Optimización 1-dimensional

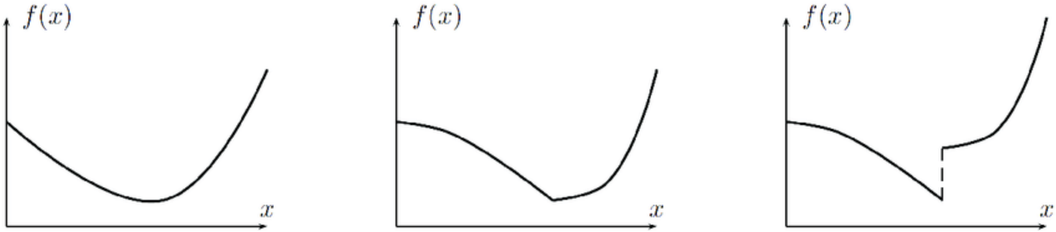
Alan Reyes-Figueroa

Métodos Numéricos II (Aula 19) 22.septiembre.2022

Revisamos algunos métodos para optimización de funciones 1-dimensionales $f : [a, b] \to \mathbb{R}$.

Definición

*Una función $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ es **unimodal** si sólo posee un mínimo local en el intervalo $[a, b]$. En este caso, tal mínimo es global en ese intervalo.*



Ejemplos de funciones unimodales.

Algoritmos para Optimización 1D

Existen algoritmos relativamente simples para optimizar funciones unimodales en cierto intervalo. Estos algoritmos iterativos típicamente requieren un intervalo inicial $[a, b]$ o un punto inicial $\mathbf{x}_0 \in (a, b)$ dentro de una región unimodal de f, y convergen a una solución aproximada del mínimo local.

Algunos de estos esquemas no requieren que f sea diferenciable; otros demandan que f sea de clase C^2 (*e.g.* método de Newton).

- Método de la razon aúrea (*golden ration search*),
- Interpolación parabólica (*quadratic interpolation*),
- Método de Newton,
- ...

Framework general:

- Elegir $[a, b]$ intervalo inicial ó $\mathbf{x}_0$ punto inicial,
- Hallar o establecer un criterio de paro,
- Definir cómo actualizar $\mathbf{x}_k$.

Métodos I (para hallar raíces)

Cuando la función $f : \Omega \subseteq \mathbb{R} to \mathbb{R}$ es diferenciable, podemos adaptar los métodos para encontrar raíces $g(x) = 0$, a la derivada de f:

$$f'(x) = 0.$$

En este caso, si f es unimodal en Ω, entonces cualquiera de estos métodos converge al único mínimo de f en Ω.

- Método de bisección,
- Método *regula falsi*,
- Método de la secante,
- Método de Newton,
- Steffensen, Broyden, Halley, $\ldots$

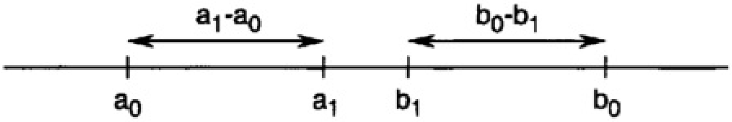
Golden Search

Método de búsqueda de la sección dorada:

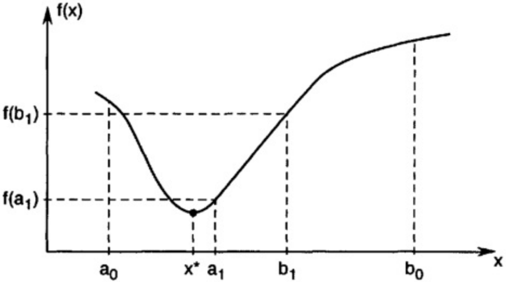
Supongamos que $f : [a_0, b_0] \to \mathbb{R}$ es unimodal.

