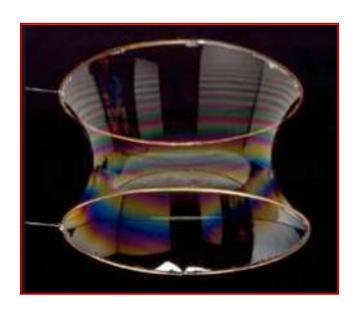
OPTIMIZACIÓN DE LA SUPERFICIE LIBRE DE UNA MEMBRANA FLUIDA ENTRE DOS CIRCUNFERENCIAS



ANDRÉS FERNÁNDEZ EGUIZÁBAL

ADAL DAVID GALVÁN CASTRO

SERGIO PALMEIRO SÁNCHEZ

YAGO PEGO MARTÍNEZ

GRUPO 23

ÍNDICE

1.	INTRO	ODUCCIÓN	3
2.	PROB	BLEMA LIBRE DE RESTRICCIONES	4
	2.1.	SOLUCIÓN ANALÍTICA	4
	2.2.	OPTMIZACIÓN POR MÉTODOS BASADOS EN EL GRADIENTE	6
		2.2.1. MÉTODO DFP	
		2.2.2. MÉTODO BFGS 2.2.3. MÉTODO SD	
	2.3.	OPTIMIZACIÓN POR MÉTODOS HEURÍSTICOS	
		2.3.1. BÚSQUEDA TABÚ	15
		2.3.2. OPTIMIZACIÓN POR ENJAMBRE DE PARTÍCULAS	16
		2.3.3. RECOCIDO SIMULADO	. 16
		2.3.4. ALGORITMOS GENÉTICOS	17
		2.3.5. MÉTODO GA	18
	2.4.	ECUACIÓN DE EULER	20
3.	ESTU	DIO DE LA INFLUENCIA DE LOS PARÁMETROS	23
	3.1.	VARIACIÓN EN EL RADIO DE LOS DISCOS	23
	3.2.	VARIACIÓN EN EL NÚMERO DE PUNTOS	26
	3.3.	VARIACIÓN EN LA DISTRIBUCIÓN DE LOS PUNTOS	. 29
	3.4.	VARIACIÓN EN LA DISCRETIZACIÓN DE LAS DERIVADAS	. 31
4.	PROB	BLEMA CON RESTRICCIONES	35
	4.1.	MÉTODO SQP	36
	4.2.	MÉTODO GA	39
5.	DESIGUALDAD EN LOS RADIOS		
	5.1.	MÉTODO BFGS	42
	5.2.	MÉTODO GA	44
6.	CONC	CLUSIONES	. 46
7.	BIBLI	OGRAFÍA	47

1. INTRODUCCIÓN

Define la RAE optimizar como "buscar la mejor manera de realizar una actividad". Esta simple premisa se convierte en disciplina matemática cuando en los siglos XVII y XVIII Fermat y Lagrange encuentran fórmulas basadas en el cálculo para identificar valores óptimos. Poco después, Newton y Gauss plantean métodos iterativos para aproximar el óptimo.

La teoría de la programación lineal, semilla de los métodos estudiados en el presente documento, es introducida por Leonid Kantorovich en 1939. Contribuciones posteriores de George B. Dantzig (algoritmo símplex) y John von Neumann (teoría de la dualidad), en la década de los 40, dan paso a la optimización moderna, tal como la conocemos actualmente.

El caso de estudio del presente trabajo es un clásico problema de optimización, estudiado por Euler a mediados del siglo XVIII: la determinación de la superficie de equilibrio adoptada por una membrana fluida entre dos anillos coaxiales. Dotado el problema de solución analítica, el empleo de la algoritmia moderna supone una aproximación abusiva y, según el caso, ineficaz para el análisis de la solución.

A lo largo de las páginas siguientes, se presentarán métodos de optimización basados en el gradiente, como los métodos de tipo Broyden (FDP, BFGS) y los métodos de descenso (SD). Por otro lado, también se ha realizado un análisis extensivo del comportamiento del algoritmo genético para la resolución del problema de la pompa de jabón. Se ha considerado interesante, además, la introducción breve de otros tantos métodos heurísticos, a modo de exposición, como el recocido simulado, la búsqueda tabú o la optimización por enjambre de partículas.

La comparación en el rendimiento entre estas dos clases de métodos de optimización cubrirá muchas de las páginas siguientes y nuestras observaciones en cuanto a su aplicabilidad se verán plasmadas en las conclusiones finales.

La implementación, resolución numérica y graficación de los métodos ya mencionados ha sido posible gracias a la herramienta de cálculo MATLAB, donde se ha escrito el código que da contenido al presente documento.

2. PROBLEMA LIBRE DE RESTRICCIONES

El problema inicial planteado requiere la búsqueda de la superficie minimal dispuesta entre dos anillos de radios iguales, concéntricos y equiaxiales. La forma adoptada por una pompa de jabón entre los anillos se corresponde con la solución de equilibrio de este problema.

Suponiendo una superficie axilsimétrica, esta se caracterizará en función de dos parámetros fundamentales:

- La coordenada z, que modula la posición vertical de estudio.
- El radio r = F(z), función de la altura.

Tipificando la coordenada vertical a la unidad y dadas las siguientes condiciones de contorno:

$$F(z = 0) = F_0$$
 $F(z = 1) = F_1$,

se pretende encontrar la solución que minimiza la energía total del sistema.

Esta energía se compone esencialmente de las energías debida a la tensión superficial (proporcional al área) y potencial (debida a la gravedad y a la rotación como sólido rígido). El objetivo del presente documento pasará por minimizar la primera de las energías mencionadas, más accesible.

La energía superficial es proporcional a la superficie que, a su vez, es proporcional a:

$$A = \int_{0}^{1} F \sqrt{1 + \left(\frac{dF}{dz}\right)^{2}} dz$$

2.1. SOLUCIÓN ANALÍTICA

Para minimizar la expresión anterior es conveniente hacer uso de las ecuaciones de Euler-Lagrange:

$$\frac{d}{dz}\frac{dL}{dF'} - \frac{dL}{dF} = 0$$

donde
$$L(F,F') = F\sqrt{1+(F')^2}$$
, con $F' = \frac{dF}{dz}$.

Resulta:

$$\frac{d}{dz} \left(\frac{FF'}{\sqrt{1 + (F')^2}} \right) - \sqrt{1 + (F')^2} = 0$$

Que se puede simplificar a:

$$\frac{1}{F'}\frac{d}{dz}\left(\frac{F}{\sqrt{1+(F')^2}}\right) = 0$$

Se obtiene que:

$$\frac{F}{\sqrt{1+(F')^2}} = a$$

donde a es una constante a determinar con las condiciones de contorno.

Se resuelve esa última ecuación diferencial de variables separables y se llega a:

$$r = F(z) = a \cosh \frac{z - z_0}{a}$$

donde z_0 es una altura de referencia a determinar.

En los primeros apartados se propone la utilización de anillos de radios iguales y de valor unidad:

$$F(0) = F(1) = F_0 = 1$$

Imponiendo estas condiciones de contorno, sustituyendo e igualando F(z=0) y F(z=1), resulta sencillo obtener que $z_0=\frac{1}{2}$. Este resultado se corresponde con el valor de la coordenada vertical en el plano medio entre los dos anillos.

Resta obtener el valor de la constante a. En z=0:

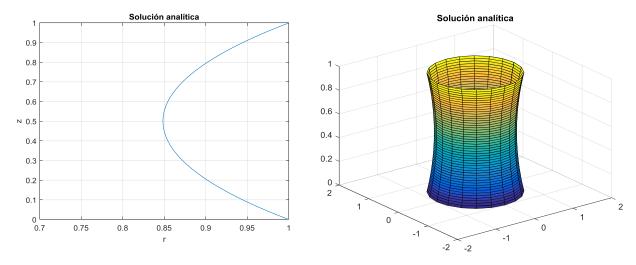
$$1 = a \cosh \frac{1}{2a}$$

La anterior es una ecuación trascendente, no resoluble analíticamente. En un simple proceso de iteración se obtiene que a=0.84833794.

Se obtiene así la solución analítica, que será utilizada para comparar con los distintos resultados mediante métodos basados en el gradiente o heurísticos, estudiados en próximos apartados:

$$r = F(z) = 0.84833794 \cosh \frac{z - \frac{1}{2}}{0.84833794}$$

Para una distribución equiespaciada de 51 puntos (según la coordenada vertical) se obtienen las siguientes figuras:



Figuras 1a, 1b. Variación del radio con la altura. Solución analítica, en 2D y 3D.

La solución, cóncava para el observador exterior, alcanza un mínimo en el plano medio entre anillos, con un radio de a. Nótese que el eje vertical se encuentra graficado para $r \in [0.7, 1]$.

La superficie lograda es conocida como catenoide, que se obtiene por rotación de una catenaria alrededor de un eje coplanario, perpendicular al eje de simetría y que no la corte. Es una superficie minimal, lo que significa que ocupa el área mínima cuando está delimitada por un espacio cerrado. Fue descrita formalmente en 1744 por Leonhard Euler.

La integración del funcional original permite obtener el área de revolución:

$$A_{FA} = 0.95362411$$

Por su parte, el volumen encerrado por esta superficie minimal se consigue resolviendo la siguiente expresión:

$$V=\int\limits_0^1 F^2dz\,,$$

obteniéndose:

$$V_{FA} = 0.80899551$$

2.2. OPTIMIZACIÓN POR MÉTODOS BASADOS EN EL GRADIENTE

Los métodos *quasi-Newton* están basados en el método de Newton, esto es, iteraciones con convergencia cuadrática siempre que la matriz hessiana es definida positiva:

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k - \alpha_k \boldsymbol{H}_k^{-1} \boldsymbol{g}_k$$

donde g y H son el gradiente y la matriz hessiana de la función objetivo, respectivamente.

Esta clase de algoritmos construyen información sobre la curvatura observando el comportamiento de f_k y \boldsymbol{g}_k durante una serie de iteraciones en descenso. Una secuencia de puntos está usada para generar una aproximación a la matriz hessiana, en vez de evaluar esta en un punto específico. Cabe mencionar que los métodos *quasi-Newton* están considerados hoy en día los más resolutivos para problemas sin restricciones.

Basados en el gradiente, son métodos iterativos que se basan en aproximaciones locales mediante desarrollos de Taylor. Estos son empleables cuando la función objetiva presenta continuidad en las segundas derivadas. Mediante el cálculo del gradiente de la función objetivo en cada iteración, proporcionan óptimos locales, referidos a un entorno del espacio de diseño seleccionado, gracias a la introducción de una condición inicial de búsqueda.

Cuando, por la condición de extremo local, se anula el gradiente, se obtiene la siguiente expresión:

$$F(\boldsymbol{u}) \approx F(\boldsymbol{u}^{min}) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}^{min})^T \boldsymbol{H}^{min}(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}^{min})$$

Junto con la condición necesaria de que H es semi-definida positiva, se cumple que la aproximación anterior logrará menores errores para F, con $error|_F \sim (error|_u)^2$.

En este apartado se estudiará el problema de la catenoide aplicando métodos tipo Broyden y métodos de descenso:

- Los métodos tipo Broyden consisten en la estimación sucesiva de aproximaciones a la inversa de la hessiana, cada vez mejores, calculando nuevos iterantes.
- Los métodos de descenso estiman direcciones de descenso cada vez mejores para resolver problemas de optimización unidimensionales, sin utilizar la matriz hessiana.

