_4 + 2x_6 \leq 2.5(x_4 + x_6)$$

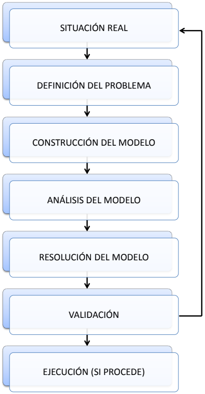
$$\frac{6x_1 + 2x_2}{x_1 + x_2}\, x_4 + 4x_6 \leq 5x_4 + 5x_6$$

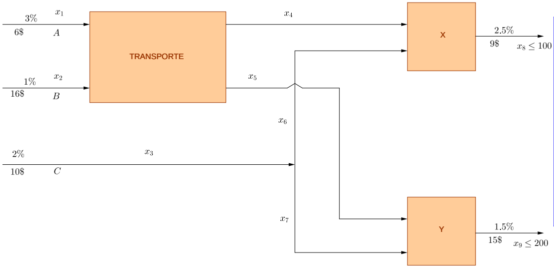
$$(6x_1 + 2x_2)x_4 + 4x_6(x_1 + x_2) \leq 5x_4(x_1 + x_2) + 5x_6(x_1 + x_2)$$

$$6x_1x_4 + 2x_2x_4 + 4x_1x_6 + 4x_2x_6 \leq 5x_1x_4 + 5x_2x_4 + 5x_1x_6 + 5x_2x_6$$

$$x_1x_4 - 3x_2x_4 - x_1x_6 - x_2x_6 \leq 0$$

Modelización

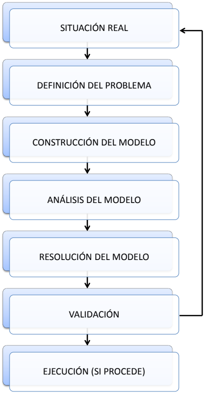


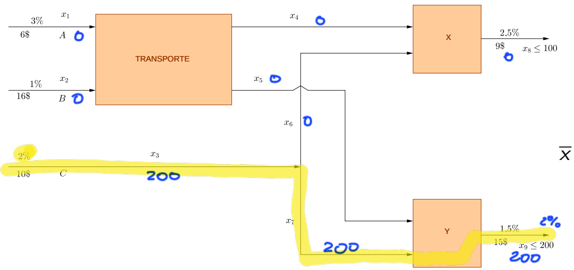


Una petrolera debe transportar los crudos A, B y C de la forma indicada en este grafo para producir dos combustibles, X e Y, con límites en el % de azufre (S) y demandas de 100 y 200 unidades.

$$
\begin{array}{lll}
P: & \text{Max} & f(x) = 9x_8 + 15x_9 - 6x_1 - 16x_2 - 10x_3 \\
 & \text{s.a} & x_1x_6 + 3x_2x_4 + x_2x_6 - x_1x_4 \geq 0 \\
 & & x_2x_5 - 3x_1x_5 - x_1x_7 - x_2x_7 \geq 0 \\
 & & x_1 + x_2 - x_4 - x_5 = 0 \\
 & & x_3 - x_6 - x_7 = 0 \\
 & & x_4 + x_6 - x_8 = 0 \\
 & & x_5 + x_7 - x_9 = 0 \\
 & & 0 \leq x_8 \leq 100; 0 \leq x_9 \leq 200 \\
 & & x_i \geq 0, i = 1, \ldots, 7.
\end{array}
$$

Modelización





$$\bar{x} = \begin{pmatrix} 0 \\ 100 \\ 100 \\ 0 \\ 100 \\ 0 \\ 100 \\ 0 \\ 200 \end{pmatrix}, \quad \hat{x} = \begin{pmatrix} 50 \\ 0 \\ 50 \\ 50 \\ 0 \\ 50 \\ 0 \\ 100 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \tilde{x} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 200 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 200 \\ 0 \\ 200 \end{pmatrix}.$$

No cumple la restricción del 1.5% S

$$P: \quad \begin{array}{ll} \text{Max} & f(x) = 9x_8 + 15x_9 - 6x_1 - 16x_2 - 10x_3 \\ \text{s.a} & x_1x_6 + 3x_2x_4 + x_2x_6 - x_1x_4 \geq 0 \\ & x_2x_5 - 3x_1x_5 - x_1x_7 - x_2x_7 \geq 0 \\ & x_1 + x_2 - x_4 - x_5 = 0 \\ & x_3 - x_6 - x_7 = 0 \\ & x_4 + x_6 - x_8 = 0 \\ & x_5 + x_7 - x_9 = 0 \\ & 0 \leq x_8 \leq 100;\ 0 \leq x_9 \leq 200 \\ & x_i \geq 0,\ i = 1, \ldots, 7. \end{array}$$

$$\boxed{x_1 + x_2 > 0}$$

$f(\bar{x}) = +400$, $f(\hat{x}) = +100$,
$f(\tilde{x}) = +1000$.

