Condiciones de Optimalidad

Alan Reyes-Figueroa

Métodos Numéricos II (Aula 22) 08.octubre.2024

Definición

Suponga que $f : \Omega \subseteq \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ *es una función con valores reales, definida sobre* Ω. *Un punto* $\mathbf{x}^* \in \Omega$ *es un* ***mínimo local*** *o* ***minimizador local*** *de* f *si existe* $\varepsilon > 0$ *tal que*

$$f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{x}^*), \qquad \textit{para todo } \mathbf{x} \in \Omega - \{\mathbf{x}^*\} \textit{ con } ||\mathbf{x} - \mathbf{x}^*|| < \varepsilon.$$

Definición

Suponga que $f : \Omega \subseteq \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ *es una función con valores reales, definida sobre* Ω. *Un punto* $\mathbf{x}^* \in \Omega$ *es un* ***mínimo global*** *o* ***minimizador global*** *de* f *sobre* Ω *si*

$$f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{x}^*), \qquad \textit{para todo } \mathbf{x} \in \Omega,\ \mathbf{x} \neq \mathbf{x}^*.$$

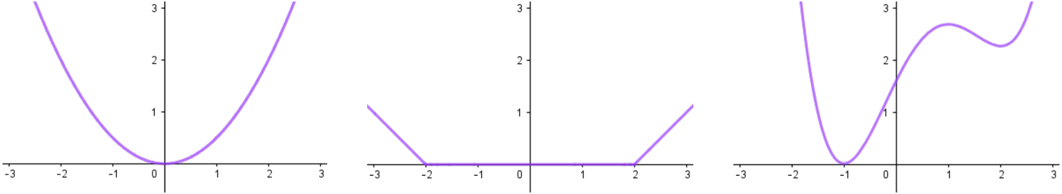
Obs! Reemplazando $\geq$ con $>$ en las definiciones anteriores obtenemos el concepto de un **mínimo local estricto** y de un **mínimo global estricto**, respectivamente.

Optimización

Ejemplo: La función $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $f(x) = x^2$ tiene un mínimo global estricto en $x = 0$. Claramente, $x = 0$ también es un mínimo local de f.

Ejemplo: La función $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, dada por $f(x) = \max\{0, |x - 2|\}$ tiene a todos los puntos de intervalo $[-2, 2]$ como mínimos globales. Estos no son estrictos.

Ejemplo: La función $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $f(x) = 3x^4 - 8x^3 - 6x^2 + 12x$ tiene mínimos locales estricto en $x = -1$ y $x = 2$. De éstos, sólo $x = -1$ es un mínimo global.

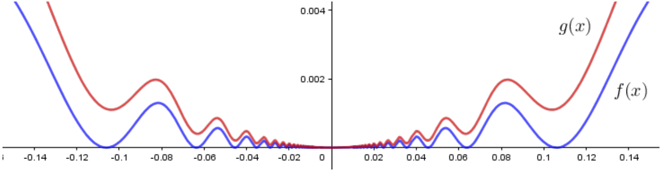


Definición

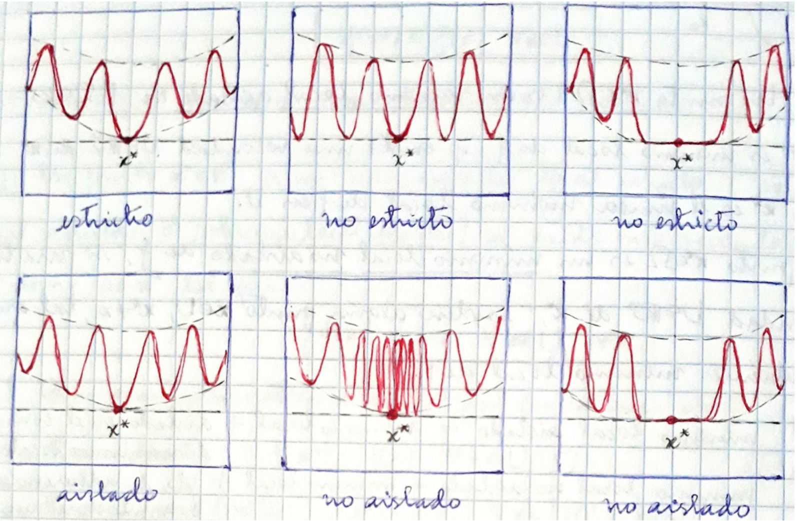
Un punto $\mathbf{x}^* \in \Omega$ *es un* ***mínimo local aislado*** *de* $f : \Omega \subseteq \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, *si* $\mathbf{x}^*$ *es mínimo local de* f *y existe una vecindad* $U \subset \mathbb{R}^n$ *de* $\mathbf{x}^*$ *tal que* $\mathbf{x}^*$ *es el único mínimo local de* f *en* U.
Un punto $\mathbf{x}^* \in \Omega$ *es un* ***mínimo local no aislado*** *de* f, *si para toda vecindad* U *de* $\mathbf{x}^*$, *existe* $\mathbf{x} \in U$, $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}^*$, *tal que* $\mathbf{x}$ *también es mínimo local de* f.

