Optimización Multivariable irrestricta

Find $\mathbf{x}^* = [x_1 \quad x_2 \quad \cdots \quad x_n]^T$ that minimizes $f(x_1, x_2, \ldots, x_n) \equiv f(\mathbf{x})$

Most iterative procedures that are effective alternate between two phases in the optimization:

(*a*) choosing a search direction $\mathbf{s}^k$

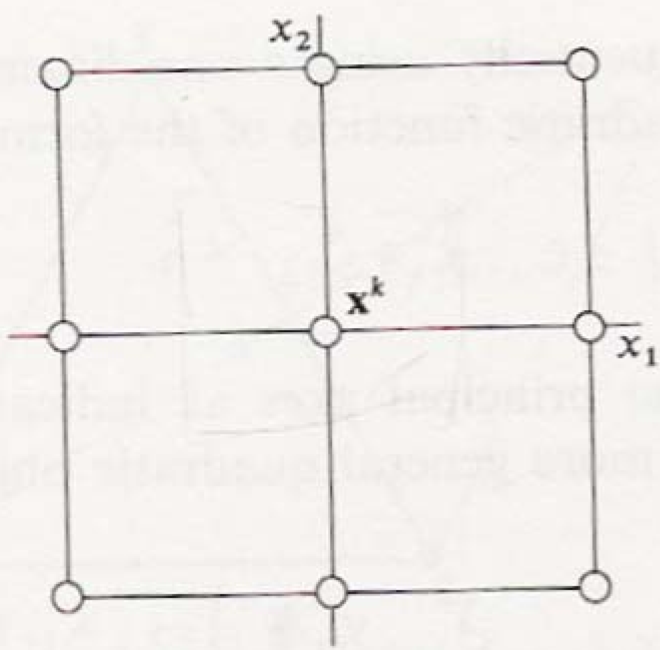
(*b*) minimizing in that direction to some extent (or completely) to find a new point $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \Delta\mathbf{x}^k$ where $\Delta\mathbf{x}^k \equiv \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k$ is known as the step size. For maximization, we minimize $-f(\mathbf{x})$.

In addition to (*a*) and (*b*), an algorithm must specify

(*c*) the initial starting vector $\mathbf{x}^0 = [x_1^0 \quad x_2^0 \quad \cdots \quad x_n^0]^T$ and

(*d*) the convergence criteria for termination

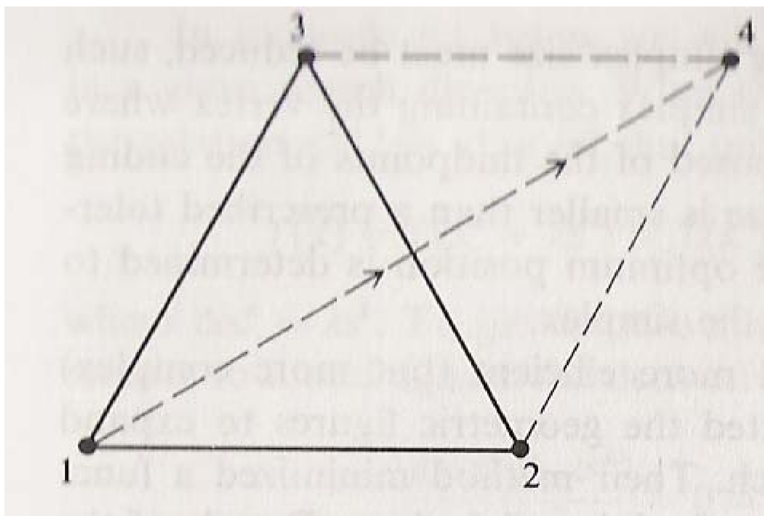
Métodos Directos



(*a*) Three-level factorial design ($3^2 - 1 = 8$ points plus center)

Método Simplex

El método Simplex Secuencial utiliza una figura geométrica regular para seleccionar puntos en los vértices de una figura en los que se debe evaluar la función. En dos dimensiones la figura es un triangulo equilatero, en tres dimensiones es un tetrahedro regular. La nueva dirección de búsqueda se toma desde el vértice con el peor valor de función, entonces las direcciones de búsqueda cambian, pero el tamaño del paso es fijo para un determinado simplex (factor de escala).