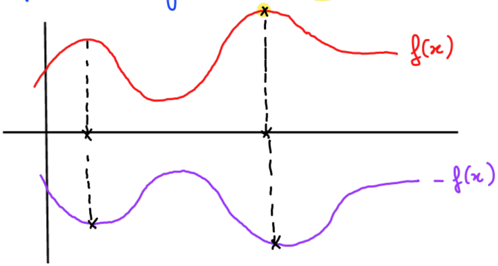
Problemas de optimización

$$P: \quad \text{Min} \quad f(x) \leftarrow \text{función objetivo}$$

$$\text{s.a} \quad \boxed{\begin{array}{l} h_i(x) = 0,\, i = 1, \ldots, m, \\ g_j(x) \leq 0,\, j = 1, \ldots, p, \\ x \in C, \end{array}} \leftarrow \text{conjunto factible } \underline{F}$$

donde $C \subset \mathbb{R}^n$, $f, h_i, g_j : C \to \mathbb{R}$, $i = 1, \ldots, m$, $j = 1, \ldots, p$.

P: Max $f(x) \iff -$Min $-f(x)$



Si $\bar{x}$ es un máximo global de f en F

$\iff f(\bar{x}) \geq f(x) \quad \forall x \in F$ (pertenece; para todo)

$\Updownarrow$

$-f(x) \geq -f(\bar{x})$

$\Updownarrow$

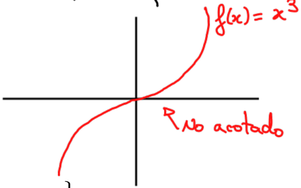
$\bar{x}$ es un mínimo global de $-f$ en F

Problemas de optimización

$$
\begin{array}{lll}
P: & \text{Min} & f(x) \\
& \text{s.a} & h_i(x) = 0,\ i = 1, \ldots, m, \\
& & g_j(x) \leq 0,\ j = 1, \ldots, p, \\
& & x \in C,
\end{array}
$$

$\left.\begin{array}{l} x_1 > 0 \\ x_1 < -2 \end{array}\right\} F = \emptyset$

donde $C \subset \mathbb{R}^n$, $f, h_i, g_j : C \to \mathbb{R}$, $i = 1, \ldots, m$, $j = 1, \ldots, p$.



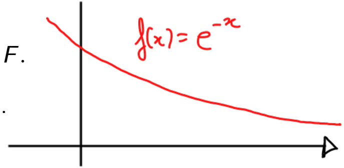
Definición

El conjunto factible del problema P dado es

$$F := \{x \in C : h_i(x) = 0, i = 1, \ldots, m; g_j(x) \leq 0, j = 1, \ldots, p\}.$$

Denotaremos el valor óptimo de P por $v(P)$ y diremos que P es inconsistente si $F = \emptyset$, acotado si $f(F)$ tiene cota inferior y *no acotado* si $f(F)$ no tiene cota inferior. Un punto $\overline{x} \in F$ es mínimo global de P si $f(\overline{x}) = v(P)$ o, equivalentemente,

$$f(\overline{x}) \leq f(x)\ \forall x \in F.$$



Cuando existe un mínimo global, se dice que P es resoluble.

Problemas de optimización

DIFICULTAD CRECIENTE →

- programación matemática
  - programación lineal (2)
  - programación no lineal
    - sin restricciones
      - f cuadrática(1)
      - f no cuadrática(4)
    - con restricciones
      - restricciones lineales
        - f cuadrática(3)
        - f no cuadrática(5)
      - restricciones no lineales(6)

$$f(x) = \frac{1}{2} x^T Q x + b^T x$$

LINEAL $\equiv$ fácil

$$f(x) = a_1 x_1 + a_2 x_2 + \dots + a_n x_n$$

$$a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \qquad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

$$f(x) = a^T x = (a_1, a_2, \dots, a_n) \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

$$= a_1 x_1 + a_2 x_2 + \dots + a_n x_n$$

$$= a@b$$

producto escalar

Python

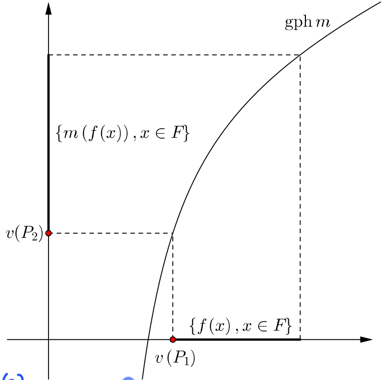
Reformulación de problemas de optimización