Ejemplo: La función $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $f(x) = x^2 \cos\frac{1}{x} + x^2$, $f(0) = 0$, posee un mínimo local no estricto y no aislado en $x = 0$.

Ejemplo: La función $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $g(x) = x^2 \cos\frac{1}{x} + 2x^2$, $g(0) = 0$, posee un mínimo local estricto y no aislado en $x = 0$.



UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

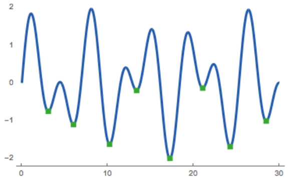


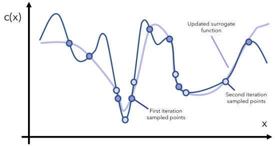
x^*
estricto
x^*
no estricto
x^*
no estricto
x^*
aislado
x^*
no aislado
x^*
no aislado

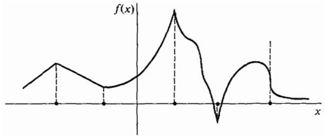
Optimización

Dificultades de la optimización global:

- funciones con muchos mínimos;
- los algoritmos tienden a quedarse atrapados en mínimos locales,
- en el caso de métodos de búsqueda, puede que el óptimo global esté en una región no explorada;
- cuando el mínimo se encuentra dentro de una región donde la función es muy plana (curvatura cercana a 0), los métodos de optimización suelen ser muy lentos;
- no-diferenciabilidad en un punto mínimo.







Fórmula de Taylor:
Si $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ es de clase C^{m+1} sobre $\mathbb{R}^n$, y $\mathbf{h} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_0$, entonces

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_0) + \sum_{k=0}^{m} \frac{1}{k!} D^{(k)} f(\mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{h}^{(k)} + \frac{1}{(m+1)!} D^{(m+1)} f(\mathbf{x}_0 + t\mathbf{h}) \cdot \mathbf{h}^{(m+1)},$$

donde $t \in (0, 1)$ y

$$D^{(k)} f(\mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{h}^k = \sum_{|I|=k} \frac{\partial^k f}{\partial \mathbf{x}_I}(\mathbf{x}_0)\, \mathbf{h}_I = \sum_{|I|=k} \frac{\partial^k f}{\partial x_1^{i_1} \cdots \partial x_n^{i_n}}\, h_1^{i_1} h_2^{i_2} \cdots h_n^{i_n},$$

$I = (i_1, \ldots, i_n)$, $\mathbf{x}_I = (x_{i_1}, \ldots, x_{i_n})$, $\mathbf{h}_I = (h_{i_1}, \ldots, h_{i_n})$.

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

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

Condiciones de Optimalidad

Teorema (Condiciones de Optimalidad de Primer Orden)

Si $\mathbf{x}^*$ es un mínimo local (o un máximo local) de la función $f : \Omega \subseteq \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, y f es de clase C^1 en una vecindad abierta de $\mathbf{x}^*$, entonces $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$.

<u>Prueba</u>: Hacemos la prueba para $\mathbf{x}^*$ mínimo local. Suponga que $\nabla f(\mathbf{x}^*) \neq \mathbf{0}$. Por lo tanto, podemos encontrar una dirección $\mathbf{h} = -\alpha \frac{\nabla f(\mathbf{x}^*)}{||\nabla f(\mathbf{x}^*)||} = -\alpha \mathbf{u}$, tal que $D_{\mathbf{h}} f(\mathbf{x}^*) = \nabla f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{h} < 0$.

