UNIDAD Nº3

Introducción a los métodos matemáticos de optimización

La experimentación es una función vital en nuestra búsqueda de progreso, aunque el objetivo es a menudo, el descubrimiento de nuevos principios científicos, estableciendo nuevas relaciones de causa-efecto o buscando nuevos métodos mejorados y procesos. Gran parte de la actividad experimental en el ámbito de la ciencia y de la industria se ha dedicado a la búsqueda de condiciones *óptimas* para el desarrollo de procesos.

Conceptos fundamentales en optimización

La teoría de optimización puede ser aplicada a la experimentación para determinar los resultados más beneficiosos del programa experimental. Este objetivo supone que una de las razones fundamentales para la realización de experimentos es establecer las condiciones óptimas de operación de un determinado sistema, siendo esas condiciones aquellas que conducen al mejor resultado. *Resultados* y *condiciones* son palabras claves, *resultados* trae la idea de "variables dependientes" o de "respuesta" y_j, j=1,..m, esto sugiere una relación de efecto con el sistema o actividad. La palabra *condiciones* sugiere una relación de causa en el proceso experimental, corresponde entonces a las variables independientes x_i, i=1,..,n.
Si consideramos las respuestas de un sistema relacionado con las variables independientes mediante un modelo matemático de la forma $y_j=g_j(x_i, i=1,..,n)$, j=1,..m, la optimización involucra la manipulación de las x_i para lograr los valores óptimos de y_j.

1. Continuidad de funciones

Sea una función y(X), dónde y representa la variable dependiente y X el n-vector de variables del independientes x_i, i=1,..n, para realizar una optimización analítica o numérica es preferible que dicha función sea continua, y que también lo sean sus derivadas.
Para que una función sea continua, debe cumplir con las siguientes condiciones:

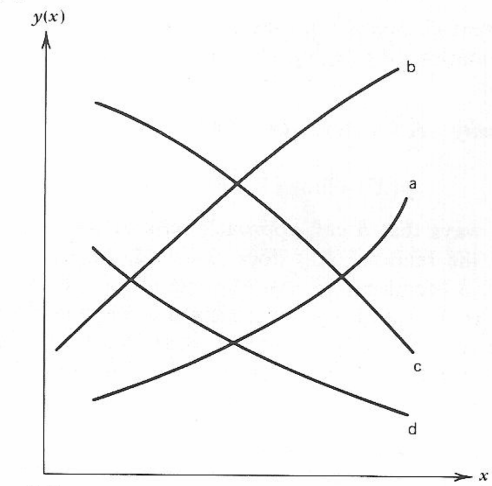
- $y(x_0)$ existe
- $\lim_{x\to x_0} y(x)$ existe
- $\lim_{x\to x_0} y(x) = y(x_0)$

Un ejemplo de función discontinua es aquella que relaciona la caída de presión por unidad de longitud para una tubería de un diámetro determinado si la cañería esta disponible solo en diámetros estándar, entonces la variable dependiente es discreta y la función discontinua.

2. Características de las funciones

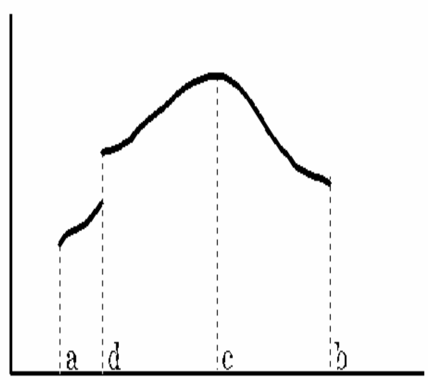
Dados dos puntos x_1 y x_2 del dominio de una función y(x), tal que $x_2>x_1$

- Si $y(x_1)<y(x_2)$, se dice que la función es *monotónicamente creciente*
- Si $y(x_1)>y(x_2)$, se dice que la función es *monotónicamente decreciente*
- La función será monotónicamente no decreciente o monotónicamente no creciente si $y(x_1) \geq y(x_2)$ o $y(x_1) \leq y(x_2)$, respectivamente.