En los métodos de tipo Broyden se sustituye el cálculo exacto de la inversa de la matriz hessiana por un cálculo iterativo aproximado, tal que ${\pmb B} \approx {\pmb H}^{-1}$. La aproximación de ${\pmb B}^k$ para un determinado paso se calcula a partir de ${\pmb u}^k$, ${\pmb u}^{k-1}$, ${\pmb g}^k$ y ${\pmb g}^{k-1}$. Esto puede hacerse de varios modos, pero todos ellos utilizan la siguiente relación entre matriz hessiana y vector gradiente:

$$\pmb{H}^{k-1}\Delta\pmb{u}^k=\Delta\pmb{g}^k$$
, con $\Delta\pmb{u}^k=\pmb{u}^k-\pmb{u}^{k-1}$ y $\Delta\pmb{g}^k=\pmb{g}ig(\pmb{u}^kig)-\pmb{g}(\pmb{u}^{k-1})$

La relación anterior es insuficiente para estimar una matriz, por lo que será necesario introducir unas condiciones adicionales para calcular la aproximación de \mathbf{H}^k . Tales condiciones determinan los distintos métodos de Broyden.

Antes de comentar los distintos métodos empleados, se deben indicar las características utilizadas para los casos generales, a modo de un mejor entendimiento de los resultados obtenidos:

- Se discretiza la coordenada vertical z en 51 puntos, entre [0, 1].
- Se hace uso de una distribución equiespaciada de salto $\Delta z = \frac{1}{50}$.
- La aproximación de las derivadas primera y segunda se hace a partir de diferencias finitas centradas con tres puntos. Los extremos inferior y superior habrán de aproximarse mediante diferencias finitas adelantadas y atrasadas, respectivamente.
- Las integrales que permiten obtener el área y volumen resultantes son realizadas a partir de la regla del trapecio.

2.2.1. MÉTODO DFP

Desarrollado por Davidson (1959) y Fletcher y Powell (1963), este es el método de Broyden básico. Fue el primer método *quasi-Newton* en generalizar el método de la secante a un problema multidimensional. De entre las matrices que verifican las condiciones anteriores, se escoge la matriz simétrica que minimiza $\| \boldsymbol{H}^k - \boldsymbol{H}^{k-1} \|_{Fro}$, donde $\| \sim \|_{Fro}$ denota la norma de Frobenius (raíz cuadrada de la suma de los cuadrados de sus elementos).

La aproximación de la matriz hessiana en las sucesivas iteraciones es:

$$\boldsymbol{H}^{k} = \left(\boldsymbol{I} - \frac{\Delta \boldsymbol{g}^{k} \left(\Delta \boldsymbol{u}^{k}\right)^{T}}{(\Delta \boldsymbol{g}^{k})^{T} \Delta \boldsymbol{u}^{k}}\right) \boldsymbol{H}^{k-1} \left(\boldsymbol{I} - \frac{\Delta \boldsymbol{u}^{k} \left(\Delta \boldsymbol{g}^{k}\right)^{T}}{(\Delta \boldsymbol{g}^{k})^{T} \Delta \boldsymbol{u}^{k}}\right) + \frac{\Delta \boldsymbol{g}^{k} \left(\Delta \boldsymbol{g}^{k}\right)^{T}}{(\Delta \boldsymbol{g}^{k})^{T} \Delta \boldsymbol{u}^{k}}$$

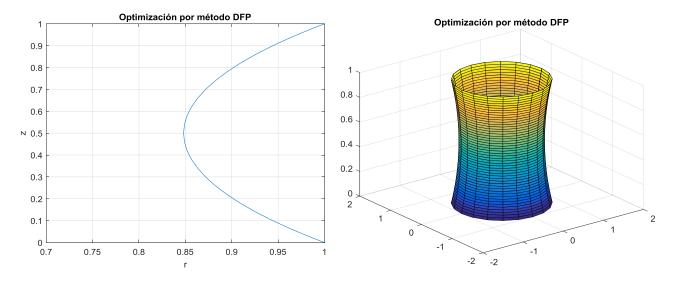
O trabajando con su inversa B^k :

$$\boldsymbol{B}^{k} = \boldsymbol{B}^{k-1} - \frac{\boldsymbol{B}^{k-1} \, \Delta \boldsymbol{g}^{k} (\Delta \boldsymbol{g}^{k})^{T} \boldsymbol{B}^{k-1}}{\Delta \boldsymbol{g}^{k} \, \boldsymbol{B}^{k-1} \, (\Delta \boldsymbol{g}^{k})^{T}} + \frac{\Delta \boldsymbol{u}^{k} \, (\Delta \boldsymbol{u}^{k})^{T}}{(\Delta \boldsymbol{g}^{k})^{T} \, \Delta \boldsymbol{u}^{k}}$$

Con la condición inicial:

$$H^0 = (H^0)^{-1} = I$$

Se adjuntan a continuación los resultados obtenidos para la simulación numérica del problema de la pompa de jabón:



Figuras 2a, 2b. Resolución numérica del problema. Método DFP.

En una primera aproximación gráfica no parece existir gran diferencia entre los resultados obtenidos de forma analítica y mediante el método DFP. Cabe decir que este último resulta una herramienta bastante sólida para problemas como el presentado, de baja complejidad.

En cuanto a los resultados obtenidos para el área y volumen de la catenoide, se tiene:

$$A_{DFP} = 0.95358482$$
 $V_{DFP} = 0.80883111$

Valores que se aproximan en muy buena medida a los obtenidos mediante la solución analítica, diferenciándose a partir del cuarto decimal.

Es conveniente estimar el error cometido, lo que se hará comparando ambas funciones:

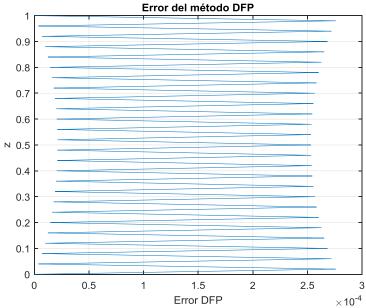


Figura 3. Error cometido mediante el método DFP.

El error adopta una forma de sierra, característica de estos métodos. Se observan 49 picos, tantos como puntos nodales intermedios utilizados. Además, el error encuentra máximos del orden de 10⁻⁴ y mínimos de 10⁻⁶ alternadamente, en error absoluto.

Para dar una idea del coste computacional necesario, se aportan los siguientes datos:

- Número de iteraciones realizadas: 190
- Número de evaluaciones de la función: 9550
- Tiempo de ejecución: 0.5302 segundos

Cabe señalar la relación que existe entre el número de iteraciones y evaluaciones de la función obtenido para este tipo de métodos. Sea N+1 el número de puntos de la discretización e I el número de iteraciones realizadas hasta un determinado momento, la expresión que relaciona los parámetros anteriores es:

$$F_{eval} = (I+1) \cdot N$$

donde F_{eval} es el número de evaluaciones de la función realizadas.

2.2.2. MÉTODO BEGS

Desarrollado por Broyden (1970), Fletcher (1970), Goldfarb (1970), y Shanno (1970), de forma independiente. Es posiblemente el método más utilizado de los basados en el gradiente. En este, se desea minimizar la diferencia entre sus inversas $\|\pmb{B}^k - \pmb{B}^{k-1}\|_{_{Ero}}$.

La aproximación de la matriz \mathbf{B}^k , inversa de la hessiana es:

$$\boldsymbol{B}^{k} = \left(\boldsymbol{I} - \frac{\Delta \boldsymbol{g}^{k} \left(\Delta \boldsymbol{u}^{k}\right)^{T}}{(\Delta \boldsymbol{g}^{k})^{T} \Delta \boldsymbol{u}^{k}}\right) \boldsymbol{B}^{k-1} \left(\boldsymbol{I} - \frac{\Delta \boldsymbol{u}^{k} \left(\Delta \boldsymbol{g}^{k}\right)^{T}}{(\Delta \boldsymbol{g}^{k})^{T} \Delta \boldsymbol{u}^{k}}\right) + \frac{\Delta \boldsymbol{u}^{k} \left(\Delta \boldsymbol{u}^{k}\right)^{T}}{(\Delta \boldsymbol{g}^{k})^{T} \Delta \boldsymbol{u}^{k}}$$

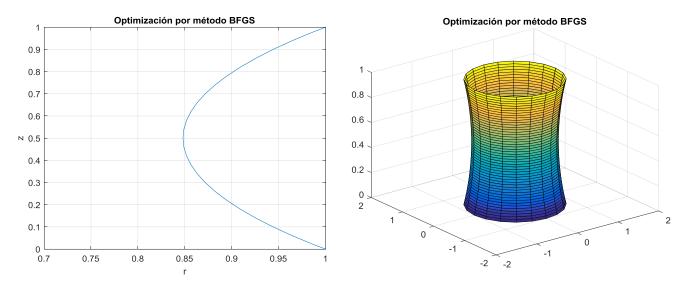
Y la propia matriz hessiana se puede estimar como:

$$\boldsymbol{H}^{k} = \boldsymbol{H}^{k-1} - \frac{\boldsymbol{H}^{k-1} \Delta \boldsymbol{u}^{k} \left(\Delta \boldsymbol{u}^{k}\right)^{T} \boldsymbol{H}^{k-1}}{\Delta \boldsymbol{u}^{k} \boldsymbol{H}^{k-1} \left(\Delta \boldsymbol{u}^{k}\right)^{T}} + \frac{\Delta \boldsymbol{g}^{k} \left(\Delta \boldsymbol{g}^{k}\right)^{T}}{(\Delta \boldsymbol{u}^{k})^{T} \Delta \boldsymbol{g}^{k}}$$

Con la misma condición inicial identidad:

$$H^0 = (H^0)^{-1} = I$$

Realizando la simulación numérica mediante el método BFGS se obtienen los siguientes resultados:



Figuras 4a, 4b. Resolución numérica del problema. Método BFGS.

Nuevamente la solución resulta visualmente atractiva, por semejarse bastante a las *Figuras 1a, 1b,* asociadas a la solución analítica.

Los resultados obtenidos para el área y volumen mediante el método BFGS son los siguientes:

$$A_{BFGS} = 0.95358482$$
 $V_{BFGS} = 0.80883110$

Se obtienen valores del área y volumen prácticamente iguales a los conseguidos mediante el método DFP. Esto se debe al pequeño número de puntos considerado en la discretización de z.

Se adjuntan nuevamente las características computacionales:

Número de iteraciones realizadas: 38

Número de evaluaciones de la función: 2000

Tiempo de ejecución: 0.1530 segundos

Se observa que mejora el comportamiento computacional en cualquiera de los tres aspectos anteriores, haciéndose cuatro veces menor que el presentado por el método DFP.

Se evalúa nuevamente el error comparando con la solución analítica obtenida:

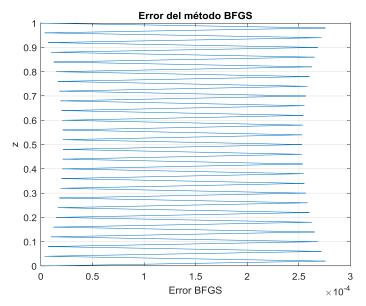


Figura 5. Error cometido mediante el método BFGS.

El error adopta la característica forma de sierra. El orden de magnitud del error, de forma equivalente al método DFP, varía entre 10⁻⁶ y 10⁻⁴, alternadamente para los puntos de la discretización.

Se dice que el método BFGS representa a día de hoy el mejor compromiso entre convergencia y coste computacional para funciones objetivo generales.

2.2.3 MÉTODO SD

Los métodos de descenso son métodos iterativos en los que cada iteración consiste en dos pasos:

- Seleccionar una dirección de descenso d^{k+1} , cuya elección diferirá según el método.
- Minimizar la función objetivo a lo largo de esa dirección, es decir, a lo largo de la recta $u = u^k + \alpha d^{k+1}$, donde u^k es la aproximación de u en el paso anterior.

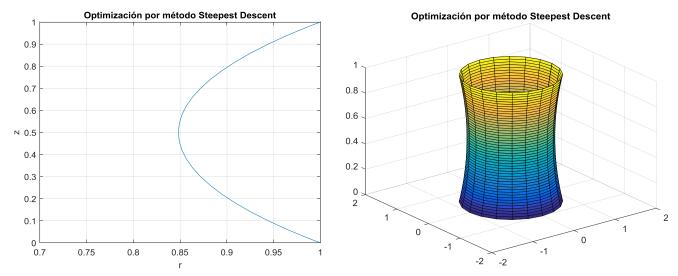
La minimización unidimensional (cálculo de α) puede hacerse, por ejemplo, mediante el método de la secante. Generalmente, dado que la minimización de la partícula α supone un alto esfuerzo computacional durante las primeras iteraciones, el método solo asegura que la función objetivo disminuya apropiadamente en esas iteraciones.