Por el Teorema de Taylor, si $\mathbf{x} = \mathbf{x}^* + \mathbf{h}$, tenemos $f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}^*) + \nabla f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{h} + o(||\mathbf{h}||)$. Cuando $\alpha \to 0$, entonces $\mathbf{h} \to 0$, resulta que $\nabla f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{h} + o(||\mathbf{h}||) < 0$, ya que $o(||\mathbf{h}||)$ se acerca a cero, mucho más rápido que $\nabla f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{h}$. De hecho,

$$\lim_{\alpha \to 0} \frac{|\nabla f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{h}|}{||\mathbf{h}||} = \frac{\nabla f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{u}}{||\mathbf{u}||} = \nabla f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{u} < 0.$$

De ahí que, $f(\mathbf{x}) < f(\mathbf{x}^*)$, y esto contradice el la hipótesis de que $\mathbf{x}^*$ es un mínimo local. Portanto, $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$. $\square$

Definición

*Un punto $\mathbf{x} \in \Omega = \operatorname{dom} f$ que satisface que $\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ se llama un **punto crítico** o **punto estacionario** de f.*

De acuerto a la condición de Optimalizad de Primer Orden, todo mínimo local debe ser un punto estacionario de f.

Teorema (Condiciones de Optimalidad de Segundo Orden)

Si $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ es un mínimo (máximo) localde $f : \Omega \subseteq \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, y f es de clase C^2 es una vecindad abierta de $\mathbf{x}^*$, entonces $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$, y la hessiana

$$D^2 f(\mathbf{x}^*) \succeq 0$$

es positiva semidefinida (negativa semidefinida).

Prueba: Al igual que antes, hacemos la prueba para el caso de $\mathbf{x}^*$ mínimo local. El caso del máximo se prueba de forma similar.

Condiciones de Optimalidad

Suponga que $D^2 f(\mathbf{x}^*)$ no es positiva semidefinida. Entonces, existe $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^n$ tal que $\mathbf{h}^T D^2 f(\mathbf{x}^*)\, \mathbf{h} < 0$.
Por continuidad de $D^2 f$, y la preservación de signo, existe una bola $\mathbb{D}_r(\mathbf{x}^*)$ y un intervalo $(0, \varepsilon)$, tal que $\mathbf{h}^T D^2 f(\mathbf{x}^* + \widehat{\varepsilon}\mathbf{h})\, \mathbf{h} < 0$, para todo $\widehat{\varepsilon} \in (0, \varepsilon)$.

Aplicando el Teorema de Taylor alrededor de $\mathbf{x}^*$, existe $t \in (0, 1)$, tal que

$$f(\mathbf{x} + \widehat{\varepsilon}\mathbf{h}) = f(\mathbf{x}^*) + \widehat{\varepsilon} \nabla f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{h} + \tfrac{1}{2}\widehat{\varepsilon}^2 \mathbf{h}^T D^2 f(\mathbf{x}^* + t\widehat{\varepsilon}\mathbf{h})\, \mathbf{h}.$$

Usando el hecho que $\nabla f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{h} = \mathbf{0}$ (ya que $\mathbf{x}^*$ es mínimo local), y el hecho que $\mathbf{h}^T D^2 f(\mathbf{x}^* + t\widehat{\varepsilon}\mathbf{h})\, \mathbf{h} < 0$, obtenemos

$$f(\mathbf{x}^* + \widehat{\varepsilon}\mathbf{h}) < f(\mathbf{x}^*),$$

lo cual contradice la hipótesis de que $\mathbf{x}^*$ es un mínimo local de f. Portanto, $D^2 f(\mathbf{x}^*)$ es positiva semidefinida. $\square$

Teorema (Condiciones Suficientes de Optimalidad)

Suponga que D^2f existe y es continua en una vecindad de $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$, que $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$, y que la hessiana $D^2f(\mathbf{x}^*)$ es positiva definida (negativa definida).
Entonces $\mathbf{x}^*$ es un mínimo (máximo) local estricto de f.

<u>Prueba</u>: Existe una bola $\mathbb{D}_r(\mathbf{x}^*) = \{\mathbf{x} : \ ||\mathbf{x} - \mathbf{x}^*|| < r\}$ para la cual
$q(t) = \mathbf{h}^T D^2f(\mathbf{x}^* + t\mathbf{h})\,\mathbf{h} > 0$, para todo $\mathbf{x}^* + t\mathbf{h} \in \mathbb{D}_r$, con $t \in (0,1)$ y $\mathbf{h} = \mathbf{x} - \mathbf{x}^*$.
(Esto es consecuencia de la preservación de signo, ya que la función q es continua y $q(0) = \mathbf{h}^T\, D^2f(\mathbf{x}^*)\,\mathbf{h} > 0$).