Examples of (a) monotonically increasing, (b) monotonically nondecreasing, (c) monotonically decreasing, and (d) monotonically nonincreasing functions $y(x)$.

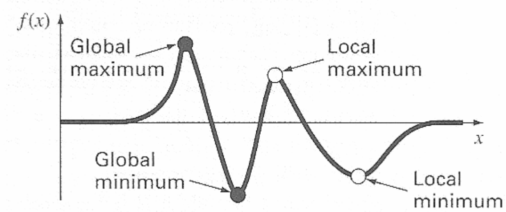
La modalidad de las funciones es particularmente importante en optimización, el termino *unimodal* se refiere a funciones que tienen un solo extremo, mínimo o máximo, mientras que *multimodal* se refiere a funciones que presentan dos o más extremos.
En la figura siguente la función es unimodal si se está buscando un máximo -existe uno solo, el punto c- pero no lo sería si se buscase un mínimo, pues hay dos en la zona de soluciones admisibles, los puntos a y b, los extremos del intervalo. Nótese que la unimodalidad no se ve afectada por la discontinuidad -de la función y su derivada- que se presenta en el punto d.



Si bien el concepto de unimodalidad es muy simple de plantear y puede convertirse en una estrategia eficiente para la búsqueda de un óptimo, tiene un inconveniente básico y es que para asegurar su cumplimiento debería conocerse exactamente el comportamiento de la función objetivo, cuestión que, en la práctica, es imposible. Más aún, sin este conocimiento, que es la situación normal, solo se está en condiciones de establecer cuando la función no es unimodal.
Para una función de una simple variable, si x* es el punto donde y(x) presenta un máximo, la unimodalidad se define como:

$y(x_1)<y(x_2)<y(x^*)$, $\quad x_1<x_2<x^*$
$y(x_4)<y(x_3)<y(x^*)$, $\quad x^*<x_3<x_4$

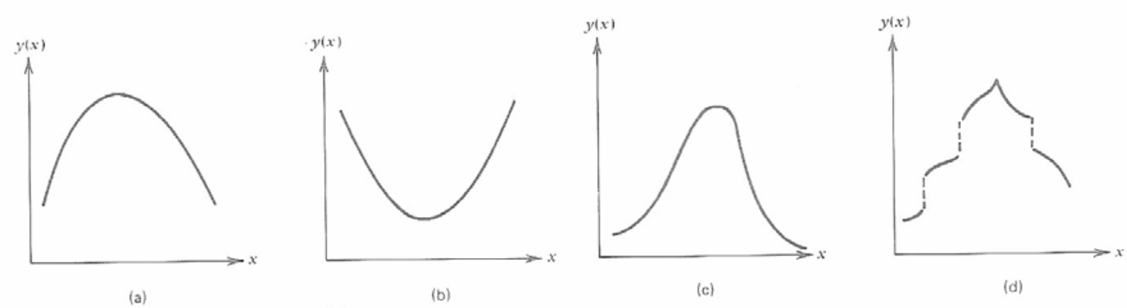
Para un máximo, la función será monotónicamente creciente a la izquierda del máximo y monotónicamente decreciente a la derecha, un razonamiento análogo puede realizarse para un mínimo.
En casi todos los casos estamos interesados en determinar el valor máximo o mínimo absoluto de la función, debiendo tener cuidado en no dar como resultado un optimo local en lugar de el optimo global. Distinguir un extremo global de uno local hace difícil la optimización de la función. Hay tres maneras usuales de aproximar este problema, primero, el comportamiento de la función a veces puede obtenerse gráficamente, segundo, hallar el óptimo variando ampliamente o al azar el punto de partida, y seleccionando el mejor de éstos como optimo global, y finalmente, perturbando el punto de partida asociado con un optimo local y observando que la rutina devuelva un punto mejor o si siempre devuelve el mismo punto. Aunque todas estas aproximaciones pueden ser útiles, el hecho es que en algunos problemas no hay ninguna manera práctica de asegurar que se ha localizado un óptimo global.



A function that asymptotically approaches zero at plus and minus ∞ and has two maximum and two minimum points in the vicinity of the origin. The two points to the right are local optima, whereas the two to the left are global.

