Algoritmos clásicos de optimización

UDG - CUCEI

Contenido

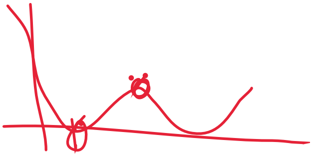
Método Analítico

Los pasos del método analítico para encontrar los mínimos o máximos de una función objetivo $f(x)$ son los siguientes:

- Cálculo de la derivada de primer orden $f'(x)$
- Encontrar los ceros o raíces x_i de la derivada $f'(x)$, con $i = 1, 2, 3, \cdots, N$ y N es el total de raíces encontradas.
- Cálculo de la derivada de segundo orden $f''(x)$
- Para determinar si las raíces x_i generan un mínimo o máximo, evaluamos lo siguiente:
    - Si $f''(x_i)$ es positivo, entonces x_i es un Mínimo
    - Si $f''(x_i)$ es negativo, entonces x_i es un Máximo

Con este método podemos encontrar los valores óptimos de una función para un problema unidimensional.

Método Analítico (continuación)



Ejemplo: Dada la siguiente función

$$f(x) = x^4 + 5x^3 + 4x^2 - 4x + 1$$

Calculamos la derivada de primer orden

$$f'(x) = 4x^3 + 15x^2 + 8x - 4$$

Las raíces en las que $f'(x)$ es cero se encuentran en

- $x_1 = -2.96$
- $x_2 = -1.10$
- $x_3 = 0.31$

Método Analítico (continuación)

Calculamos la derivada de segundo orden

$$f''(x) = 12x^2 + 30x + 8$$

Determinamos si las raíces x_i generan un Mínimo o Máximo

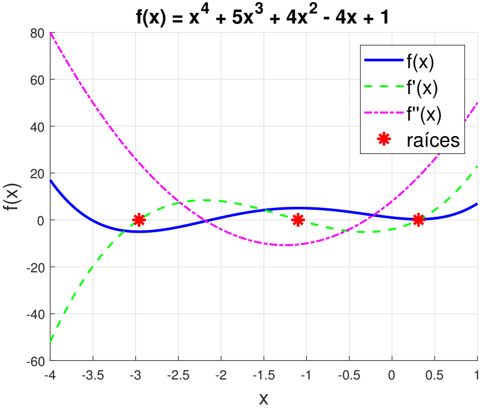
$$f''(x_i) = \begin{cases} 24.33, & \text{si } x_1 = -2.96 \\ -10.48, & \text{si } x_2 = -1.10 \\ 18.45, & \text{si } x_3 = 0.31 \end{cases}$$

por lo tanto

- $x_1 = -2.96$ es un mínimo
- $x_2 = -1.10$ es un máximo
- $x_3 = 0.31$ es un mínimo

Método Analítico (continuación)

Ejemplo:



donde $x_1 = -2.96$ es un mínimo, $x_2 = -1.10$ es un máximo y $x_3 = 0.31$ es un mínimo.

Ceros o raíces de una función

Raíces de una función: En matemáticas, se conoce como raíz (o cero) de una función a todo elemento x_i perteneciente al dominio de dicha función tal que se cumpla $f(x_i) = 0$. Por ejemplo:

$$f(x) = x^2 - 6x + 8 = 0$$

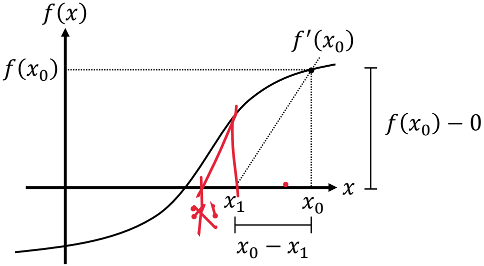
tiene como raíces $x_1 = 4$ y $x_2 = 2$.

Los siguientes métodos son comúnmente utilizados para calcular las raíces de una función:

- Método de las aproximaciones sucesivas
- Método de Newton-Raphson
- Método de la secante
- Método de la falsa posición

Método de Newton-Raphson

El método de Newton-Raphson consiste en estimar el cruce por cero x de una ecuación $f(x)$ mediante una sucesión de aproximaciones que se acerquen a la solución.



$$f'(x_0) = \frac{f(x_0) - 0}{x_0 - x_1}$$

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

Se requiere de una valor inicial x_0, después el método ajusta su valor mediante durante un proceso iterativo.

Método de Newton-Raphson (continuación)

De acuerdo al gráfico anterior, podemos estimar la pendiente (derivada) en el punto x_i de la siguiente manera

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - 0}{x_i - x_{i+1}}$$

Después, despejamos el valor de interés x_{i+1}

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

Esta ultima ecuación es conocida como fórmula de Newton-Raphson.

Método de Newton-Raphson (continuación)

El método de Newton-Raphson esta dado por los siguientes pasos:

Algorithm 1 Método de Newton-Raphson

1: $f(x) \leftarrow$ definir función
2: $f(x)' \leftarrow$ calcular derivada
3: $x_0 \leftarrow$ definir valor iniciar
4: $x_i \leftarrow x_0$
5: **Hacer**
6: $\quad x_{i+1} \leftarrow x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$
7: $\quad x_i \leftarrow x_{i+1}$
8: **Mientras** que se cumpla el total de iteraciones
9: x_i es una raíz de la función

Recuerda que este método se utiliza para encontrar los ceros de una función!