El método *Steepest Descent* (SD, o método del descenso más empinado) fue desarrollado por Peter Debye en 1909. Se basa en la búsqueda secuencial de la dirección de descenso más pronunciada que presenta localmente la función objetivo, que coincide con el gradiente de la función:

$$d^{k+1} = -q^k$$

A pesar de lo intuitivo del método, este no es siempre óptimo y puede converger mal cuando la matriz hessiana no está bien condicionada, es decir, cuando tiene autovalores muy dispares.

Se obtiene la siguiente solución:



Figuras 6a, 6b. Resolución numérica del problema. Método SD.

La solución numérica por este método de descenso logra un resultado aceptable, al menos gráficamente. Se obtienen las siguientes características geométricas, similares a las obtenidas con el resto de los métodos *quasi-Newton*:

$$A_{SD} = 0.95358482$$
 $V_{SD} = 0.80883315$

El análisis computacional es, sin embargo, no tan atractivo. Resulta un proceso tedioso, muy poco eficiente, de modo que se recomienda evitar utilizar los métodos de descenso en favor de los métodos BFGS o DFP. Se obtuvieron las siguientes características computacionales:

Número de iteraciones realizadas: 1158

Número de evaluaciones de la función: 145000

• Tiempo de ejecución: 7.5343 segundos

Se representa en la siguiente figura el error cometido al utilizar la aproximación por el método del descenso más empinado:

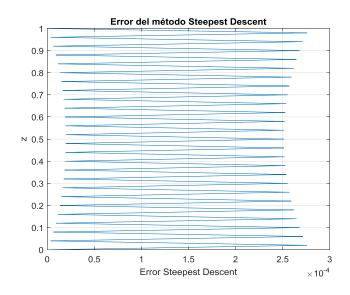


Figura 7. Error cometido mediante el método SD.

El error presenta la misma forma que en los anteriores casos, también de órdenes de magnitud similares.

En resumen, sobre este método de descenso puede destacarse una correcta aproximación al resultado, similar a las obtenidas mediante BFGS y DFP. Sin embargo, como se decía antes, debe descartarse su utilización mientras sea posible, por su nefasta eficacia computacional.

2.3. OPTIMIZACIÓN POR MÉTODOS HEURÍSTICOS

Los algoritmos heurísticos, del griego *heuriskein*, "encontrar", son una serie de técnicas que proliferan a partir de los años 70, como herramientas útiles que dan solución a problemas reales. Acusados estos en un primer momento de un escaso rigor matemático, ganan presencia a mediados de la década con la producción de resultados relevantes en la materia de complejidad computacional.

Son varios los factores que pueden hacer interesante la utilización de algoritmos heurísticos para la resolución de un problema:

- Cuando no existe un método exacto de resolución o este requiere mucho tiempo de cálculo o memoria. Ofrecer entonces una solución que solo sea aceptablemente buena resulta de interés frente a la alternativa de no tener ninguna solución en absoluto.
- Cuando no se necesita la solución óptima. Si los valores que adquiere la función objetivo son relativamente pequeños, puede no merecer la pena esforzarse (con el siguiente coste de tiempo y dinero) en hallar una solución óptima que, por otra parte, no representará un beneficio importante respecto a otra que sea simplemente sub-óptima.

- Cuando los datos son poco fiables. En este caso, o bien cuando el modelo es una simplificación de la realidad, puede carecer de interés buscar una solución exacta, dado que de por sí esta no será una aproximación de la real, al basarse en datos que no son los reales.
- Cuando limitaciones de tiempo, espacio (para almacenamiento de datos), etc, obliguen al empleo de métodos de rápida respuesta, aun a costa de la precisión.
- Como *paso intermedio* en la aplicación de otro algoritmo. A veces son usadas soluciones heurísticas como punto de partida de algoritmos exactos de tipo iterativo (regla de Vogel, por ejemplo).

Una importante ventaja que presentan las heurísticas respecto a las técnicas que buscan soluciones exactas es que, por lo general, permiten una mayor flexibilidad para el manejo de las características del problema. No suele resultar complejo diseñar algoritmos genéticos que en vez de considerar funciones lineales utilicen no linealidades. Además, generalmente, ofrecen más de una solución, lo cual permite ampliar las posibilidades de elección del que decide, sobre todo cuando existen factores no cuantificables que no han podido ser añadidos en el modelo, pero que también deben ser considerados.

Sin más dilación, se presentan a continuación los métodos heurísticos que han tenido cabida en el presente documento, en concordancia con lo expuesto durante las presentaciones teóricas de la asignatura *Control y Optimización*.

2.3.1. BÚSQUEDA TABÚ

En inglés tabu search, creado en 1986 por Fred W. Glover y formalizado en 1989, es un método metaheurístico de optimización matemática. La búsqueda tabú es un tipo de búsqueda por entornos que, según el propio autor, "guía un procedimiento de búsqueda local para explorar el espacio de soluciones más allá del óptimo local". La búsqueda tabú, a diferencia de los métodos basados en el gradiente, permite moverse a una solución del entorno aunque no sea tan buena como la actual, de modo que se pueda escapar de óptimos locales y continuar estratégicamente la búsqueda de soluciones aún mejores.

Lo que diferencia al *tabu search* de otros algoritmos heurísticos es un énfasis en procedimientos determinísticos en lugar de aleatorios, mediante la utilización de estrategias de intensificación y diversificación para la generación de nuevas soluciones obtenidas al explorar las trayectorias que conectan las buenas soluciones. En resumen, la búsqueda tabú hace uso de estructuras especiales de memoria y de estrategias de búsqueda dinámica cuidadosamente diseñadas para guiar el proceso de optimización de forma eficiente.

2.3.2. OPTIMIZACIÓN POR ENJAMBRE DE PARTÍCULAS

La optimización por enjambre de partículas (en inglés *particle swarm optimization*, PSO) es un algoritmo heurístico inspirado en la inteligencia colectiva de enjambres de poblaciones biológicas. Está originalmente atribuido a Eberhart y Kennedy (1995). Este método computacional optimiza el problema mediante iteraciones al intentar mejorar una solución candidata en relación a una medida de calidad dada. El movimiento de cada partícula está influenciado por la mejor posición (u óptimo) conocido, pero también es determinado por otras posibles mejores posiciones, actualizadas a medida que el resto de partículas las encuentra.

2.3.3. RECOCIDO SIMULADO

En inglés simulated annealing, es un método de tipo metaheurístico que hace uso de conceptos originalmente descritos por la mecánica estadística. Kirkpatrick et al (1983) y, de modo independiente, Cerny (1985) introducen los conceptos de recocido dentro del mundo de la optimización combinatoria. Trata de simular el enfriamiento de un conjunto de átomos a un estado de energía mínima, dibujando una analogía entre el enfriamiento de un material (búsqueda del estado de energía mínimo) y la resolución de un problema de optimización.

El método de recocido puede ser visto como un proceso iterativo de algoritmos de Metrópolis que se van ejecutando con parámetros decrecientes del parámetro de control (temperatura).

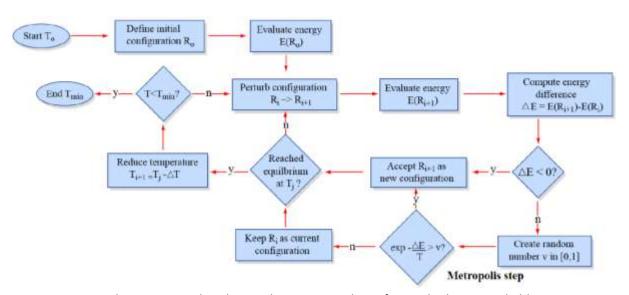


Figura 8. Algoritmo simulated annealing presentado en forma de diagrama de bloques.

La aleatorización en la selección de la siguiente solución se ha diseñado de forma que se reduzca la posibilidad de quedar atrapado en un óptimo local. Se ha llegado a demostrar que el recocido simulado es capaz de encontrar (asintóticamente) la solución óptima con probabilidad uno. Esta demostración no tiene sin embargo cabida en los contenidos del presente documento. Se puede encontrar en *Optimización Heurística y Redes Neuronales en Dirección de Operaciones e Ingeniería – Recocido simulado* (1996), por Moscato & Díaz.

2.3.4. ALGORITMOS GENÉTICOS

Los algoritmos genéticos son técnicas de búsqueda basadas en la mecánica de la selección natural y la genética. John Holland introdujo los algoritmos genéticos en 1960 basándose en la teoría de la evolución de Darwin. Más tarde, su estudiante David E. Goldberg mejoró el método en 1989.

Su funcionamiento consiste en una población inicial de soluciones generada aleatoriamente, evaluada mediante la función *fitness*, que se corresponde con la función objetivo. Así, a cada punto se le asocia un valor dado por esta función, que indica su validez o adaptación, haciéndose a continuación un proceso de selección en base a ese valor. Se consigue de esta manera conservar únicamente las mejores soluciones en base a unos determinados parámetros. Una vez seleccionados los "mejores" individuos, se reproducen, recombinándose entre ellos, de manera que los nuevos individuos tengan la validez de los anteriores. Así se genera una población y se repite el proceso. Conociendo la validez de las nuevas soluciones es posible escoger los nuevos puntos al principio de cada iteración de forma que se dé más probabilidad de selección a aquellos con características similares a los anteriormente seleccionados.

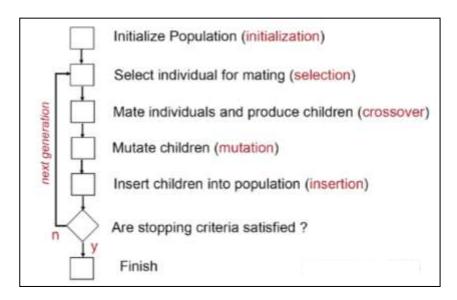


Figura 9. Pseudocódigo de un algoritmo genético.

En resumidas cuentas, existe una serie de componentes que debe incluir todo algoritmo genético, independientemente de la sofisticación de su diseño:

- Una representación, en términos de "cromosomas", de las configuraciones de nuestro problema.
- Una manera de crear las configuraciones de la población inicial.
- Una función de evaluación que permite ordenar los cromosomas de acuerdo con la función objetivo.

- Operadores "genéticos" que permiten alterar la composición de los nuevos cromosomas generados por los padres durante la reproducción.
- Valores de los parámetros que el algoritmo genético usa (tamaño de la población, probabilidades asociadas con la aplicación de los operadores genéticos, etc.).

2.3.5. MÉTODO GA

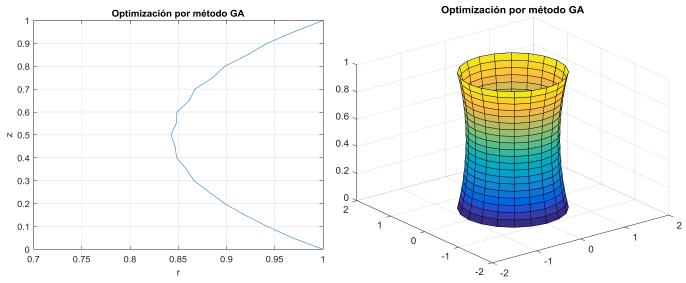
Precisamente se va a utilizar este último método presentado para testar su eficacia en el problema de la pompa de jabón.