3. Funciones cóncavas y convexas

Las funciones *cóncavas* y *convexas* son casos especiales de funciones unimodales. Una función cóncava o convexa es necesariamente unimodal, pero una función unimodal no necesariamente es cóncava o convexa. En la siguiente figura se presentan casos de funciones unimodales cóncavas y convexas (a, b). Los casos c y d de la figura ilustran casos de funciones unimodales que no son ni cóncavas ni convexas.

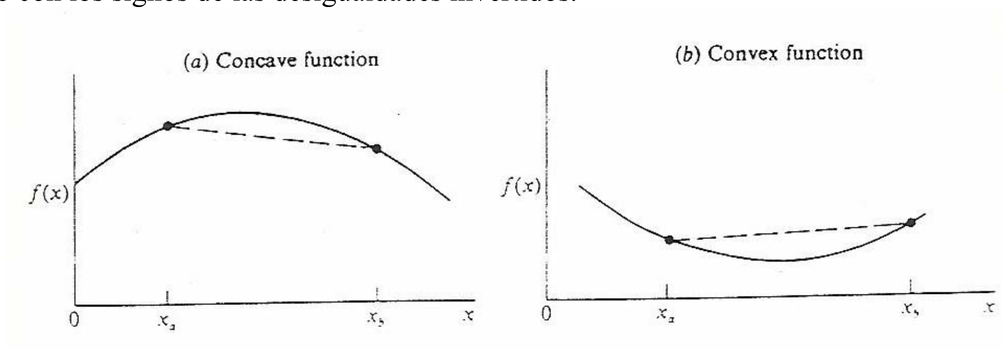


Examples of unimodal functions $y(x)$.

Una función es llamada cóncava sobre una región R si sigue la siguiente relación, para dos valores diferentes de x, x_a y x_b, pertenecientes a dicha región:

$$f\left[\theta\, x_a + (1-\theta)x_b\right] \geq \theta\, f(x_a) + (1-\theta)\, f(x_b)$$

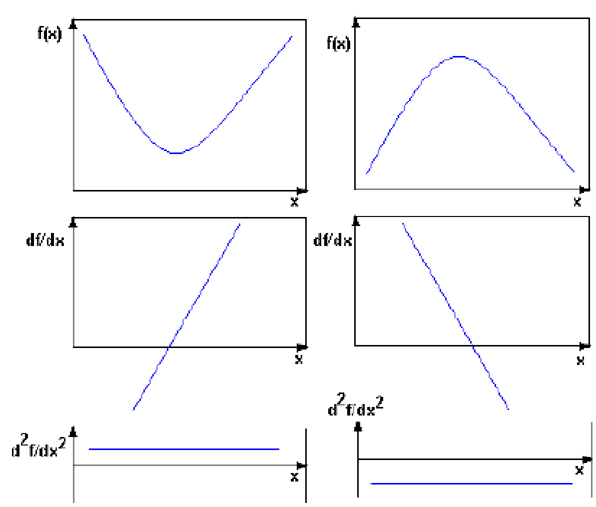
donde θ es un escalar entre 0 y 1, la función es estrictamente cóncava si el signo mayor o igual es reemplazado por un signo mayor. Una función convexa tiene la misma definición, pero con los signos de las desigualdades invertidos.



Propiedades de las funciones convexas:

- Una cuerda cae enteramente sobre o arriba de la curva.
- Una aproximación lineal de y(x) en un punto cualquiera es siempre un sub-estimador del valor de la función.
- Para una función convexa un mínimo local es siempre un mínimo global
- La derivada 1º de y(x) no cambia de signo o cambia una sola vez en la región.
- La derivada 2º de y(x) es siempre no negativa.

Si examinamos una función simple de una variable, si el signo de la segunda derivada en el intervalo [a,b] es siempre negativo o cero, entonces la función es cóncava, si el signo es positivo o cero la función será convexa. Si el signo de la derivada segunda es negativo o positivo las funciones serán estrictamente cóncavas o estrictamente convexas, respectivamente.