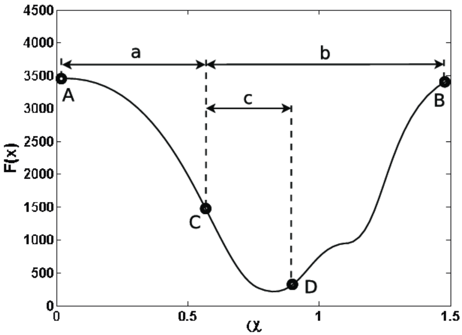
Evaluamos f en dos puntos intermedios $a_0 < a_1 < b_1 < b_0$.
Elegimos a_1, b_1 de modo que la reducción en el rango sea simétrica:

$$a_1 - a_0 = b_0 - b_1 = \rho(b_0 - a_0), \qquad \rho < \tfrac{1}{2}.$$



Golden Search





Comparamos el valor de f en los puntos internos: $f(a_1)$ y $f(b_1)$.

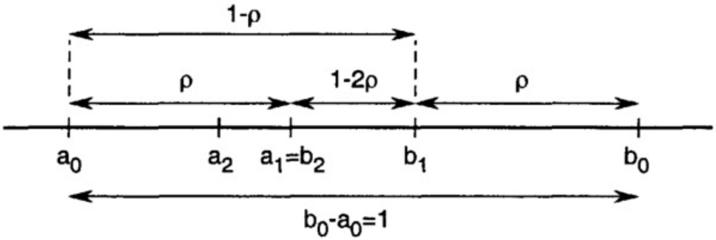
- Si $f(a_1) < f(b_1)$, el mínimo de f está en $[a_0, b_1]$.
- Si $f(a_1) > f(b_1)$, el mínimo de f está en $[a_1, b_0]$.

Golden Search

Queremos minimizar la cantidad de evaluaciones en la función objetivo f.

En el caso $f(a_1) < f(b_1)$, sabemos que el mínimo $x^* \in [a_0, b_1]$. Como a_1 está en este intervalo y ya conocemos $f(a_1)$, hacemos que a_1 coincida con b_2.

Así, sólo necesitamos evaluar f una vez más: a saber, para calcular $f(a_2)$.



Golden Search

Sin pérdida de generalidad, asumimos que el intervalo original $[a_0, b_0]$ es de longitud unitaria. Luego, $\rho(b_1 - a_0) = b_1 - b_2$.

Como $b_1 - a_0 = 1 - \rho$ y $b_1 - b_2 = 1 - 2\rho$, entonces $\rho(1-\rho) = 1 - 2\rho$, de donde $\rho^2 - 3\rho + 1 = 0$, y obtenemos

$$\rho = \frac{3 \pm \sqrt{5}}{2} \qquad \Longrightarrow \qquad \frac{3 - \sqrt{5}}{2} \approx 0.382 \;\; (\text{ya que } \rho < \tfrac{1}{2}).$$

Observe que $1 - \rho = \dfrac{\sqrt{5} - 1}{2} \approx 0.618$, la razón dorada.

Dividir un rango en la razón de ρ tiene el efecto de que el la razón del segmento más corto al más largo es igual a la razón de el mayor a la suma de los dos. Esta regla se llama la sección dorada.

Método de búsqueda de la sección dorada:

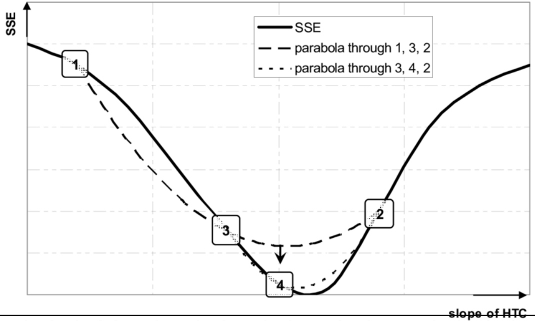
Algoritmo: (*Golden search*)
intervalo de búsqueda.
Outputs: $\mathbf{x}$ mínimo global de f en $[a_0, b_0]$.
```
For k = 0,1,2,... hasta que se cumpla un criterio de paro:
    Compute
```
$$a_{k+1} = b_k - (b_k - a_k)\tfrac{1+\sqrt{5}}{2}, \quad b_{k+1} = a_k + (b_k - a_k)\tfrac{1+\sqrt{5}}{2}.$$

Compute $x_{k+1} = \frac{1}{2}(a_{k+1} + b_{k+1})$.
Set $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha\,\mathbf{d}_k$.
Return $\mathbf{x}_{k+1}$.