Para el análisis del problema mediante métodos heurísticos se ha decidido variar los parámetros generales de la resolución numérica:

- Se discretiza la coordenada vertical z en 21 puntos, entre [0, 1].
- Se hace uso de una distribución equiespaciada de salto $\Delta z = \frac{1}{20}$.
- La aproximación de las derivadas primera y segunda se sigue haciendo a partir de diferencias finitas centradas con tres puntos.
- Las integrales que permiten obtener el área y volumen resultantes son igualmente realizadas a partir de la regla del trapecio.
- Se escogen unos valores límite de la función objetivo, siendo el superior, *UB*, la unidad y el inferior, *LB*, igual a 0.75.
- El resto de los parámetros del algoritmo genético (mutación, reproducción) se mantienen en sus valores predeterminados, por comodidad.

Cabe justificar la notable reducción en el número de puntos de estudio. Esto se debe al enorme coste computacional que supone la utilización de este tipo de métodos, como se verá a continuación.

Se presenta la solución obtenida al implementar el método GA (*Genetic Algorithm*) en la herramienta de cálculo MATLAB:



Figuras 10a, 10b. Resolución numérica del problema. Método GA.

Se obtienen los siguientes valores del área y volumen para la solución mediante algoritmo genético:

$$A_{GA} = 0.95342839$$
 $V_{GA} = 0.80443711$

Como era de esperar, se comete un error ligeramente mayor en la aproximación de la superficie minimal. La ineficacia del método para la resolución numérica de un problema relativamente sencillo como este, añadido al menor número de puntos considerado, provocan que exista una dispersión en los resultados obtenidos, aun cuando la aproximación ha sido finalizada satisfactoriamente.

En cuanto a las características computacionales puede comentarse la inestabilidad o, mejor dicho, la inconstancia de estos valores. Al someter el problema descrito a la simulación numérica mediante algoritmos genéticos, se observó una variación en los resultados temporales e iterativos. Estos, a continuación, son los obtenidos para un ensayo puntual:

Número de generaciones necesarias: 344

Número de evaluaciones de la función: 69000

• Tiempo de ejecución: 3.5003 segundos

Cabe mencionar que, a pesar de la variación de los anteriores resultados para distintas ejecuciones, los órdenes de magnitud resultantes son esencialmente idénticos.

Como se hizo en anteriores apartados, siempre es interesante evaluar el error cometido. Se adjunta el obtenido mediante algoritmos genéticos:

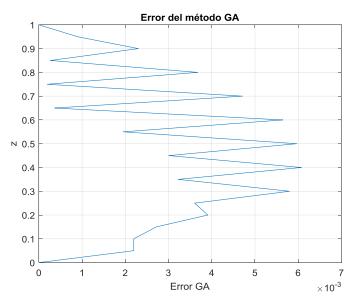


Figura 11. Error cometido mediante el método GA.

El error, definido como la diferencia en valor absoluto entre la solución obtenida numéricamente y la solución exacta, vuelve a presentar esa característica forma de sierra, variando para los puntos contiguos. El orden de magnitud del error es, no obstante, mayor que el presentado en anteriores ocasiones.

En resumen, se puede argumentar que, vistos los resultados obtenidos, los algoritmos genéticos no constituyen un enfoque adecuado al problema que nos ocupa en este documento. Métodos basados en el gradiente, como el BFGS, o incluso el DFP, suponen una alternativa más competitiva, tanto en materia computacional como en exactitud.

Por hacer justicia a este tipo de métodos, cabe recordar su alta capacidad de actuación en problemas en que no existe una solución exacta, por trabajar con una aproximación simplificada de un problema real, o especialmente cuando no se trabaja con un problema tan matemáticamente definido, en que no es posible calcular el gradiente ni la matriz hessiana.

2.4. ECUACIÓN DE EULER

El problema de la pompa de jabón puede reducirse mediante técnicas de cálculo variacional a una ecuación diferencial ordinaria no lineal de segundo orden, a priori irresoluble analíticamente, que será computada de forma numérica. Se presenta primero el procedimiento estrictamente matemático seguido:

Se parte de la expresión original del enunciado,

$$A = \int_{0}^{1} F \sqrt{1 + \left(\frac{dF}{dz}\right)^{2}} dz.$$

En cálculo elemental, la derivada de una función en un extremo es nula. De forma similar, en cálculo variacional, la variación de un funcional en un extremo es también cero:

$$\delta A = A(F + \delta F) - A(F) = 0$$

donde δF representa una pequeña variación de la función F, que, por otro lado, satisface las condiciones:

$$\delta F(0) = \delta F(1) = 0$$

Nótese que la condición $\delta A=0$ es una condición necesaria, pero no suficiente para minimizar la superficie, ya que un extremo no es siempre un mínimo. Se desarrolla esta última condición:

$$\delta A = \int_{0}^{1} \delta \left(F \sqrt{1 + (F')^{2}} \right) dz = 0$$

$$\int_{0}^{1} \delta F \sqrt{1 + (F')^{2}} dz + \int_{0}^{1} F \delta \left(\sqrt{1 + (F')^{2}} \right) dz = 0$$

$$\int_{0}^{1} \sqrt{1 + (F')^{2}} \delta F dz + \int_{0}^{1} \frac{FF'}{\sqrt{1 + (F')^{2}}} \delta F' dz = 0$$

Se hace integración por partes en la segunda integral para transformar $\delta F'$ en δF :

$$\int_{0}^{1} \frac{FF'}{\sqrt{1 + (F')^{2}}} \, \delta F' dz = \left[\frac{FF'}{\sqrt{1 + (F')^{2}}} \delta F \right]_{0}^{1} - \int_{0}^{1} \frac{d}{dz} \left(\frac{FF'}{\sqrt{1 + (F')^{2}}} \right) \delta F \, dz$$

El término entre corchetes se anula debido a las condiciones de contorno, por lo que resulta:

$$\int_{0}^{1} \sqrt{1 + (F')^{2}} \, \delta F \, dz - \int_{0}^{1} \frac{d}{dz} \left(\frac{FF'}{\sqrt{1 + (F')^{2}}} \right) \delta F \, dz = 0$$

$$\int_{0}^{1} \left\{ \sqrt{1 + (F')^{2}} - \frac{d}{dz} \left(\frac{FF'}{\sqrt{1 + (F')^{2}}} \right) \right\} \delta F \, dz = 0$$

Dado que δF es arbitrario, se debe anular el primer factor del integrando:

$$\sqrt{1 + (F')^2} = \frac{d}{dz} \left(\frac{FF'}{\sqrt{1 + (F')^2}} \right)$$

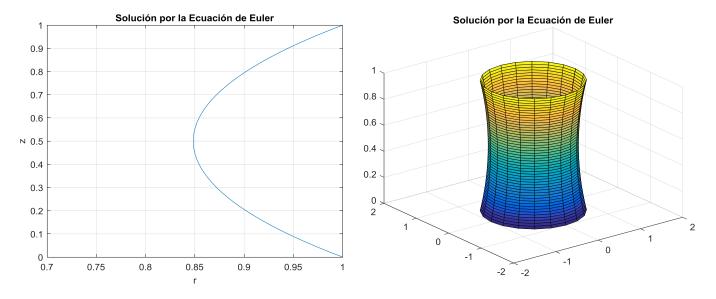
Derivando y simplificando la expresión, se llega a:

$$FF^{\prime\prime} = 1 + F^{\prime2}$$

Esta última expresión es conocida como ecuación de Euler. Mientras que sí existe una elegante resolución analítica, tiene mayor interés resolver esta numéricamente. Para ello se ha programado una resolución numérica mediante el algoritmo Levenberg-Marquardt (o método

de los mínimos cuadrados) para el comando *fsolve* de MATLAB. Igual que en los primeros casos, es una distribución equiespaciada de 51 puntos, con aproximaciones a las derivadas primera y segunda mediante diferencias finitas centradas con tres puntos.

Este es el resultado obtenido mediante la resolución numérica de la ecuación de Euler:



Figuras 12a, 12b. Resolución numérica del problema. Ecuación de Euler.

Se obtiene una curva bastante limpia, a pesar de que la discretización no es especialmente generosa en cuanto al número de puntos empleados. La catenaria girada en torno al eje de revolución adopta la ya conocida superficie catenoidal.

La resolución numérica es inmediata y el algoritmo no precisa más que cinco iteraciones para lograr superar la tolerancia predeterminada.

Se adjunta también el error asociado a esta forma de resolución:

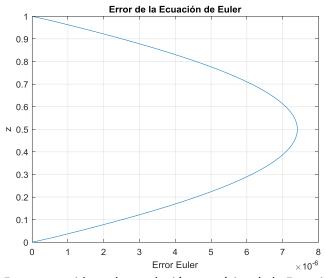


Figura 13. Error cometido en la resolución numérica de la Ecuación de Euler.

El error obtenido mediante esta última aproximación es el mínimo encontrado hasta el momento, sin llegar alcanzar la barrera del 10⁻⁵. Esto quiere decir, en efecto, que la resolución numérica de la ecuación de Euler supone no solo el más rápido de estos métodos (del orden de 10⁻² segundos), sino además el más preciso. Estas conclusiones son obviamente solamente aplicables al problema particular de la pompa de jabón, en que el análisis variacional de la integral original ha permitido llegar a una simplificación en forma de ecuación diferencial ordinaria. Es evidente que a medida que el problema objeto de estudio se haga más complejo, la viabilidad de esta sencilla resolución numérica se verá afectada, debiendo acudir a los anteriores métodos de optimización estudiados.

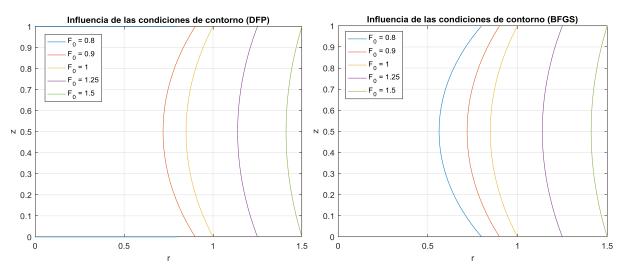
3. ESTUDIO DE LA INFLUENCIA DE LOS PARÁMETROS

Se ha realizado hasta ahora un estudio del comportamiento de los distintos métodos de optimización, empleando una serie de condiciones de contorno, elección de puntos y aproximación de las derivadas, que se han definido como "generales". Más bien se han definido las anteriores características de tal forma que se ha maximizado, en la medida de lo posible, la validez de los resultados obtenidos.

No obstante, resulta interesante un estudio más extendido de los métodos empleados y su respuesta a la variación de los distintos parámetros involucrados.

3.1. VARIACIÓN EN EL RADIO DE LOS DISCOS

Se comienza por alterar las condiciones de contorno, esto es, variar el radio de los anillos extremos, iguales. Como se ve en las siguientes figuras, se ha implementado la solución numérica para radios tanto menores como mayores al original, la unidad:



Figuras 14a, 14b. Influencia de las condiciones de contorno. Métodos DFP y BFGS.

Cabe decir que los valores de la función a optimizar, el área, son prácticamente equivalentes, independientemente del método utilizado. Esto se debe, como ya se dijo, a la pequeña cantidad de puntos utilizados para la resolución. Las soluciones presentan una curvatura limpia, que denota la validez del resultado. Por otro lado cabe mencionar la estabilidad de los tiempos de ejecución, prácticamente invariables para los distintos radios.

Es menester referirse a la solución obtenida para $F_0=0.8$ mediante el método DFP. Se obtuvo que la solución F explota en la decimocuarta iteración, por no encontrarse el problema acotado. Realmente los dos métodos presentan soluciones erráticas a partir de cierto valor límite. Esta solución no da mayor información que el propio hecho de que existen unas limitaciones algorítmicas. Así, se ha encontrado que el método DFP falla para radios menores a 0,82, mientras que el BFGS, más versátil, falla para radios menores a 0,75.

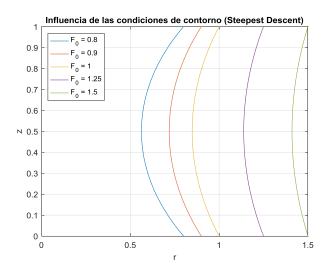


Figura 15. Influencia de las condiciones de contorno. Método SD.