El concepto de concavidad y convexidad es también aplicable a funciones multivariables, debiendo evaluar en estos casos la matriz Hessiana H(x) para determinar la naturaleza de la función.

Tipos de matrices:

- H es *definida positiva* si y solo si x^T H x es >0 para todos los x ≠ 0, si el signo de la desigualdad es ≥ 0 la matriz es *semidefinida positiva.*
- H es *definida negativa* si y solo si x^T H x es <0 para todos los x ≠ 0, si el signo de la desigualdad es ≤0 la matriz es *semidefinida negativa.*
- H es *indefinida* si x^T H x es <0 para algunos x y >0 para otros valores de x.

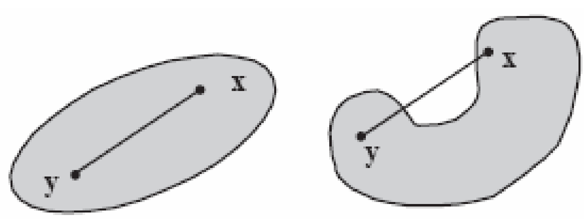
Si la matriz Hessiana de una función multivariable es negativa semidefinida la función será cóncava, pero si la matriz es negativa definida la función será estrictamente cóncava. Para que la función sea estrictamente convexa, la matriz Hessiana debe ser definida positiva, y positiva semidefinida para que sea solo convexa.

Relationship between the character of $f(\mathbf{x})$ and the state of H(x)

$f(\mathbf{x})$ is	H(x) is	All the eigen-values of H(x) are	Determinants of the leading principal minors of H* (Δ_i)
Strictly convex	Positive definite	>0	$\Delta_1 > 0, \Delta_2 > 0, \ldots$
Convex	Positive semi-definite	≥0	$\Delta_1 \geq 0, \Delta_2 \geq 0, \ldots$
Concave	Negative semi-definite	≤0	$\Delta_1 \leq 0, \Delta_2 \geq 0, \Delta_3 \leq 0, \ldots$ (alternating sign)
Strictly concave	Negative definite	<0	$\Delta_1 < 0, \Delta_2 > 0, \Delta_3 < 0$ (alternating sign)

4. Región Convexa

Las regiones convexas juegan un papel importante en optimización con restricciones, debido a que esta propiedad garantiza la no existencia de mínimos locales que no sean globales. Una región convexa existe si por dos puntos cualesquiera de la región, x_a y x_b, todos los puntos $x=\mu\, x_a+(1-\mu)\, x_b$, donde $0\leq\mu\leq1$, que forman una línea que unen x_a con x_b pertenecen a la región. La figura muestra una región convexa y otra que no lo es.

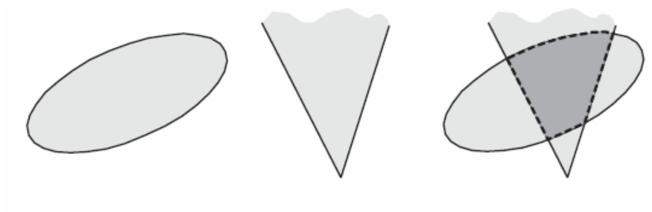


(a) (b)

Conjunto convexo (a) y no convexo (b) en $\mathbb{R}^2$

Las propiedades siguientes son consecuencia directa de la definición de convexidad:

- Si $\{S_i\}_{i\in I}$ es una familia de regiones convexas, entonces, la región $\cap_{i\in I}S_i \equiv \{x \mid x \in S_i \text{ para todo } i \in I\}$ es también convexa.



Conjuntos convexos (a) como intersección de (b) conjuntos convexos.

- Si S_1 y S_2 son regiones convexas, la región $S_1 + S_2 \equiv \{y = x_1 + x_2 \mid x_1 \in S_1 \text{ y } x_2 \in S_2\}$ también lo es.

Estas propiedades pueden emplearse para definir nuevas regiones convexas mediante el empleo de subespacios. Se puede considerar la intersección, finita o infinita, de subespacios, y la región resultante es convexa.
En el caso de regiones definidas por restricciones, si las restricciones son todas mayores o iguales a cero y cóncavas, la región formada será convexa. Si las restricciones son menores o iguales a cero y convexas, la región formada también será convexa.