Una función $m : f(F) \to \mathbb{R}$ es creciente si

$$y_1 < y_2 \Rightarrow m(y_1) < m(y_2) \quad \forall y_1, y_2 \in f(F).$$

Si $m : f(F) \to \mathbb{R}$ es creciente (por ejemplo, $m(x) = e^x$, $\sqrt{x}$, x^3, $\log x$, $\ln x, \ldots$) y llamamos P_2 al modelo que resulta de sustituir $f(x)$ por $m(f(x))$ en un problema dado P_1, P_1 y P_2 tienen los mismos óptimos locales y globales, y $v(P_2) = m\,(v(P_1))$.

Análogamente, la sustitución de la restricción $g_j(x) \geq 0$ en P_1 por $m\,(g_j(x)) \geq m(0)$ proporciona un modelo equivalente P_2.

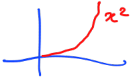


P: $\text{Min } \sqrt{x_1^2 + x_2^2} = f(x)$ $\rightarrow$ P_1: $\text{Min } x_1^2 + x_2^2$
s.a $e^{x_1+x_2} \geq e$ $\qquad$ s.a $e^{x_1+x_2} \geq e$

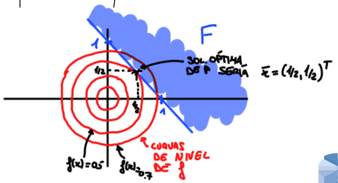
$\ln(e^{x_1+x_2}) \geq \ln(e)$

$x_1 + x_2 \geq 1$

P_2: $\text{Min } x_1^2 + x_2^2$
s.a $x_1 + x_2 \geq 1 \leftarrow F$



creciente si $x > 0$



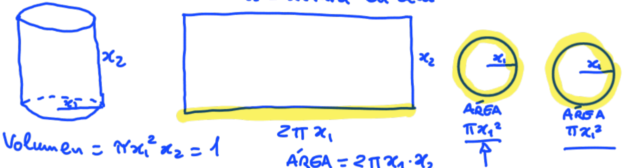
Reformulación de problemas de optimización

Ejemplo

Queremos construir un bote cilíndrico metálico de 1 litro de volumen. ($1\,dm^3$)

¿Qué medidas deberá tener si queremos minimizar el material empleado?

x_1 = radio en dm
x_2 = altura en dm



Volumen $= \pi x_1^2 x_2 = 1$

ÁREA $= 2\pi x_1 \cdot x_2$

P_1: Min $2\pi x_1 x_2 + 2\pi x_1^2 = 2\pi(x_1x_2 + x_1^2)$

s.a $\pi x_1^2 x_2 = 1 \longleftrightarrow \boxed{x_2 = \frac{1}{\pi x_1^2}}$

$x_1, x_2 > 0$

P_2: Min $\cancel{x_1} \cdot \frac{1}{\pi x_1^{\cancel{2}}} + x_1^2$

s.a $x_1 > 0$, $\cancel{\frac{1}{\pi x_1^2} > 0}$ SUPERFLUA

P_3: Min $\frac{1}{\pi x} + x^2$

s.a $x > 0$

CAMBIO DE VARIABLE

$x = e^y \longleftrightarrow y = \ln x$

P_4: Min $\frac{1}{\pi e^y} + e^{2y} = \boxed{\frac{1}{\pi} e^{-y} + e^{2y} = g(y)}$

s.a $\cancel{e^y > 0}$ SUPERFLUA

$g'(y) = -\frac{1}{\pi} e^{-y} + 2e^{2y} = 0$

$2e^{2y} = \frac{1}{\pi} e^{-y}$

$2e^{2y} \cdot e^y = \frac{1}{\pi} \rightarrow e^{3y} = \frac{1}{2\pi}$

$\| \; 2e^{3y}$

$\downarrow \ln$

$3y = \ln\left(\frac{1}{2\pi}\right)$

SOLUCIÓN ÓPTIMA DE P_4 $\rightarrow \bar{y} = \frac{\ln\left(\frac{1}{2\pi}\right)}{3} = -0.61$