Las soluciones obtenidas mediante el método de descenso directo son buenas, cuando nos fijamos en la calidad de las soluciones, muy parecidas a las obtenidas por el método BFGS, más fiable. Las áreas son las mismas y las curvas son limpias, sin percibirse los puntos de discretización. Nuevamente habrá que llamar la atención de los elevados tiempos de ejecución necesarios, de hasta diez segundos para $F_0=0.8$, exigencia cien veces mayor que la requerida para el método BFGS. No cabe duda de que el método del descenso más empinado no es un método eficaz para la resolución de este problema.

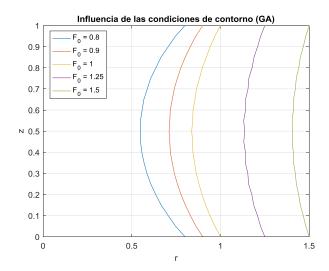


Figura 16. Influencia de las condiciones de contorno. Método GA.

Sí se aprecia en la anterior figura una curva más discretizada. Esto es normal, pues el número de puntos empleados para algoritmos genéticos es 21. Por otro lado y, teniendo en cuenta el sencillo acondicionamiento del problema, se han obtenido unos resultados interesantes, variando las soluciones únicamente a partir del cuarto decimal con respecto al método BFGS, que puede servir de comparación de forma simplificada. Los tiempos de ejecución no han mejorado y se sitúan entre los cinco y diez segundos, lo que haría descartable su utilización en, por ejemplo, una empresa que debe resolver el anterior problema, aplicado a un caso propio.

Una característica común a la representación gráfica de todos los métodos es la suavización de la curvatura de la catenaria cuando aumenta la condición de contorno. Resulta trivial demostrar que la superficie minimal se convierte asintóticamente en un cilindro, según los radios de los anillos extremos se hacen más y más grandes.

Imponiendo la segunda condición de contorno, independiente de la coordenada vertical, cuya constante asociada se obtiene de manera equivalente a la presentada en el apartado *Solución analítica*, se tenía:

$$F_0 = a \cosh \frac{1}{2a}$$

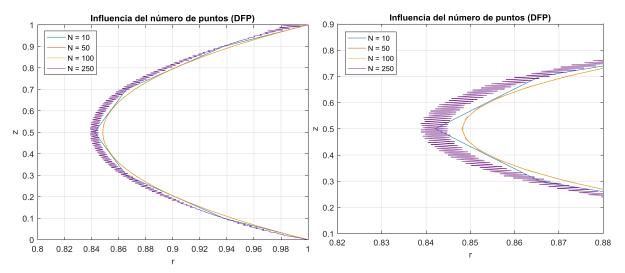
Llevando F_0 al infinito, no existe otra solución que la que se obtiene cuando a tiende a infinito de la misma manera, dado que, en ese caso, el factor $\cosh \frac{1}{2a}$ se hace la unidad. Así, la ecuación que relaciona el radio de la superficie con la altura resulta:

$$r = F(z) = a \cosh \frac{z - \frac{1}{2}}{a} \approx a$$

Es decir, cuando \boldsymbol{a} es suficientemente grande el radio es constante a lo largo de la altura.

3.2. VARIACIÓN EN EL NÚMERO DE PUNTOS

Se estudia el problema de la pompa de jabón variando el número de puntos de la discretización.



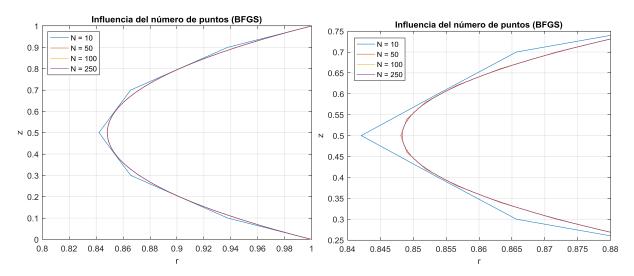
Figuras 17a, 17b. Influencia del número de puntos. Método DFP.

No cabe duda de que se ha encontrado una limitación en cuanto al funcionamiento del método DFP. La introducción de un número elevado de puntos provoca la inestabilidad de la búsqueda del mínimo. Si bien utilizando 100 puntos se mantiene la solución original hallada para 50 puntos (para un tiempo de ejecución diez veces mayor), se observa que cuando se emplean 250 puntos de discretización la curva obtenida presenta una forma de sierra no vista anteriormente. Computacionalmente, cabe mencionar de este último resultado que no ha logrado converger, por alcanzarse el número de iteraciones máximas predefinidas (300000), haciendo en consecuencia necesario un elevado tiempo de ejecución, 18 segundos.

Se obtienen los siguientes valores del área para los extremos:

$$A_{DFP_{10}} = 0.95264819$$
 $A_{DFP_{250}} = 0.95877977$

El primero de ellos varía en el tercer decimal con respecto a la solución analítica. Esto es justificable dada la pequeña cantidad de puntos considerado. Por otro lado, la evaluación de la superficie minimal con 250 puntos mediante el DFP crece con respecto a la solución exacta, debido principalmente a la forma de sierra, que aumenta el área fútilmente.



Figuras 18a, 18b. Influencia del número de puntos. Método BFGS.

Mediante el método BFGS se observa una uniformización de las soluciones según aumenta el número de puntos. La superficie obtenida para N=10 es equivalente ahora a la conseguida mediante el método DFP. El resto de las curvas son prácticamente indistinguibles, incluso cuando se hace énfasis en el plano medio de la catenoide.

Los tiempos de ejecución son mayores cuando aumenta el número de puntos de la discretización, pero no crecen de forma tan abrupta como en el caso DFP. Concretamente, para el caso en que el número de puntos es 250, el tiempo de ejecución ha sido de 1.2783 segundos, diez veces menor y sí convergiendo.

Las soluciones obtenidas son:

$$A_{BFGS_{10}} = 0.95264819$$
 $A_{BFGS_{250}} = 0.95362254$

Recordando el valor del área obtenida de forma analítica, $A_{FA}=0.95362411$, se observa que a partir de la utilización de un mayor número de puntos se ha estimado una solución todavía más parecida a la real, variando a partir de la sexta posición decimal. Será decisión del empresario la elección de un mayor o menor número de puntos, priorizando así la exactitud frente a un menor coste computacional, respectivamente.

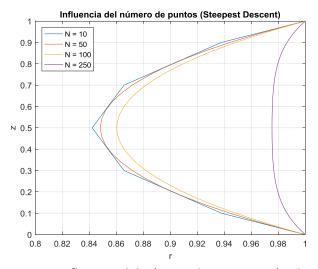


Figura 19. Influencia del número de puntos. Método SD.

Parece evidente que el método de descenso más empinado resulta problemático al variar los parámetros asociados al número de puntos. Para el caso en que N=100 la curva sigue adoptando una forma de catenaria, aun cuando el radio mínimo, en el plano medio, es 0.86058506, considerablemente distinto al habitual 0.84833794. Más exagerado es el caso es en que N=250, donde se comete un error catastrófico. Este fenómeno está explicado por la llegada prematura al número de evaluaciones de la función máximo, 300000. Para N=100 han sido suficientes 1008 iteraciones para alcanzar este límite, con una media de 297.62 evaluaciones de la función por iteración. Para N=250 se han realizado 874.64 evaluaciones de la función por iteración, para un total de únicamente 343 iteraciones. Este bajo número de iteraciones realizadas explica la forma primitiva que presenta la curva morada.

Otra vez, los resultados para el tiempo de ejecución vuelven a alcanzar las dos cifras, sin siquiera obtener un buen resultado. Se puede computacionalmente salvar el caso en que N=10, en que para un tiempo razonable se obtiene una solución aceptable:

$$A_{SD_{10}} = 0.95264819$$
 $t_{SD_{10}} = 0.0853 s$

Sobre este método cabe aclarar una cosa. En apartados anteriores se veía como este algoritmo siempre acababa convergiendo, consiguiendo un resultado razonable, para un tiempo de ejecución más bien alto.

Una hipótesis es que, en efecto, este método sí permitirá obtener un valor aproximado a la solución exacta, independientemente del número de puntos. Una condición para el cumplimiento de esta proposición es la introducción de un nuevo máximo de evaluaciones de la función, tan grande como sea posible.

Esta posibilidad no sugiere, ni mucho menos, la utilización del método del descenso más empinado. Los tiempos de ejecución necesarios crecen vertiginosamente según lo hace el número de puntos de discretización.

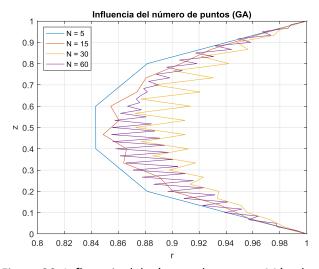


Figura 20. Influencia del número de puntos. Método GA.

Se observan irregularidades en el algoritmo genético para la variación del número de puntos. La forma de sierra se acentúa, denotando la inestabilidad del método, aun cuando se produce la convergencia de las cuatro pruebas.

El tiempo varía entre 0.1933 segundos (62 generaciones y 3150 evaluaciones de la función) y 55.3906 segundos (1935 generaciones y 387200 evaluaciones de la función). Cabe repetir que no es este un método computacionalmente eficiente.

Las áreas para los casos extremos son:

$$A_{GA_5} = 0.95001576$$
 $A_{GA_{60}} = 0.95522074$

Observando la gráfica se puede entender que el valor del área crezca con el número de puntos, pues una peor distribución imperfecta de la catenaria no hará sino aumentar el área.

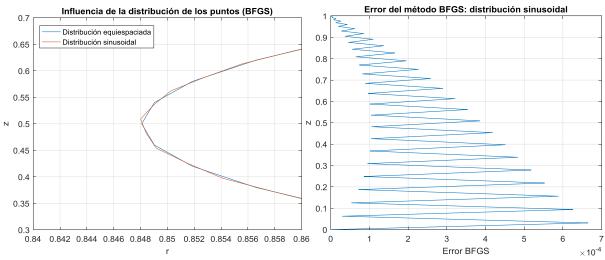
Otra vez la influencia del número de puntos ha sido determinada utilizando un número menor de estos, por la exigencia computacional de los métodos heurísticos.

3.3. VARIACIÓN EN LA DISTRIBUCIÓN DE LOS PUNTOS

Una manera de visualizar la influencia de la distribución de los puntos en la resolución numérica del problema es, lógicamente, someter a estudio la respuesta del método a distintas distribuciones. Se ha optado por comparar la ya estudiada distribución equiespaciada con una distribución sinusoidal simple. De esta manera los puntos de discretización son los siguientes:

$$z_i = \sin \frac{\pi i}{2N}$$
, $con i = 0,1,2,...N$

Manteniendo N=50 como en casos anteriores, se obtiene un espectro de 51 valores de z acumulados principalmente en torno al cero, por las propiedades trigonométricas.



Figuras 21a, 21b. Influencia de la distribución de los puntos. Método BFGS.

La *Figura 21a* compara la nueva distribución con la equiespaciada. Incluso al hacer *zoom* sobre la curva se observa una diferencia más bien pequeña. Por su parte, la *Figura 21b* muestra el error cometido por esta distribución al compararse con su correspondiente analítica. Dada la dispersión de los puntos, el error deja de ser simétrico y encuentra máximos en los primeros puntos de la discretización, del mismo orden a los obtenidos con la distribución equiespaciada (ver *Figura 5*).