Usando el Teorema de Taylor, con $||\mathbf{h}|| < r$, y como $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$, se tiene que existe $t \in (0,1)$ tal que

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}^*) + \tfrac{1}{2}\mathbf{h}^T\, D^2f(\mathbf{x}^* + t\mathbf{h})\,\mathbf{h},$$

Como $\mathbf{x}^* + t\mathbf{h} \in \mathbb{D}_r(\mathbf{x}^*)$, luego $\mathbf{h}^T\, D^2f(\mathbf{x}^* + t\mathbf{h})\,\mathbf{h} > 0 \quad \Rightarrow \quad f(\mathbf{x}) > f(\mathbf{x}^*)$, para todo $\mathbf{x} \in \mathbb{D}_r(\mathbf{x}^*)$. Esto muestra que $\mathbf{x}^*$ es un mínimo local estricto de f. $\square$

Condiciones de Optimalidad

Podemos encontrar y clasificar puntos estacionarios de la siguiente manera:

1. Encontrar los puntos críticos $\mathbf{x}$ en los que $f(\mathbf{x}) = 0$.
2. Obtener la Hessiana $Hf(\mathbf{x}) = D^2 f(\mathbf{x})$.
3. Determinar el carácter de $Hf(\mathbf{x})$ para cada punto crítico $\mathbf{x}$.
   - Si $D^2 f(\mathbf{x})$ es positiva (negativa) definida, entonces $\mathbf{x}$ es un mínimo (máximo) local.
   - Si $D^2 f(\mathbf{x})$ es indefinida, $\mathbf{x}$ es un punto silla.
   - Si $D^2 f(\mathbf{x})$ es positiva (negativa) semidefinida, $\mathbf{x}$ puede ser un mínimo (máximo) local. En este caso, es necesario seguir trabajando para clasificar el punto estacionario.
     Un posible enfoque sería para deducir las terceras derivadas parciales de $f(\mathbf{x})$ y luego calcular el término correspondiente en la serie de Taylor. Si este término es cero, entonces el siguiente término necesita ser calculado y así por delante.

Condiciones de Optimalidad

- En el caso especial donde $D^2 f(\mathbf{x}) = 0$, $\mathbf{x}$ puede ser un minimizador o maximizador ya que las condiciones necesarias se satisfacen tanto en casos.
- Si $D^2 f(\mathbf{x})$ es semidefinida, se requiere más información para caracterización completa de un punto estacionario y más el trabajo es necesario en este caso.
- Un posible enfoque podría ser calcular el tercer término de la serie de Taylor de $f(\mathbf{x})$,

$$D^3 f(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{h}^{(3)} = \frac{1}{3!} \sum_{|I|=3} \frac{\partial^3 f}{\partial \mathbf{x}_I}(\mathbf{x}_0)\, \mathbf{h}_I = \frac{1}{3!} \sum_{i=1}^{3} \sum_{j=1}^{3} \sum_{k=1}^{3} \frac{\partial^3 f}{\partial x_1^{i_1} \partial x_2^{i_2} \partial x_3^{i_3}} \, h_1^{i_1} h_2^{i_2} h_3^{i_3};$$

  y se debe determinar el signo de este término. Si este término es cero, entonces debe calcularse el siguiente término $D^4 f(\mathbf{x})$.
- En general, si los primeros i términos $D^i f(\mathbf{x})$ de la serie de Taylor son todos nulos, debe calcularse el signo de primer término $D^k f(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{h}^{(k)}$ que no se anule.

Ejemplo: Considere la función $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$, dada por $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{6}[(x_1 - 2)^3 + (x_2 - 3)^3]$. En este caso, el gradiente es

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}(x_1 - 2)^2 & (x_2 - 3)^2\end{pmatrix}.$$

Resolviendo $\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, se obtiene que el único punto crítico es $\mathbf{x}^* = (2, 3)^T$. La Hessiana de f es

$$D^2 f(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} x_1 - 2 & 0 \\ 0 & x_2 - 3 \end{pmatrix}.$$

Así, en el punto crítico, $D^2(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$. Las terceras derivadas de f son todas cero, excepto

$$\frac{\partial^3 f}{\partial x_1^3}(\mathbf{x}) = \frac{\partial^3 f}{\partial x_2^3}(\mathbf{x}) = 1.$$

Luego, el término

$$D^3 f(\mathbf{x}^*) \cdot \mathbf{h}^{(3)} = \frac{1}{3!} \sum_{i=1}^{3} \sum_{j=1}^{3} \sum_{k=1}^{3} \frac{\partial^3 f}{\partial x_1^{i_1} \partial x_2^{i_2} \partial x_3^{i_3}} h_1^{i_1} h_2^{i_2} h_3^{i_3} = \frac{1}{6}(h_1^3 + h_2^3)$$

es positivo si $h_1, h_2 > 0$, pero es negativo si $h_1, h_2 < 0$. Portanto, $D^3 f(\mathbf{x}^*) \cdot \mathbf{h}^{(3)}$ toma ambos signos, y $\mathbf{x}^*$ es un punto silla de f.