En cada iteracióon, para minimizar f(x), se evalua la función en cada uno de los tres vértices del triángulo. La nueva dirección de búsqueda se orienta desde el punto con el peor valor de función a través del centroide del simplex. Se selecciona el nuevo punto en esta dirección reflejada, preservando la forma geometrica. La función objetivo se evalúa en este nuevo punto y se calcula una nueva dirección de búsqueda. El método procede rechazando un vertice por vez hasta que el simplex encierre el óptimo

Regla 1: Si el peor vértice fue generado en las iteraciones previas, entonces se elige para reflejar el siguiente vértice con el siguiente valor de funcion mas alto.

Regla 2: Si un vértice permanece sin cambiar por mas de M iteraciones, reducir el tamaño del simplex por algún factor.

$M=1.65*N+0.05*N^2$

Donde N es la dimension del problema y M se debe redondear al entero mas próximo.

Regla 3: Criterio de terminación: La búsqueda finaliza cuando el simplex es muy pequeño ó cuando el desvío estándar de valores de función en los vértices de pequeño. Se debe entonces especificar el parámetro de terminación.

La implementación del algoritmo requiere solo dos tipos de cálculos:

(1) Generación de un simplex regular dado un punto base y un factor de escala apropiado y (2) cálculo del punto reflejado

$$x_j^{(i)} = \begin{cases} x_j^{(0)} + \delta_1 & \text{if } j = i \\ x_j^{(0)} + \delta_2 & \text{if } j \neq i \end{cases} \quad \text{for } i \text{ and } j = 1, 2, 3, \ldots, N.$$

$$\delta_1 = \left[\frac{(N+1)^{1/2} + N - 1}{N\sqrt{2}} \right] \alpha$$

$$\delta_2 = \left[\frac{(N+1)^{1/2} - 1}{N\sqrt{2}} \right] \alpha$$

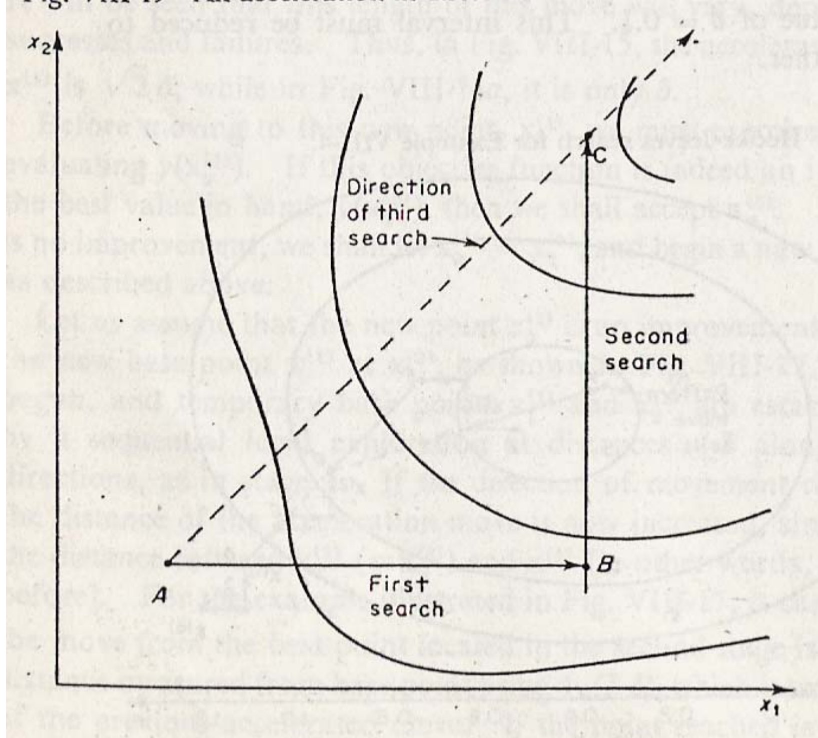
$$x_{\text{new}}^{(j)} = 2x_c - x_{\text{old}}^{(j)}$$

Algoritmo de Powell

El algoritmo de Powell ubica el mínimo de una función f por búsquedas unidimensionales secuenciales desde un punto inicial x^0 a lo largo de un conjunto de direcciones conjugadas generadas por el algoritmo

Un posible método de búsqueda podría comenzar con dos direcciones no necesariamente conjugadas $\xi_1^{(0)}$y $\xi_2^{(0)}$.

Fig. VIII-19 An acceleration in direction.