Por otro lado, cabe justificar la ausencia de la influencia de la distribución de los puntos en el método DFP. Esto es porque se han obtenido unas gráficas esencialmente idénticas cuya inclusión no aporta demasiado interés al documento. Los valores de las áreas son, de hecho, iguales cuando se redondea a ocho cifras significativas:

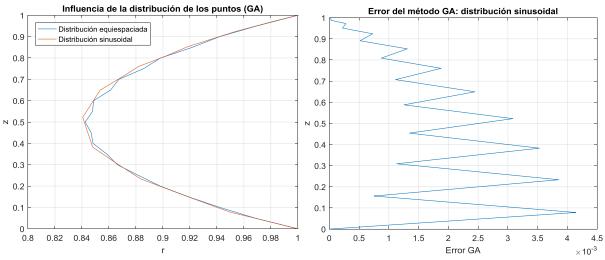
$$A_{DFP_{sin}} = 0.95355955$$
 $A_{BFGS_{sin}} = 0.95355955$

En cuanto al tiempo computacional, estos métodos son relativamente igual de válidos cuando tratamos con 51 puntos en la discretización. El método DFP ha requerido 0.3062 segundos mientras que al método BFGS le han bastado 0.2369 segundos. El segundo padece un aumento en el tiempo exigido. No obstante, llama la atención, en el método DFP, el menor tiempo de ejecución preciso para la distribución sinusoidal en relación al requerido por la equiespaciada (0.8029 segundos).

Igual de conveniente es ahorrarse las gráficas correspondientes al método del descenso más empinado. En una simulación diferenciada se han obtenido figuras de la distribución y del error similares a las anteriores. La solución obtenida es la siguiente:

$$A_{SD_{sin}} = 0.95355955$$

Esto vuelve a demostrar la fiabilidad en cuanto a los resultados de este método, por coincidir con los métodos de tipo Broyden. Por otro lado, el ejercicio computacional vuelve a ser nefasto, al ser necesarias 9449 iteraciones, 1701250 evaluaciones de la función y 80.0436 segundos para su convergencia. Estas condiciones son, por tanto, bastante más desfavorables que la evaluación equiespaciada de la función.



Figuras 22a, 22b. Influencia de la distribución de los puntos. Método GA.

La catenaria de la solución de la distribución sinusoidal adquiere una forma más suave, más parecida a la solución exacta. Por otro lado, la gráfica del error parece adquirir esa misma tendencia que se veía para los métodos *quasi-Newton*. La aleatoriedad intrínseca al algoritmo genético priva a la resolución de adquirir esta forma, por producirse antes la convergencia.

Se obtiene el siguiente valor para el área:

$$A_{GA_{sin}} = 0.95322386$$

Este resultado es, no obstante, menos parecido a la solución exacta que el obtenido por la distribución equiespaciada, por lo que parece necesario desechar la utilización de esta aproximación.

Computacionalmente hablando, el método ha resultado ser más eficiente que el método del descenso más empinado, pero nunca más que los métodos DFP o BFGS:

Número de generaciones necesarias: 924

Número de evaluaciones de la función: 185000

Tiempo de ejecución: 12.6358 segundos

3.4. VARIACIÓN EN LA DISCRETIZACIÓN DE LAS DERIVADAS

Aunque no lo parezca, en el programa sí entran en juego las aproximaciones pertinentes a las derivadas. En el caso general, esta discretización se ha realizado a partir de diferencias finitas centradas con tres puntos, de la siguiente manera:

$$F'(x_i) = F'_i \approx \frac{F_{i+1} - F_{i-1}}{(z_{i+1} - z_{i-1})}$$

En el caso en que la distribución de los puntos es equiespaciada, se tiene:

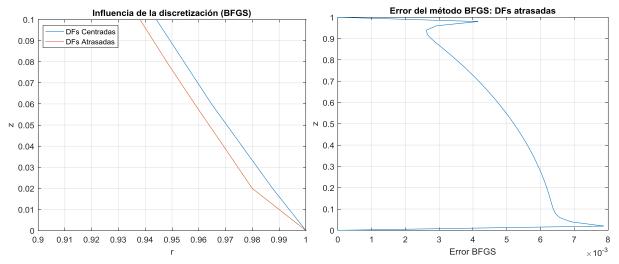
$$F'(x_i) = F'_i \approx \frac{F_{i+1} - F_{i-1}}{2\Delta z}$$

Interesa conocer la influencia que tiene la aproximación de estas derivadas. Se estudia por tanto el problema de la pompa de jabón discretizando las derivadas de la siguiente forma:

$$F'(x_i) = F'_i \approx \frac{3F_i - 4F_{i-1} + F_{i+2}}{2\Delta z}$$

La expresión anterior es una aproximación a la derivada de primer orden mediante diferencias finitas atrasadas de tres puntos. Nuevamente, la expresión se ha podido simplificar teniendo en cuenta que la distribución de puntos es equiespaciada.

Es fácil darse cuenta de que el problema no está totalmente acotado con las anteriores expresiones. Los puntos del contorno inferior no pueden ser aproximados por estas, pues no existen puntos de interpolación menores al propio extremo. En estos casos puntuales la aproximación de la derivada se hará mediante diferencias finitas adelantadas, con fórmula equivalente a la atrasada de tres puntos, por tener un orden de precisión par, 2.



Figuras 23a, 23b. Influencia de la discretización de las derivadas. Método BFGS.

Nuevamente se ha prescindido de adjuntar las gráficas asociadas al método DFP, por ser esencialmente semejantes a las anteriores, del método BFGS.

La sencillez del problema hace que no exista una gran diferencia a la hora de utilizar uno u otro método.

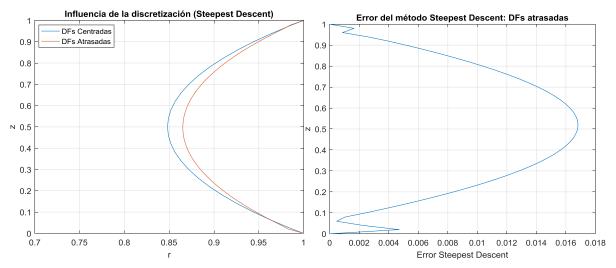
El error máximo se obtiene en el entorno del radio inferior, donde la aproximación de la derivada se realiza de forma completamente distinta al resto del espectro.

La solución obtenida para estos dos métodos es:

$$A_{DFP_{DFAt}} = 0.95225347$$
 $A_{BFGS_{DFAt}} = 0.95225347$

Prueba de la ejecución similar de estos dos métodos es la obtención del mismo valor del área para ellos. No obstante, este valor difiere en mayor medida de la solución analítica en relación al obtenido mediante diferencias finitas centradas. Esto se debe al error asociado a este acondicionamiento, de un orden mayor, 10⁻³.

Los tiempos de ejecución, por otro lado, son mayores, aunque del mismo orden de magnitud.



Figuras 24a, 24b. Influencia de la discretización de las derivadas. Método SD.

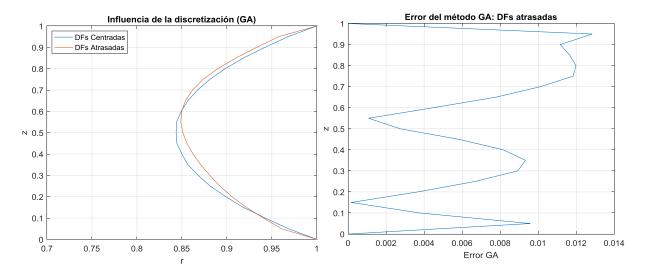
La utilización de diferencias finitas atrasadas exige un inmenso esfuerzo computacional a este método. Tan es así que no ha sido posible hacer converger la solución, de modo que los gráficos presentados están asociados a una solución primitiva, en proceso de optimización. El área obtenida es la siguiente:

$$A_{SD_{DEAt}} = 0.95297611$$

El error es considerablemente mayor a los anteriores en la etapa actual de la optimización. Recordando el comportamiento del algoritmo, en previos apartados, cuando el número de iteraciones era suficientemente alto, todo parece indicar que la solución conseguida mediante el método del descenso más empinado acabaría siendo prácticamente igual a la mostrada en las *Figuras 23a, 23b*.

En cuanto a la evaluación computacional, la ejecución ha parado tras un millón de evaluaciones de la función, después de 5000 iteraciones y 42.2372 segundos.

Descartamos definitivamente este método de descenso para el problema de estudio.



Figuras 25a, 25b. Influencia de la discretización de las derivadas. Método GA.

En las gráficas superiores se representan comparativamente las soluciones para distintas discretizaciones de las derivadas, y el error cometido al utilizar diferencias finitas atrasadas. Todo esto para el algoritmo genético.

Los resultados obtenidos presentan un cierto carácter aleatorio, como es de esperar de un método heurístico. Para distintas ejecuciones realizadas se han obtenido, precisamente, distintas soluciones. Todas ellas tienen en común esa forma de catenaria, más o menos suavizada. Por otro lado, mientras que el orden de magnitud del error es el mismo, las cotas en que este alcanza un máximo o mínimo varían de un ensayo a otro.

En cuanto a la solución graficada en las figuras anteriores, se obtuvieron los siguientes resultados:

$$A_{GA_{DFAt}} = 0.95396107$$

Se repite que el anterior no es un valor de especial interés, pues la aleatoriedad propia de los métodos heurísticos hará oscilar el resultado anterior en un cierto intervalo de validez.

Las características computacionales de la simulación numérica son:

Número de generaciones necesarias: 1053

Número de evaluaciones de la función: 210800

Tiempo de ejecución: 13.7528 segundos

El tiempo de ejecución, así como el resto de las características, crece con respecto al obtenido mediante la utilización de diferencias finitas atrasadas.

En conclusión, el empleo de diferencias finitas atrasadas (o, equivalentemente, adelantadas) no representa una mejora en prácticamente ningún aspecto de los considerados, con respecto a las diferencias finitas centradas. Una manera de mejorar la exactitud de los métodos empleados podría ser la utilización de discretizaciones de orden de precisión mayor, es decir, que utilizan un mayor número de puntos de interpolación para la aproximación de la derivada en un punto. Esto conseguirá, no obstante, aumentar considerablemente la complejidad computacional del problema, por lo que será deber del interesado el escoger la relación precisión-coste computacional deseada.

4. PROBLEMA CON RESTRICCIONES

Los anteriores apartados están dedicados a la resolución del problema de la superficie de equilibrio que adopta una pompa de jabón entre dos anillos de radios iguales y coaxiales. Se ha resuelto el problema libre de restricciones.

El Diccionario de la Lengua Española define *restringir* como "ceñir, circunscribir, reducir a menores límites", definición que se aplicará al caso de estudio. En el caso de la optimización para el cálculo de mínimos locales existen dos tipos de restricciones básicas:

Restricciones estrictas. Son de la forma:

$$r_k(\mathbf{u}_1, ..., \mathbf{u}_N) = 0$$
, para $k = 1, ..., m$, con $m < N$

Estas primeras m restricciones son restricciones estrictas y deben definir una variedad suave de dimensión N-m. Para asegurar que el dominio admisible es una variedad suave, se hacen las siguientes hipótesis respecto a estas restricciones:

- → Las restricciones son compatibles.
- \rightarrow Las restricciones estrictas son tales que los vectores $\nabla r_1, ..., \nabla r_m$ son linealmente independientes entre sí.
- **Restricciones unilaterales.** Son de la forma:

$$r_k(u_1, ..., u_N) \ge 0$$
, para $k = m + 1, ..., m + n$, con $m + n < N$

Las restantes n-m restricciones son restricciones unilaterales que definen la frontera del dominio. En cada punto de la frontera, una al menos de las restricciones unilaterales es estricta (verifica la igualdad). Estas se conocen como restricciones activas en ese punto, el resto son inactivas. Para asegurar que la frontera es suave a trozos, se hace la siguiente hipótesis para las restricciones unilaterales:

 \rightarrow Las restricciones estrictas activas en cada punto de la frontera son tales que los correspondientes vectores ∇r_j son linealmente independientes entre sí y linealmente independientes de los vectores $\nabla r_1, \dots, \nabla r_m$ asociados a las restricciones estrictas.

Considerando solamente las restricciones estrictas y manipulando las ecuaciones del sistema de restricciones empleando un enfoque variacional, se obtiene que los extremos del problema con restricciones están sujetos al siguiente sistema de Lagrange:

$$abla F(oldsymbol{u}_0) = \lambda_1
abla r_1(oldsymbol{u}_0) + \cdots + \lambda_m
abla r_m(oldsymbol{u}_0)$$
 $r_k(oldsymbol{u}_0) = 0$, para $k = 1, ..., m$

donde λ_k son los multiplicadores de Lagrange.

