Fundamentos de Optimización II

Alan Reyes-Figueroa
Métodos Numéricos II

(Aula 21) 08.octubre.2024

Definición

Sea $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ una función y $c \in \mathbb{R}$. El ***conjunto de nivel*** *c de la función f es el conjunto de puntos*

$$S_c = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : \ f(\mathbf{x}) = c\}.$$

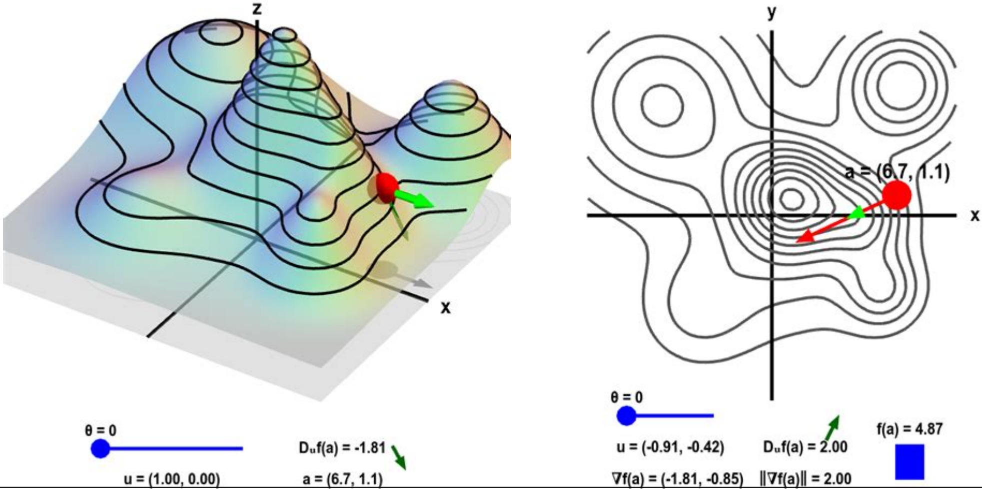
Típicamente, S_c o es vacío, o S_c induce una hiperficie de codimensión 1 (esto es de dimensión $n-1$ dentro de $\mathbb{R}^n$), aunque en ocasiones, S_c se degenera en un objeto de menor dimensión.

Por ejemplo

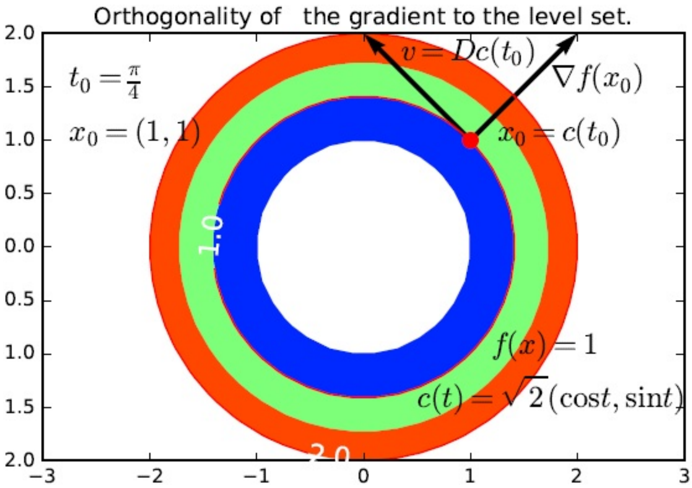
- Si $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$, entonces S_c es una curva.
- Si $f : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$, entonces S_c es una superficie 2-dimensional.
- En general, Si $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, entonces S_c es una hiperficie $(n-1)$-dimensional.

Ejemplo: $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ dada por $f(x, y) = \frac{1}{2}(x^2 + y^2)$. El conjunto de nivel $S_1 = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : \ f(x, y) = 1\}$ corresponde al círculo $x^2 + y^2 = 2$. Una parametrización de S_c se obtiene al hacer $\gamma(t) = (2\cos t, 2\sin t)$, $t \in \mathbb{R}$.

Conjuntos de Nivel



Conjuntos de Nivel



Teorema

Sea $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ diferenciable. Entonces, el vector gradiente $\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p})$ es ortogonal al vector tangente a cualquier curva suave que pasa por $\mathbf{p}$, contenida en el conjunto de nivel S_c de f, donde $c = f(\mathbf{p})$.

<u>Prueba</u>: Sea $\gamma : (a, b) \subseteq \mathbb{R} \to \mathbb{R}^n$ una parametrización diferenciable de la curva suave, tal que $\gamma(0) = \mathbf{p}$, y sea $\gamma'(0) = \mathbf{v}$ el vector tangente a esta curva en $\mathbf{p}$. Consideramos la función $h : (a, b) \subseteq \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, dada por $h = f \circ \gamma$.