La intersección de regiones convexas es una región convexa, la unión de regiones convexas no es necesariamente una región convexa.

En problemas de optimización que involucran restricciones, aquellos puntos que satisfacen todas las restricciones se denominan *puntos factibles*, todos los otros puntos serán *no factibles*.

5. Condiciones necesarias y suficientes para un extremo de funciones no restringidas.

En optimización no restringida el objetivo es encontrar un máximo o un mínimo de la función objetivo. Un punto óptimo x* es completamente definido si satisface las condiciones necesarias y suficientes de optimalidad.
La manera más simple de establecer las condiciones necesarias y suficientes para un máximo o un mínimo es comenzar con una expansión en series de Taylor alrededor del extremo x*

$$y(x) = y(x^*) + \nabla^T y(x^*)\Delta x + \frac{1}{2}(\nabla^T x)\nabla^2 y(x^*)\Delta x + O_3(\Delta x) + \ldots$$

Donde $\Delta x = x - x^*$.

Por definición x* será un mínimo local si no hay otro punto en la región que posea un valor de función y(x) menor, es decir $y(x)-y(x^*)\geq 0$. Para el caso de un máximo local la relación será $y(x)-y(x^*)\leq 0$.
Examinando el segundo termino de la serie de Taylor, y teniendo en cuenta que Δx es arbitrario, podemos determinar que $\nabla y(x^*)$ debe ser igual a cero para no contradecir las

definiciones de máximos y mínimos locales. Entonces la *condición necesaria* para mínimos o máximos locales es:

$$\nabla y\left(x^{*}\right)=0$$

x* es un punto estacionario.

El segundo término de la expansión en series de Taylor es forzado a ser cero, examinamos ahora el tercer término $\frac{1}{2}\left(\nabla^{T}x\right)\nabla^{2}y\left(x^{*}\right)\Delta x$, este término establece el carácter del punto estacionario. La satisfacción de la condición necesaria no asegura la presencia de un máximo o mínimo local, se necesita establecer la condición suficiente.

$\nabla^2 f(x^*)$	$\Delta x^T \nabla^2 f(x^*)\,\Delta x$	Near x^*, $f(x) - f(x^*)$
Positive definite	>0	Increases
Positive semidefinite	≥ 0	Possibly increases
Negative definite	<0	Decreases
Negative semidefinite	≤ 0	Possibly decreases
Indefinite	Both ≤ 0 and ≥ 0 depending on Δx	Increases, decreases, neither

Consecuentemente x* puede ser clasificado como:

$\nabla^2 f(x^*)$	x^*
Positive definite	Unique ("isolated") minimum
Negative definite	Unique ("isolated") maximum

Esas dos condiciones son las que se conocen como *condiciones suficientes*.

En síntesis, las condiciones que deben cumplirse son:

<u>Condiciones necesarias</u>

- ♣ y(x) dos veces diferenciable en x*
- ♣ ∇y(x*)=0, es decir que x* es un punto estacionario

<u>Condición suficiente</u>

- ♣ H(x*) es positiva definida, x* es un mínimo
- ♣ H(x*) es negativa definida, x* es un máximo

Ejemplos:

1. Determinar si la siguiente función es convexa, obtener los puntos estaciónarios y calsificarlos.

$$f(x) = x_1^2 + 2x_1 + 3x_2^2 + 6x_2 + 4$$

Solución:

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_1} = 2x_1 + 2 \qquad \frac{\partial f(x)}{\partial x_2} = 6x_2 + 6$$

$$\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1^2} = 2 \qquad \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2^1} = 6 \qquad \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_2} = 0 \qquad \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2 \partial x_1} = 0$$

Entonces la matriz Hessiana es:

$$H(x) = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 6 \end{bmatrix}$$

Ahora debemos determinar los autovalores del H(x)

$$H - \alpha I = \begin{bmatrix} 2-\alpha & 0 \\ 0 & 6-\alpha \end{bmatrix}$$

$$\det\begin{bmatrix} 2-\alpha & 0 \\ 0 & 6-\alpha \end{bmatrix} = (2-\alpha)(6-\alpha) = 0 \qquad \alpha_1 = 2$$

$$\alpha_2 = 6$$

Como ambos autovalores son positivos la función es estrictamente convexa para todos los valores de x_1 y x_2.