En el presente apartado se estudiará el comportamiento de los distintos métodos de optimización a la hora de resolver el problema anterior con una restricción estricta de volumen dada, de la forma:

$$V = \int_{0}^{1} F^2 dz$$

donde V no podrá ser muy diferente del valor correspondiente a la solución obtenida anteriormente, pues podría dejar de existir o ser inestable.

Estas restricciones se han hecho en base al volumen analítico obtenido. Así, al hacer uso de los comandos de búsqueda de mínimos con restricciones, *fmincon*, se introduce entre sus argumentos esta restricción dada, que condiciona las nuevas soluciones.

Se estudian los casos en que el volumen restricción es el siguiente:

$$75\% V_0$$
 $125\% V_0$ $150\% V_0$

donde $V_0 = V_{FA} = 0.80899551$.

Para este análisis se ha elegido utilizar el algoritmo SQP (*Sequential Quadratic Programming*), basado en el gradiente, con una aproximación de la matriz hessiana basada en el método BFGS. En una segunda parte de este apartado, también se estudiará la respuesta del algoritmo genético a la introducción de esta restricción de volumen.

4.1. MÉTODO SQP

Los métodos de programación cuadrática son una serie de métodos consolidados a lo largo de los años 70, considerados los algoritmos más eficientes para la resolución numérica de problemas de optimización no lineales

El sistema de Lagrange planteado anteriormente se resuelve de forma iterativa. Para cada paso de la iteración, la programación cuadrática (u_{k+1}, λ_{k+1}) minimiza el siguiente problema cuadrático con restricciones lineales:

$$\min_{\mathbf{u}} f_k + [\partial_{\mathbf{u}} f - \lambda^T \partial_{\mathbf{u}} r]_k (\mathbf{u} - \mathbf{u}_k) + \frac{1}{2} (\mathbf{u} - \mathbf{u}_k)^T [\partial_{\mathbf{u}\mathbf{u}} f - \lambda^T \partial_{\mathbf{u}\mathbf{u}} r]_k (\mathbf{u} - \mathbf{u}_k)$$
$$[\partial_{\mathbf{u}} r]_k (\mathbf{u} - \mathbf{u}_k) = -r_k$$

que se obtiene reteniendo términos de segundo orden (respecto de $m{u}$) en la función lagrangiana y linealizando la restricción.

La programación cuadrática puede combinarse con métodos de descenso, preferiblemente con descenso basado en BFGS, más eficaz, como se ha practicado. Al igual que

en optimización sin restricciones, se obtienen métodos convergentes para condiciones iniciales genéricas.

Antes de mostrar los resultados obtenidos, es interesante comentar el algoritmo de optimización utilizado.

SQP es una mejora de la herramienta *active-set*. Esto es, combina BFGS con descenso sobre la formulación mediante programación cuadrática, penalizada para redefinir en cada paso las restricciones unilaterales activas e inactivas. Aparte de esto, SQP introduce dos nuevos atractivos. Primero, se obliga a que se verifiquen las restricciones activas en cada paso, utilizando una aproximación cuadrática de estas restricciones combinada con un proceso iterativo. En segundo lugar, se utilizan subrutinas apropiadas del álgebra lineal para mejorar el uso de la memoria. Generalmente requiere un número mayor de iteraciones que *active-set*, dando resultados más precisos.

El acondicionamiento del problema vuelve a ser el mismo que el adoptado para los casos generales del primer apartado. Se reescribe por comodidad:

- La coordenada vertical z es discretizada en 51 puntos, entre [0, 1].
- Se hace uso de una distribución equiespaciada de salto $\Delta z = \frac{1}{50}$.
- La aproximación de las derivadas primera y segunda se hace a partir de diferencias finitas centradas con tres puntos. Los extremos inferior y superior habrán de aproximarse mediante diferencias finitas adelantadas y atrasadas, respectivamente.
- Las integrales que permiten obtener el área y volumen resultantes son realizadas a partir de la regla del trapecio.

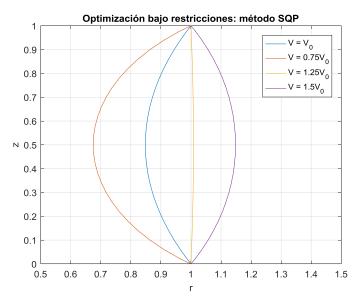
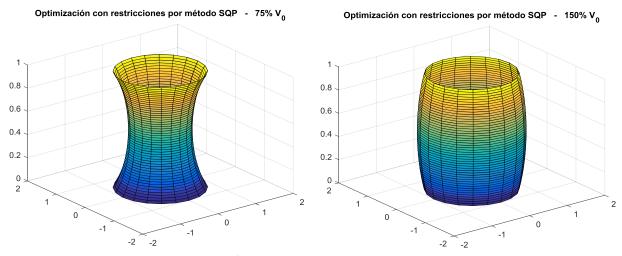


Figura 26. Resolución numérica del problema con restricciones. Método SQP.



Figuras 27a, 27b. Representación tridimensional de las soluciones obtenidas para las restricciones de volumen de 75% y 150%.

De la primera figura, 26, se observa que las curvas obtenidas se adaptan a la imposición de volumen dada. La del 75% encerrará una menor cantidad de espacio, estrechándose a lo largo de la vertical. La curva del 100% será esencialmente idéntica a la obtenida en el caso general. Para restricciones de mayor proporción de volumen, la curva obtenida seguirá alejándose del eje de revolución, superando incluso el área y volumen encerrado para un hipotético cilindro, como se deduce de la *Figura 27b*.

Los resultados obtenidos para el área son evidentemente distintos, pero se puede asegurar que constituyen el valor mínimo para la restricción de volumen dada.

$$A_{75\%} = 0.98970315 \qquad A_{100\%} = 0.95358485 \qquad A_{125\%} = 1.00579216 \qquad A_{150\%} = 1.16186888$$

No debe extrañar el hecho de que la mínima de las áreas sea la segunda, aun cuando el volumen encerrado menor considerado sea el del primero. Evidentemente la superficie minimal, que es única como su volumen asociado, ya había sido obtenida anteriormente.

Las características computacionales del método empleado no sufren grandes variaciones para las distintas restricciones dadas. El tiempo de ejecución oscila entre 0.35-0.50 segundos, las iteraciones son 60 y el número de evaluaciones de la función ronda las 3500. Lógicamente, al presentar restricciones la complejidad del método será algo superior a la presentada por el método BFGS. No obstante, los resultados obtenidos son razonablemente buenos, diferenciándose a partir de la cuarta posición decimal.

Se sugería en el enunciado la inestabilidad del resultado para un determinado valor de la restricción. El programa es capaz de resolver el problema planteado eficazmente, no obstante, la solución deja de tener un significado físico por la incongruencia de esta. Por ejemplo, por obtenerse un radio F negativo, para ciertos puntos de la discretización.

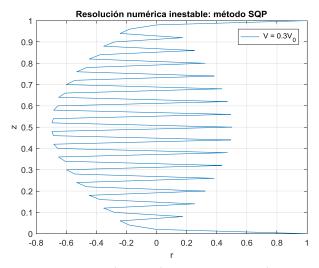


Figura 28. Resolución numérica inestable. Método SQP.

Se ha conseguido mediante un proceso de ensayo y error estimar el momento en que comienza a aparecer esta inestabilidad en la solución. Así, se obtuvo que cuando se introduce un volumen menor al 35% del volumen analítico, el resultado deja de ser razonable. Para más inri, los tiempos de ejecución, así como el número de iteraciones y evaluaciones de la función se cuadriplican en estos casos.

4.2. MÉTODO GA

El mismo problema se ha planteado para el caso en que se realiza la optimización mediante métodos heurísticos. Nuevamente se ha hecho uso del *Genetic Algorithm*, que viene implementado entre las funciones de MATLAB, lo que hace cómoda su utilización. Este método genético implementa las restricciones con el algoritmo *Augmented Lagrangian*.

La complejidad computacional del problema puede hacerse terriblemente alta e, incluso, inestable cuando el número de puntos a considerar sobrepasan una cierta cantidad, no precisamente alta. Para el estudio del comportamiento del algoritmo genético con restricciones se ha escogido una distribución equiespaciada de 21 puntos. El resto de parámetros del problema siguen siendo los mismos:

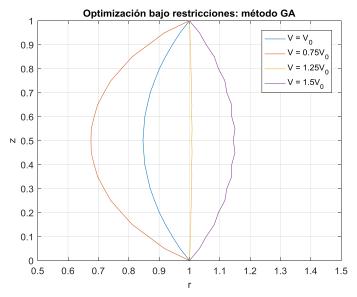


Figura 29. Resolución numérica del problema con restricciones. Método GA.

Se observa un resultado bastante bueno, con curvas bien definidas según los puntos de la discretización. La solución es razonablemente parecida a la obtenida mediante programación cuadrática. La adaptación de la superficie minimal a su debido volumen encerrado se sigue haciendo palpable en la figura anterior.

Las áreas obtenidas son:

$$A_{75\%} = 0.98931384$$
 $A_{100\%} = 0.95338375$ $A_{125\%} = 1.00557631$ $A_{150\%} = 1.16069891$

Estos resultados presentan un error ligeramente mayor que los conseguidos mediante el algoritmo SQP, torciéndose también en el cuarto decimal.

Por otro lado, es de esperar un aumento significativo en el coste computacional de la resolución mediante GA. Los tiempos de ejecución oscilan arbitrariamente entre los 60 y 80 segundos para los distintos casos considerados.

Cabe presentar la inestabilidad del algoritmo empleado, propiciada por la aleatoriedad propia de los métodos heurísticos. Para comprobar la fiabilidad de esta resolución numérica se realizaron más simulaciones equivalentes, es decir, bajo el mismo acondicionamiento.

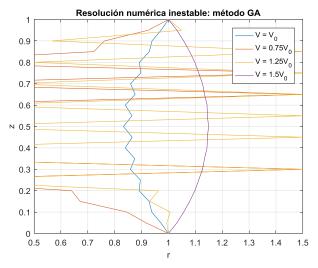
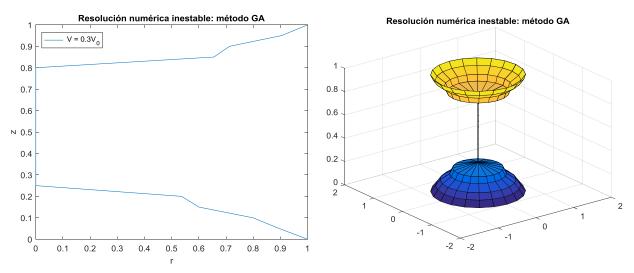


Figura 30. Resolución numérica inestable. Método GA.

Primero de todo, el fallo del algoritmo genético, o el sinsentido del resultado anterior, no debe su explicación a la incompatibilidad entre los datos de entrada y las posibilidades físicas, como se veía en la *Figura 28*. En cambio, se podría decir que el algoritmo genético a veces puede lograr la convergencia a partir de soluciones inesperadas, carentes de sentidos.

Por otro lado, una solución errática sigue pudiendo obtenerse al imponer una restricción de volumen físicamente inviable.



Figuras 31a, 31b. Resolución numérica inestable. Método GA.

Físicamente se encuentra sentido a este último resultado encontrado en el necesario desacoplamiento de la superficie continua, o pompa, en dos volúmenes separados, de tal manera que acaban por formar dos casquetes esféricos, en la medida en que la discretización lo permite.

Conocer el volumen a partir del cual se produce la separación de la membrana fluida entraña una elevada complejidad matemática, que se añade a la aleatoriedad del algoritmo genético. De modo aproximado, se ha comprobado que la formación de estos casquetes esféricos se produce cuando la restricción de volumen introducida es menor al 50% del volumen analítico.