$\bar{x}_1 = e^{\bar{y}} = e^{-0.61}$
$= 0.5419$ dm

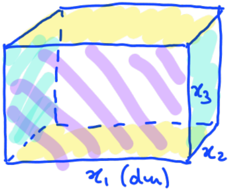
$\bar{x}_2 = \frac{1}{\pi \bar{x}_1^2} = 1.083$ dm

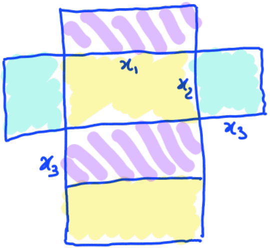
LATA ÓPTIMA RADIO 5.4 cm, ALTURA 10.83 cm

Reformulación de problemas de optimización

Ejemplo

Queremos construir una caja metálica de 1 litro de volumen.
¿Qué medidas deberá tener si queremos minimizar el material empleado?





$$\text{Volumen} = x_1 x_2 x_3 = 1$$

$$P_1: \text{Min } 2x_1x_2 + 2x_2x_3 + 2x_1x_3$$
$$\text{s.a } x_1x_2x_3 = 1 \longrightarrow x_3 = \frac{1}{x_1x_2}$$
$$x_1>0,\ x_2>0,\ x_3>0$$

$$P_2: \text{Min } x_1x_2 + \cancel{x_2}\cdot\frac{1}{x_1\cancel{x_2}} + \cancel{x_1}\cdot\frac{1}{\cancel{x_1}x_2}$$
$$\text{s.a } x_1>0,\ x_2>0,\ \cancel{\frac{1}{x_1x_2}>0}$$ SUPERFLUA

$$x_i = e^{y_i}$$

$$P_3: \text{Min } e^{y_1}\cdot e^{y_2} + \frac{1}{e^{y_1}} + \frac{1}{e^{y_2}} = e^{y_1+y_2} + e^{-y_1} + e^{-y_2}$$
$$\text{s.a } \cancel{e^{y_1}>0},\ \cancel{e^{y_2}>0}$$

Basándonos en el dibujo en 3D, la sol. óptima parece ser $\bar{y} = (0,0)^T$

$$\boxed{\bar{x}_1 = e^{\bar{y}_1} = e^0 = 1}$$
$$\boxed{\bar{x}_2 = e^{\bar{y}_2} = e^0 = 1}$$
$$\boxed{\bar{x}_3 = \frac{1}{x_1x_2} = \frac{1}{1\cdot 1} = 1}$$

Formulación continua de problemas con variables binarias

Ejemplo (Inversión de capital)

Supongamos que queremos invertir 500€ en los siguientes proyectos:

Proyecto	1	2	3	4	5	6	7
Coste	100	20	150	50	50	150	150
Beneficio	300	50	350	110	100	250	200

$$x_i = \begin{cases} 0, & \text{no invertimos en } i \\ 1, & \text{si invertimos en } i \end{cases}$$

¿Cómo elegir la selección óptima?

$$P: \ \text{Max } (300-100)x_1 + (50-20)x_2 + (350-150)x_3 + \cdots + (200-150)x_7$$

$$100x_1 + 20x_2 + 150x_3 + 50x_4 + 50x_5 + 150x_6 + 150x_7 \leq 500$$

$x_i \in \{0,1\} \leftarrow$ VARIABLES BINARIAS

$$x = (x_1, x_2, \ldots, x_7)^T \rightarrow \text{OPCIONES} = 2^7 = 128$$

$$x_i \in \{0,1\} \longleftrightarrow x_i(1-x_i) = 0$$

$$x_i(1-x_i) = x_i - x_i^2$$

Formulación continua de problemas con variables binarias

Ejemplo (Inversión de capital)

Supongamos que queremos invertir 500€ en los siguientes proyectos:

Proyecto	1	2	3	4	5	6	7
Coste	100	20	150	50	50	150	150
Beneficio	300	50	350	110	100	250	200

¿Cómo elegir la selección óptima?

Una variable 0-1 (también llamada binaria o Booleana) se puede convertir en continua mediante la equivalencia

$$x \in \{0, 1\} \Leftrightarrow x\,(1 - x) = 0.$$

(Análogamente, tenemos que $x \in \{-1, 1\} \Leftrightarrow x^2 = 1$.)