Como $\gamma(t)$ está contenida dentro del conjunto de nivel S_c, entonces $f(\gamma(t)) = c$, para todo $t \in (a, b)$. Luego, $h = f \circ \gamma$ es constante.
Aplicando la regla de la cadena a la función $h(t) = (f \circ \gamma)(t)$, resulta

$$0 = \frac{dh}{dt}(0) = Dh(0) = D(f \circ \gamma)(0) = Df(\gamma(0)) \cdot \gamma'(0) = \nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p}) \cdot \mathbf{v},$$

de modo que $\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p}) \perp \mathbf{v}$, como se quería demostrar. $\square$

Gradiente

Recordemos que la derivada direccional de $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, en el punto $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n$, en la dirección del vector unitario $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n$ es

$$D_{\mathbf{u}} f(\mathbf{p}) = Df(\mathbf{p}) \cdot \mathbf{u} = \nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p})^T \mathbf{u}.$$

Propiedad

Suponga que $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ es de clase C^1 en un disco abierto que contiene al punto $\mathbf{p}$. Entonces, para cualquier vector unitario $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n$, $D_{\mathbf{u}} f(\mathbf{p})$ existe y

$$D_{\mathbf{u}} f(\mathbf{p}) = Df(\mathbf{p}) \cdot \mathbf{u} = \nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p})^T \mathbf{u}.$$

De la desigualdad de Cauchy-Schwarz, tenemos

$$||D_{\mathbf{u}} f(\mathbf{p})|| \;=\; ||\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p})^T \mathbf{u}|| \;\leq\; ||\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p})|| \cdot ||\mathbf{u}|| \;=\; ||\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p})||.$$

Si $\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p}) \neq \mathbf{0}$, tomando $\mathbf{u} = \frac{\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p})}{||\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p})||}$, obtenemos

$$D_{\mathbf{u}} f(\mathbf{p}) = ||\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p})||, \qquad D_{-\mathbf{u}} f(\mathbf{p}) = -||\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p})||.$$

Teorema

Supongamos que $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ es de clase C^1 en una bola abierta que contiene al punto $\mathbf{p}$. Entonces, $D_{\mathbf{u}} f(\mathbf{p})$ alcanza un valor máximo de $||\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p})||$ cuando $\mathbf{u}$ es la dirección de $\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p})$ y alcanza un valor mínimo $-||\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p})||$ cuando $\mathbf{u}$ es la dirección de $-\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p})$.

<u>Prueba</u>: Como

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{u}} f(\mathbf{p}) &= \nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p})^T \mathbf{u} = ||\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p})|| \cdot ||\mathbf{u}|| \ \cos \angle(\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p}), \mathbf{u}) \\ &= ||\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p})|| \ \cos \angle(\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p}), \mathbf{u}). \end{aligned}$$

El máximo y el mínimo de $D_{\mathbf{u}} f(\mathbf{p})$ se alcanzan, respectivamente, cuando $\cos \angle(\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p}), \mathbf{u}) = 1$ y $\cos \angle(\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p}), \mathbf{u}) = -1$.

Pero esto ocurre precisamente cuando $\mathbf{u} = \frac{\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p})}{||\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p})||}$ y cuando $\mathbf{u} = -\frac{\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p})}{||\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p})||}$, respectivamente.
En particular, en tales casos, $D_{\mathbf{u}} f(\mathbf{p}) = ||\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p})||$ y $D_{\mathbf{u}} f(\mathbf{p}) = -||\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p})||$, resp. $\square$

Gradiente

Propiedades del gradiente:

- El gradiente, $\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p})$, de una función diferenciable, en el punto $\mathbf{p}$, es ortogonal al conjunto de nivel de la función f en ese punto.
- El vector de gradiente apunta en la dirección de máxima tasa de aumento de la función y el negativo del gradiente apunta en la dirección de la tasa máximo descenso de la función.
- La longitud del vector de gradiente nos dice la tasa de aumento en la dirección de aumento máximo y su negativo nos dice la tasa de disminución en la dirección de la disminución máxima.
- Similarmente, la magnitud de la derivada direccional $|\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{p})^T \mathbf{u}|$ indica la tasa de aumento/reducción de f en la dirección de $\mathbf{u}$.

Definición

*Decimos que $f(\mathbf{x}) = O(g(\mathbf{x}))$, f es **O-grande** respecto de g, cuando $\mathbf{x} \to \mathbf{a}$, si existe una constante C tal que*

$$|f(\mathbf{x})| \leq C|g(\mathbf{x})|, \qquad \textit{para todo } \mathbf{x} \in \mathbb{D}_\delta(\mathbf{a}).$$

Decimos que $f(\mathbf{x}) = O(g(\mathbf{x}))$ cuando $\mathbf{x} \to \infty$ si existen constantes positivas r y C tales que $|f(\mathbf{x})| \leq C|g(\mathbf{x})|$, para todo $\mathbf{x}$ con $||\mathbf{x}|| \geq r$.