Obtención de los puntos estacionarios:

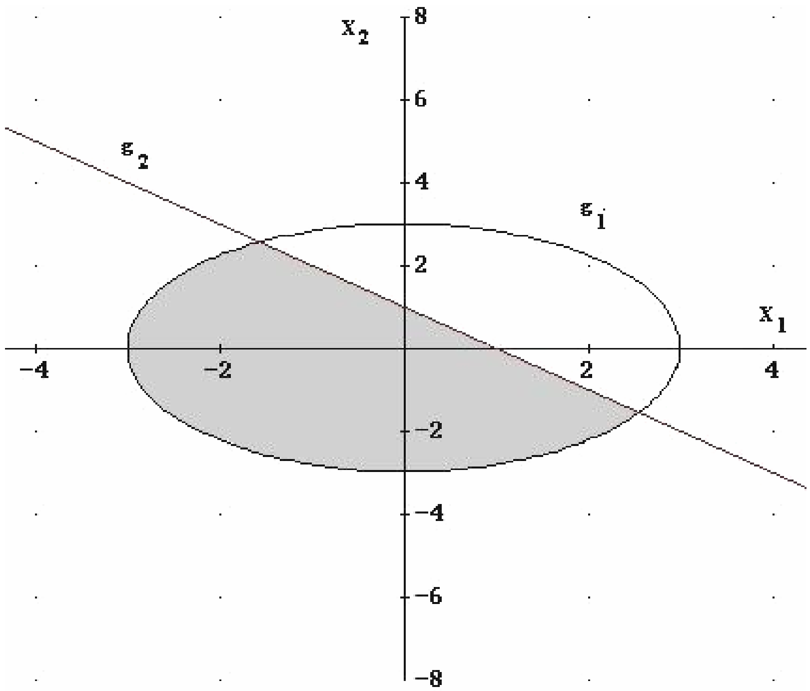
$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_1} = 2x_1 + 2 = 0 \qquad \frac{\partial f(x)}{\partial x_2} = 6x_2 + 6 = 0$$

El punto obtenido es x*= (-1, -6), el Hessiano de la función es siempre definido positivo, la función es estrictamente convexa y el punto estacionario obtenido es un mínimo.

2. Determinar la convexidad de la región formada por las siguientes restricciones

$$g_1(x) = -(x_1^2 + x_2^2) + 9 \geq 0$$
$$g_2(x) = -x_1 - x_2 + 1 \geq 0$$

Solución:



En la figura se observa que la región que forman ambas restricciones es cerrada. Para determinar si esta región es convexa debemos analizar la concavidad de las funciones.

$$H\ g_1(x) = \begin{bmatrix} -2 & 0 \\ 0 & -2 \end{bmatrix}$$

$$H\ g_2(x) = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Los autovalores obtenidos son cero o negativos, por lo tanto ambas funciones son cóncavas y la región cerrada que forman es una región convexa.

Bibliografía

- Biles William, Swain James (1980). “Optmization and Industrial Experimentation”, Ed. John Wiley and Sons Inc.
- Castillo E., Conejo A., Pedregal P., García R., Alguacil N. (2002), “Formulación y Resolución de Modelos de Programación Matemática en Ingeniería y Ciencia” .
- Chapra Steven, Canale Raymond (2006). “Numerical methods for engineers”, 5^{th} edition. Ed. McGraw-Hill.
- Edgar T., Himmelblau. (1988) “Optimization of chemical processes” Ed. McGraw-Hill.
- Fletcher R. (1980) “Practical methods of optimization. Volume 1: Unconstrained optimization” Ed. John Wiley and Sons Inc.
- Reklaitis G., Ravindran A., Ragsdell K. (1983), “Engineering Optimization. Methods and Applications”, Ed. John Wiley and Sons Inc.