5. DESIGUALDAD DE LOS RADIOS

El último caso de estudio consiste en la resolución numérica del problema cuando los radios de los anillos son desiguales. Estos siguen conservando el paralelismo y la coaxialidad. Las condiciones de contorno consideradas anteriormente se sustituyen por:

$$F(0) = F_0 - \varepsilon$$

$$F(1) = F_0 + \varepsilon$$

donde ε no podrá alcanzar altos valores, pues la solución podría dejar de existir o ser inestable. $F_0=1$ mantiene el valor del caso general.

Los métodos de estudio considerados vuelven a ser el método BFGS y el algoritmo genético. Se ha escogido el primero por destacarse como el más eficiente de los métodos *quasi-Newton* empleados, en términos computacionales y precisión de los resultados. También se ha elegido el algoritmo genético para tener la posibilidad de comparar los resultados con uno y otro método.

Se analizarán los siguientes casos:

$$\varepsilon_1 = 0.1$$
 $\varepsilon_2 = 0.3$ $\varepsilon_3 = 0.5$

5.1. MÉTODO BFGS

El acondicionamiento del problema vuelve a ser el de apartados anteriores:

- Se discretiza la coordenada vertical z en 51 puntos, entre [0, 1].
- Se hace uso de una distribución equiespaciada de salto $\Delta z = \frac{1}{50}$.
- La aproximación de las derivadas primera y segunda se hace a partir de diferencias finitas centradas con tres puntos. Los extremos inferior y superior se estiman mediante diferencias finitas adelantadas y atrasadas, respectivamente.
- Las integrales que permiten obtener el área y volumen resultantes se realizan mediante la regla del trapecio.

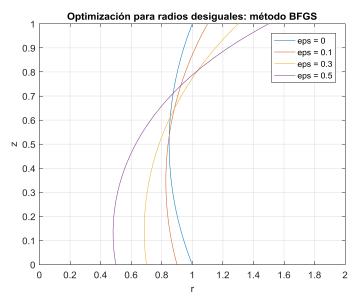


Figura 32. Resolución numérica del problema con radios desiguales. Método BFGS.

Se obtienen unas soluciones acordes a las condiciones introducidas. La curva azul se corresponde con la solución obtenida en el *Apartado 2.2.2*. El resto de curvas van adquiriendo una curvatura más pronunciada según aumenta la desigualdad entre los radios extremos, llegando a adquirir una forma de campana o trompeta.

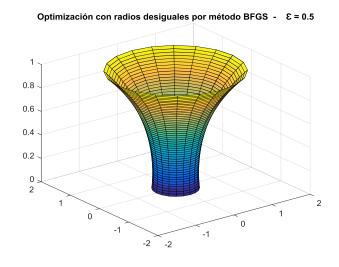


Figura 33. Representación tridimensional de la solución obtenida para la desigualdad de radio, con $\varepsilon=0.5$. Método BFGS.

Las áreas obtenidas como solución a los distintos casos son:

$$A|_{\varepsilon=0}=0.95358482$$
 $A|_{\varepsilon=0.1}=0.97227869$ $A|_{\varepsilon=0.3}=1.10992929$ $A|_{\varepsilon=0.5}=1.33958584$

La superficie minimal, proporcional a estas áreas, aumenta según lo hace la desigualdad de los radios extremos. En los casos en que los radios son distintos, tanto los

tiempos de ejecución (\sim 0.25 segundos) como el número de iteraciones (\sim 85) y evaluaciones de la función (\sim 4500) se duplican en comparación con el caso original, sin variar excesivamente entre casos.

Como en el apartado anterior, estos métodos de resolución pueden tener un comportamiento errático una vez sobrepasan una determinada condición límite. Realizando las pertinentes pruebas se ha obtenido que las simulaciones numéricas dejan de tener sentido físico cuando se introducen ε mayores a 0.55. La inclusión gráfica de estas soluciones erráticas (con radios sobre todo negativos) no tiene ningún interés práctico, por lo que se prescindirá de hacerlo.

5.2. MÉTODO GA

Por último se va a analizar la respuesta del algoritmo genético a la condición de desigualdad de los radios.

El acondicionamiento del problema es el mismo que el expuesto para el método BFGS, salvo el número de puntos, 21, que se ve reducido para agilizar la obtención de resultados que podría ralentizar la robusta complejidad computacional del algoritmo.

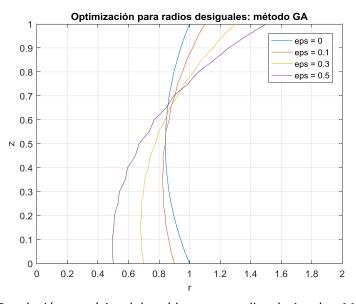


Figura 34. Resolución numérica del problema con radios desiguales. Método GA.

Se observa una gráfica muy parecida a la presentada en la *Figura 32*. Las curvas adquieren, sin embargo, un carácter menos liso, debido principalmente al menor número de puntos considerado. Nuevamente la curvatura de las soluciones aumenta según lo hace la diferencia en el radio de los discos. De este modo, al girar con respecto al eje z la solución obtenida con la condición $\varepsilon=0.5$ habría de esperarse conseguir esa forma de campana o trompeta.

Las áreas obtenidas para los distintos casos son:

 $A|_{\varepsilon=0}=0.95344585$ $A|_{\varepsilon=0.1}=0.97240551$ $A|_{\varepsilon=0.3}=1.10973670$ $A|_{\varepsilon=0.5}=1.33925960$

Si, a modo de valoración, suponemos los resultados obtenidos mediante el método BFGS correctos, es posible valorar la precisión del algoritmo genético. Así, se observa una diferencia a partir del cuarto decimal, estimándose un error del orden de 10⁻⁴.

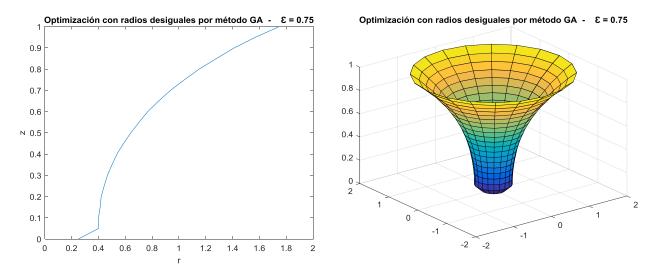
En cuanto al ejercicio computacional, no sería riguroso asociar un número exacto de iteraciones, o evaluaciones de la función a cada uno de los casos, por la fluctuación de los resultados obtenidos. Sí se ha podido comprobado que, generalmente, una mayor diferencia entre los radios supondrá una mayor exigencia computacional. Así, se pueden establecer unos intervalos de confianza para estas características:

Número de generaciones necesarias: 400-1800

Número de evaluaciones de la función: 100000-350000

Tiempo de ejecución: 5-15 segundos

Nuevamente es interesante estudiar la estabilidad del algoritmo cuando las condiciones introducidas inducen a soluciones erráticas. Ensayando para $\varepsilon=0.75$ se obtiene el siguiente resultado:



Figuras 35a, 35b. Resolución numérica del problema con radios desiguales, para alto arepsilon. Método GA

A diferencia del método BFGS, con el algoritmo genético ha sido posible obtener una solución de equilibrio para el caso en que la diferencia de radios es considerablemente alta. La complejidad computacional de este caso no difiere de la obtenida para menores ε , manteniéndose los órdenes de magnitud antes mencionados.

De esta solución merece la pena remarcar la potencia adaptativa de los métodos heurísticos, ejemplificada aquí para el algoritmo genético. Se destacaba en la introducción a los métodos heurísticos la principal ventaja de estos frente a los tradicionales métodos basados en el gradiente: los heurísticos, por lo general, permiten una mayor flexibilidad para el manejo de las características del problema. Esto permite ampliar las posibilidades del interesado.

CONCLUSIONES

Desde la primera mitad del siglo pasado se ha estado trabajando ininterrumpidamente en la búsqueda de nuevas herramientas que permiten mejorar las ya existentes capacidades de optimización.

En el presente informe se ha podido introducir el funcionamiento y las bases de la optimización computacional moderna, quedándonos en la superficie de este extensísimo campo. Así, se han estudiado los tradicionales métodos BFGS y DFP, basados en el gradiente, así como el algoritmo genético, un método heurístico. En relación al problema de estudio, se ofrecen las siguientes conclusiones:

- En cuanto a los métodos quasi-Newton, cabe destacar el método BFGS, actualización del DFP. Su elevada eficiencia computacional lo sitúa por delante del propio método DFP y de los métodos de descenso. Acompaña a su razonable precisión numérica su buena adaptación a la alteración de los parámetros de estudio. Se puede argumentar en su contra una mayor complejidad técnica a la hora de su programación, en comparación con el método del descenso más empinado, donde se hace innecesaria la aproximación de matrices hessianas.
- El algoritmo genético, o en general los métodos heurísticos, no representan un enfoque adecuado al problema de la pompa de jabón, extremadamente sencillo. El coste computacional de estos métodos es muy alto en comparación con los tradicionales métodos basados en el gradiente y el caso presentado no es digno de su utilización. Solamente en los últimos casos se pudieron observar las ventajas del algoritmo genético frente a los métodos de tipo Broyden, cuando se obtuvo una solución acotada y tangible para un problema mal acondicionado, errático para el resto de métodos. El empleo de métodos heurísticos constituirá una alternativa altamente viable en el análisis de mayor número de variables.
- Sin ser este un problema multidimensional o de elevada complejidad computacional, la incesante aproximación de matrices hessianas y sus inversas dotan al problema de una gran carga de almacenado, especialmente cuando se ha escogido una N mucho mayor que la unidad. Más recientemente se han desarrollado métodos como el L-BFGS (low-memory BFGS) o técnicas como la conservación de patrones dispersos, que rebajarán en buena medida las implicaciones anteriormente mencionadas.

Por último, y esto es aplicable a cualquier problema a tratar, se ha probado que es sumamente importante conocer las limitaciones de los distintos métodos disponibles, así como su respuesta a las diferentes perturbaciones que puedan surgir durante el trascurso de la resolución de un problema. Entender las capacidades de las distintas técnicas de optimización y sus campos de aplicación permitirá ahorrar (o mejor, optimizar) al empresario tiempo y dinero.

BIBLIOGRAFÍA

Delgado, I., Gómez, I., Perales, J. M. y Vega, J. M. (2019). Apuntes de la asignatura *Control y Optimización*. Moodle. Madrid.

Papalambros, P. Y. y Wilde, D. J. (2000). *Principles of Optimal Design. Modeling and Computation*. 2ª edición. Cambridge, Reino Unido. Cambridge University Press.

Adenso D., Glover, F., Ghaziri, H. M., González, J. L., Laguna, M., Moscato, P., Tseng, F.T. (1996). *Optimización heurística y Redes Neuronales en Dirección de Operaciones e Ingeniería*. Madrid, España. Editorial Paraninfo.

Ito, M., Sato, T. (Noviembre 2007). *In-situ observation of a soap film catenoid - a simple educational physics experiment*. Departamento de Física, Universidad de Aichi, Kariya, 448-8542, Japón. Publicado en *European Journal of Physics*. Web. https://www.researchgate.net/publication/1899881 In situ observation of a soapfilm catenoid - A simple educational physics experiment

Peña, J. M. y Molina, M. E. *Métodos numéricos. Diferenciación numérica*. Universidad de Antioquía. Web.

http://aprendeenlinea.udea.edu.co/lms/men_udea/pluginfile.php/25793/mod_resourc e/content/0/Integracion_numerica/integracion_NUMERICA1.pdf

Magnani, C. *Soap Film and Minimal Surface*. 6 septiembre 2014. Web. https://mathematicalgarden.wordpress.com/2014/09/06/soap-film-and-minimal-surface/

Wikipedia. *Method of steepest descent*. Web. https://en.wikipedia.org/wiki/Method of steepest descent