Equivalentemente, $f(\mathbf{x}) = O(g(\mathbf{x}))$ cuando $\mathbf{x} \to \mathbf{a}$ si $\lim\limits_{\mathbf{x}\to\mathbf{a}} \left|\frac{f(\mathbf{x})}{g(\mathbf{x})}\right| = C$, para alguna constante $C \neq 0$.

Definición

*Decimos que $f(\mathbf{x}) = o(g(\mathbf{x}))$, f es **o-pequeña** respecto de g, cuando $\mathbf{x} \to \mathbf{a}$, si*

$$\lim_{\mathbf{x}\to\mathbf{a}} \left|\frac{f(\mathbf{x})}{g(\mathbf{x})}\right| = 0.$$

Ejemplo: $f(x) = 5x^3 - 2x + 1$ es $O(x^3)$, cuando $x \to \infty$.

Basta ver que $\lim\limits_{x\to\infty} \left|\dfrac{5x^3 - 2x + 1}{x^3}\right| = 5$.

Esto muestra que $f(x) = O(x^3)$.

Ejemplo: $f(x) = 5x^3 - 2x + 1$ es $o(x^4)$, cuando $x \to \infty$.

Basta ver que $\lim\limits_{x\to\infty} \left|\dfrac{5x^3 - 2x + 1}{x^4}\right| = 0$.

Esto muestra que $f(x) = o(x^4)$.

Ejemplo: $f(x) = x - \sin x$ es $o(x)$, cuando $x \to 0$.

Basta ver que $\lim\limits_{x\to 0} \left|\dfrac{x - \sin x}{x}\right| = \lim\limits_{x\to 0} \left|\dfrac{x - (x - \frac{1}{3!}x^3 + \frac{1}{5!}x^5 - \ldots)}{x}\right| = 0$.

Big O y Little o

Ejemplos de Big O:

- $x = O(x)$, cuando $x \to \infty$,
- $x = O(x^2)$, cuando $x \to \infty$,
- $ax^n = O(x^m)$, para $m \geq n$, cuando $x \to \infty$,
- $ax^n \neq O(x^m)$, para $m < n$, cuando $x \to \infty$,

Ejemplos de little o:

- $x^2 = o(x)$, cuando $x \to 0$,
- $x \neq o(x^2)$, cuando $x \to 0$,
- $x - \sin x = o(x)$, cuando $x \to 0$,
- $x - \sin x = o(x^2)$, cuando $x \to 0$,

Obs! Importante!, la notaciones O y o dependen del punto donde se toma el límite. Ejemplo: $x^2 = o(x^3)$ cuando $x \to \infty$, pero $x^2 \neq o(x^3)$ cuando $x \to 0$.

Teorema de Taylor

Propiedades:

- $f(x) = O(f(x))$.
- Si $f(x) = O(g(x))$, entonces $cf(x) = O(g(x))$, para toda $c \in \mathbb{R}$, $c \neq 0$.
- Si $f_1(x), f_2(x)$ son $O(g(x))$, entonces $f_1(x) + f_2(x) = O(g(x))$.
- Si $f(x) = o(g(x))$, entonces $f(x) = O(g(x))$.
- Si $f(x) = O(g(x))$, entonces $O(f(x)) + O(g(x)) = O(g(x))$.
- Si $f(x) = O(g(x))$, entonces $o(f(x)) + o(g(x)) = o(g(x))$.
- Si $f_1(x) = O(g(x))$, pero $f_2(x) = o(g(x))$, entonces $f_1(x) + f_2(x) = O(g(x))$.
- Si $f(x) = O(g(x))$ y $g(x) = o(h(x))$, entonces $f(x) = o(h(x))$.
- Para $c \in \mathbb{R}$, $c \neq 0$, $cO(g(x)) = O(g(x))$ y $co(g(x)) = o(g(x))$.
- $O(f(x))\, O(g(x)) = O(f(x)g(x))$.
- $o(f(x))\, O(g(x)) = o(f(x)g(x))$.
- $o(f(x))\, o(g(x)) = o(f(x)g(x))$.