Interpolación Parabólica

Otro método de especial simplicidad e interés es el llamado **método de interpolación parabólica** (de Newton).

Idea: Aproximar la función objetivo f por una secuencia de funciones cuadráticas $\widehat{f}_k(x) = a_k x^2 + b_k x + c_k$. Cada una de las $\widehat{f}_k$ aproxima mejor la función f en las cercanías del mínimo global x^*.



Interpolación Parabólica

En la iteración k, $k = 0, 1, 2, \ldots$, tomamos tres puntos distintos x_k, x_{k+1} y $x_{k+2} \in \mathbb{R}$. Construimos la parábola interpolante que pasa por los puntos $(x_k, f(x_k))$, $(x_{k+1}, f(x_{k+1}))$ y $(x_{k+2}, f(x_{k+2}))$, la cual se obtiene al resolver el sistema

$$\begin{pmatrix} 1 & x_k & x_k^2 \\ 1 & x_{k+1} & x_{k+1}^2 \\ 1 & x_{k+2} & x_{k+2}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_k \\ b_k \\ a_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(x_k) \\ f(x_{k+1}) \\ f(x_{k+2}) \end{pmatrix}. \tag{1}$$

La solución de (1) es

$$\begin{aligned} c_k &= -\frac{(x_{k+1}-x_{k+2})f(x_k)+(x_{k+2}-x_k)f(x_{k+1})+(x_k-x_{k+1})f(x_{k+2})}{(x_k-x_{k+1})(x_{k+1}-x_{k+2})(x_{k+2}-x_k)}, \\ b_k &= +\frac{(x_{k+1}^2-x_{k+2}^2)f(x_k)+(x_{k+2}^2-x_k^2)f(x_{k+1})+(x_k^2-x_{k+1}^2)f(x_{k+2})}{(x_k-x_{k+1})(x_{k+1}-x_{k+2})(x_{k+2}-x_k)}, \\ a_k &= +\frac{(x_{k+1}x_{k+2}^2-x_{k+2}x_{k+1}^2)f(x_k)+(x_{k+2}x_k^2-x_kx_{k+2}^2)f(x_{k+1})+(x_kx_{k+1}^2-x_{k+1}x_k^2)f(x_{k+2})}{(x_k-x_{k+1})(x_{k+1}-x_{k+2})(x_{k+2}-x_k)}. \end{aligned}$$

Finalmente, hacemos $x_{k+3} = -\frac{b_k}{2a_k}$, el mínimo de la parábola $\widehat{f}_k$.

Interpolación Parabólica

Algoritmo: (*Parabolic interpolation*)
Inputs: $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ unimodal, $x_0, x_1, x_2 \in [a, b]$ tres puntos distintos.
Outputs: $\mathbf{x}$ mínimo global de f en $[a, b]$.

```
For k = 0,1,2,... hasta que se cumpla un criterio de paro:
    Solve the parabolic interpolation problem (1):
    Compute
```

$$
\begin{aligned}
c_k &= -\frac{(x_{k+1}-x_{k+2})f(x_k)+(x_{k+2}-x_k)f(x_{k+1})+(x_k-x_{k+1})f(x_{k+2})}{(x_k-x_{k+1})(x_{k+1}-x_{k+2})(x_{k+2}-x_k)},\\
b_k &= +\frac{(x_{k+1}^2-x_{k+2}^2)f(x_k)+(x_{k+2}^2-x_k^2)f(x_{k+1})+(x_k^2-x_{k+1}^2)f(x_{k+2})}{(x_k-x_{k+1})(x_{k+1}-x_{k+2})(x_{k+2}-x_k)},\\
a_k &= +\frac{(x_{k+1}x_{k+2}^2-x_{k+2}x_{k+1}^2)f(x_k)+(x_{k+2}x_k^2-x_kx_{k+2}^2)f(x_{k+1})+(x_kx_{k+1}^2-x_{k+1}x_k^2)f(x_{k+2})}{(x_k-x_{k+1})(x_{k+1}-x_{k+2})(x_{k+2}-x_k)}.
\end{aligned}
$$

    Compute $x_{k+3} = -\frac{b_k}{2a_k}$,
Return $\mathbf{x}_{k+3}$.