Método de Newton-Raphson (continuación)

Para resolver un problema de optimización por el método analítico, se requiere de una función objetivo $f(x)$, su primer derivada $f'(x)$ y se segunda derivada $f''(x)$. Se utiliza la primer derivada $f'(x_i)$ para encontrar los cruces por cero x_i que representan un mínino o un máximo. Después, se debe evaluar cada cero x_i en la segunda derivada $f''(x_i)$ para identificar si es un maximo o minimo.

Entonces la formula de Newton-Raphson se puede reescribir como

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f'(x_i)}{f''(x_i)}$$

Esta fórmula lleva como nombre método de Newton, que prácticamente es la fórmula de Newton-Raphson, pero esta contiene ahora la primera y segunda derivada de la Función Objetivo.

Método de Newton-Raphson (continuación)

El algoritmo del método de Newton esta descrito a continuación:

Algorithm 2 Método de Newton

$f(x) \leftarrow$ definir función objetivo
$f(x)' \leftarrow$ calcular primer derivada
$f(x)'' \leftarrow$ calcular segunda derivada
$x_0 \leftarrow$ definir valor iniciar
$x_i \leftarrow x_0$
Hacer
    $x_{i+1} \leftarrow x_i - \frac{f'(x_i)}{f''(x_i)}$
    $x_i \leftarrow x_{i+1}$
Mientras que se cumpla el total de iteraciones
x_i es una raíz de la función
determinar si $f''(x_i)$ representa un mínimo o máximo

Métodos de optimización multidimensional

Existen diversos métodos para optimizar funciones multidimensionales. A continuación se nombran algunos métodos.

Métodos Directos:

- Búsqueda Aleatoria
- Búsquedas Univariadas y de Patrones

Métodos de Gradientes:

- Método de Gradiente Conjugado
- Método de Newton
- Método de Gradiente Descendente

En este curso nos enfocaremos en conocer los métodos de Búsqueda Aleatoria y Gradiente Descendente.

El Gradiente

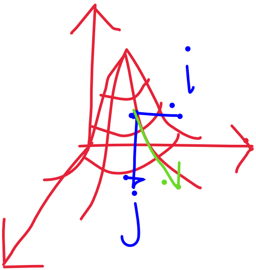
El Gradiente es una operación vectorial, que opera sobre una función escalar, para producir un vector cuya magnitud es la máxima razón de cambio de la función en el punto del gradiente y que apunta en la dirección de ese máximo.

Un ejemplo de un gradiente de dimensión 2 se muestra a continuación:

$$\nabla f\left(x,y\right)=\frac{\partial f\left(x,y\right)}{\partial x}\mathbf{i}+\frac{\partial f\left(x,y\right)}{\partial y}\mathbf{j}$$

Para generalizar el gradiente a n dimensiones, utilizamos:

$$\nabla f\left(\mathbf{x}\right)=\begin{bmatrix}\frac{\partial f\left(\mathbf{x}\right)}{\partial x_1}\\ \frac{\partial f\left(\mathbf{x}\right)}{\partial x_2}\\ \vdots \\ \frac{\partial f\left(\mathbf{x}\right)}{\partial x_n}\end{bmatrix}$$



donde $\mathbf{x}\in\left[x_1,x_2,\cdots,x_n\right]$.

El Gradiente (continuación)

Ejemplo: Calcular el gradiente de la función objetivo

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

Primero calculamos las derivadas parciales

$$\frac{\partial f\,(x,y)}{\partial x} = 2(x-2)$$

$$\frac{\partial f\,(x,y)}{\partial y} = 2(y-2)$$

Después construimos el gradiente

$$\nabla f\,(x,y) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f\,(x,y)}{\partial x} \\ \frac{\partial f\,(x,y)}{\partial y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2(x-2) \\ 2(y-2) \end{bmatrix}$$

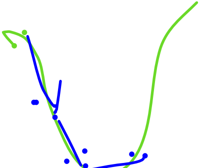
Gradiente Descendente

El método de gradiente descendente es una técnica de optimización clásica. Para encontrar el mínimo de una función usando el gradiente, se utilizan pasos proporcionales del gradiente negativo en el punto actual.

Se requiere de una valor inicial $\mathbf{x}_0$, después el valor es ajustado mediante un proceso iterativo.

El método de gradiente descendente aproxima el óptimo de una función resolviendo la siguiente ecuación:

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i - h \nabla f\left(\mathbf{x}_i\right)$$



donde h es un valor que amplifica el resultado del gradiente en la iteración i.

Gradiente Descendente (continuación)

El algoritmo del método de Gradiente Descendente se muestra a continuación:

Algorithm 3 Método de Gradiente Descendente para minimizar una función

$f(x) \leftarrow$ definir función
$\mathbf{x}_0 \leftarrow$ definir posición inicial
$h \leftarrow$ definir parámetro
$\mathbf{x}_i \leftarrow \mathbf{x}_0$
Hacer
    $\nabla f(\mathbf{x}_i) \leftarrow$ calcular gradiente
    $\mathbf{x}_{i+1} \leftarrow \mathbf{x}_i - h \nabla f(\mathbf{x}_i)$
    $\mathbf{x}_i \leftarrow \mathbf{x}_{i+1}$
Mientras que se cumpla el total de iteraciones
Reportar Mínimo en la posición $\mathbf{x}_i$ con Costo $f(\mathbf{x}_i)$

Gracias por tu atención!

Información de contacto:

Dr. Javier Enrique Gómez Avila

E-mail: jenrique.gomez@academicos.udg.mx