En la primer etapa estas podrían ser las direcciones de los ejes coordenados. Entonces llevamos a cabo nuestra búsqueda unidimensional partiendo desde un punto base elegido arbitrariamente $x_0^{(0)}$ y encontrando un punto mejorado $x_2^{(0)}$.Luego definimos una dirección de búsqueda favorable $\mu^{(0)}=x_2^{(0)}- x_0^{(0)}$. Donde $\mu^{(0)}$ es la dirección desde el punto base al punto final de la búsqueda en una dimensión

Aquí no tenemos la seguridad de que μ sea una direccióon que pase a través del óptimo incluso si la función fuese cuadrática.. Hagamos ahora otra búsqueda a lo largo de $\mu^{(0)}$alcanzando un punto mejorado $x_0^{(1)}$, el punto base para la segunda etapa de la búsqueda. Usemos ahora las direcciones $\xi_1^{(1)}= \xi_2^{(0)}$ y $\xi_2^{(1)}= \mu^{(0)}$ en nuestra segunda etapa.

Si $X_2^{(1)}$es el óptimo encontrado lluego de pasar por estas dos nuevas direcciones, entonces la direccióon $\mu^{(1)}=x_2^{(1)}-x_0^{(1)}$ pasará a través del óptimo de una función cuadrática.

Por supuesto, si la función no es cuadrática, entonces $\mu^{(1)}$ no necesariamente pasará por el óptimo, pero probablemente sea una dirección de búsqueda favorable. Deben repetirse entonces las iteraciones.

El método de Powell tiene ventajas respecto de lo presentado anteriormente. Puede ser resumido como sigue para una búsqueda unidimensional.

Etapa 1:

Comenzando con el mejor valor previo $x_0^{(k)}$ y una serie de direcciones de búsqueda linealmente independientes, $\xi_1^{(k)}$, $\xi_2^{(k)}$,......$\xi_n^{(k)}$, comenzar la búsqueda buscando la posición del óptimo a lo largo de la línea que pasa a través de $x_0^{(k)}$ la que es paralela a $\xi_1^{(k)}$. Sea este punto óptimo $x_1^{(k)}$, comenzamos una segunda búsqueda desde este nuevo punto en la dirección $\xi_2^{(k)}$. Continúe el procedimiento hasta que las n direcciones de búsqueda hayan sido exploradas

Etapa 2:

Ahora buscamos el punto particular $x_m^{(k)}$ correspondiente al mejor valor de la función objetivo respecto de sus valores previos. Entonces el punto $x_m^{(k)}$produce el mayor cambio Δ en cualquiera de los n movimientos, donde $\Delta=|y(x_m^{(k)})-y(x_{m-1}^{(k)})|$, también determinamos el vector $\mu=x_n^{(k)}-x_0^{(k)}$.

Etapa 3:

Determine $y(2x_n^{(k)}-x_0^{(k)})=y_t^{(k)}$

Etapa 4:

Si en la búsqueda de un mínimo

$$y_t^{(k)} \geq y_0^{(k)}$$

y/ó

$$\left(y_0^{(k)} - 2y_n^{(k)} + y_t^{(k)}\right)\left(y_0^{(k)} - y_n^{(k)} - \Delta\right)^2 \geq \frac{\Delta\left(y_0^{(k)} - y_t^{(k)}\right)^2}{2}$$

Entonces μ no es una buena dirección para introducir en nuestra búsqueda y continuamos con la búsqueda comenzando desde el último punto y usando las mismas direccioones , esto es $x_0^{(k+1)}=x_n^{(k)}$ y $\xi_i^{(k+1)}=\xi_i^{(k)}$ para i=1,...,n. Se repite entonces la etapa 1 hasta que se encuentre el mínimo.

Si ninguna de estas inecuaciones se verifica, buscamos a lo largo de la dirección μ hasta que se encuentre un mínimo. Este punto se define como $x_0^{(k+1)}$ y las nuevas direcciones de búsqueda para la etapa (k+1) son:

$\xi_i^{(k+1)}=\xi_i^{(k)}$, i=1,2,...,m-1; $\xi_i^{(k+1)}=\xi_{i+1}^{(k)}$, i=m,...,n-1; y $\xi_n^{(k+1)}=\mu$

Hay dos cuestiones que indaga el algoritmo antes de determinar una nueva dirección de búsqueda. La primera considera el valor de una función objetivo tentativa y_t encontrada explorando a lo largo de la nueva direccion de búsqueda. Powell estudia la función objetivo en el punto $2x_n - x_0$ el cual es un punto a lo largo de la dirección μ ubicado a la misma distancia de x_n como el punto original x_0. Si este sondeo tentativo no produce una mejoría en la función objetivo respecto del punto basse original, la nueva dirección se rechaza.

La segunda desigualdad se usa para determinar si la función puede tener picos (en la búsqueda de un mínimo) en el movimiento desde el punto x_n al punto tentativo $2x_n - x_0$, en este caso se rechaza como dirección favorable.