Teorema (Fórmula de Taylor en $\mathbb{R}$)

Suponga que $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ *es de clase* C^{m+1} *sobre* $\mathbb{R}$, *y sea* $x_0 \in \mathbb{R}$. *Denotemos,* $h = x - x_0$. *Entonces*

$$f(x) = f(x_0) + h f'(x_0) + \frac{h^2}{2} f''(x_0) + \ldots + \frac{h^m}{m!} f^{(m)}(x_0) + R_{m+1},$$

donde

$$R_{m+1} = \frac{h^{m+1}}{(m+1)!} f^{(m+1)}(x_0 + th), \quad \textit{para algún } t \in (0, 1).$$

Usando la notación Big O, observe que $R_{m+1} = O(h^{m+1})$, si $h \to 0$. Así, la Fórmula de Taylor resulta

$$f(x) = f(x_0) + h f'(x_0) + \frac{h^2}{2} f''(x_0) + \ldots + \frac{h^m}{m!} f^{(m)}(x_0) + O(h^{m+1}).$$

Usando la notación o pequeña, observe que $R_{m+1} = o(h^m)$, si $h \to 0$. Así, la fórmula es

$$f(x) = f(x_0) + h f'(x_0) + \frac{h^2}{2} f''(x_0) + \ldots + \frac{h^m}{m!} f^{(m)}(x_0) + o(h^m).$$

Teorema (Fórmula de Taylor en $\mathbb{R}^n$)

Suponga que $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ es de clase C^{m+1} sobre $\mathbb{R}^n$, y sea $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}$. Denotemos, $\mathbf{h} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_0$. Entonces

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_0) + \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_j}(\mathbf{x}_0)\, h_j + \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{n} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(\mathbf{x}_0)\, h_i h_j + \ldots + \frac{1}{m!}\sum_{|I|=m} \frac{\partial^m f}{\partial \mathbf{x}_I}(\mathbf{x}_0)\, \mathbf{h}_I + R_{m+1},$$

donde

$$R_{m+1} = \frac{1}{(m+1)!}\sum_{|I|=m+1} \frac{\partial^{m+1} f}{\partial \mathbf{x}_I}(\mathbf{x}_0 + t\mathbf{h})\, \mathbf{h}_I, \quad \textit{para algún } t \in (0,1).$$

Aquí, $\mathbf{h} = (h_1, \ldots, h_n)$, y si $I = (i_1, \ldots, i_n) \in \mathbb{N}^n$ es tal que $|I| = \sum_j i_j = m$, entonces denotamos $\mathbf{x}_I = (x_1^{i_1}, \ldots, x_n^{i_n})$, $\mathbf{h}_I = (h_1^{i_1}, \ldots, h_n^{i_n})$ y $\frac{\partial^m f}{\partial \mathbf{x}_I} = \frac{\partial^m f}{\partial x_1^{i_1} \cdots \partial x_n^{i_n}}$.

Al igual que en el caso unidimensional, podemos escribir $R_{m+1} = O(||\mathbf{h}||^{m+1})$ y $R_{m+1} = o(||\mathbf{h}||^{m})$, cuando $\mathbf{h} \to \mathbf{0}$.

Teorema de Taylor

Dos casos particulares:

Teorema (Aproximación de Taylor de primer orden)

Suponga que $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ *es de clase* C^2 *sobre* $\mathbb{R}^n$, *y sea* $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}$, $\mathbf{h} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_0$. *Entonces*

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_0) + Df(\mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{h} + R_2 = f(\mathbf{x}_0) + Df(\mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{h} + O(||\mathbf{h}||^2),$$

donde

$$R_2 = \frac{1}{2} \sum_{|I|=2} \frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{x}_I}(\mathbf{x}_0 + t\mathbf{h})\, \mathbf{h}_I, \quad \textit{para algún } t \in (0,1).$$

Teorema (Aproximación de Taylor de segundo orden)

Suponga que $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ *es de clase* C^3 *sobre* $\mathbb{R}^n$, *y sea* $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}$, $\mathbf{h} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_0$. *Entonces*

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_0) + Df(\mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{h} + \tfrac{1}{2}\, \mathbf{h}^T D^2 f(\mathbf{x}_0)\, \mathbf{h} + R_3,$$

donde

$$R_3 = \frac{1}{3!} \sum_{|I|=3} \frac{\partial^3 f}{\partial \mathbf{x}_I}(\mathbf{x}_0 + t\mathbf{h})\, \mathbf{h}_I, \quad \textit{para algún } t \in (0,1).$$

Teorema de Taylor

En resumen, Si $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ es de clase C^2, podemos escribir

$$
\begin{aligned}
f(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}_0) + Df(\mathbf{x}_0 + t\mathbf{h}), \quad t \in (0,1). \\
f(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}_0) + Df(\mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{h} + \tfrac{1}{2}\,\mathbf{h}^T D^2 f(\mathbf{x}_0 + t\mathbf{h})\,\mathbf{h}, \quad t \in (0,1).
\end{aligned}
$$