Auxiliar N°2 21 de Marzo de 2007

Problema 1

Responda las siguientes preguntas sobre métodos de descenso:

1. Describa una iteración del Método del Gradiente y dé una justificación gráfica y/o conceptual de su funcionamiento.
2. Describa una iteración del Método de Newton y dé una justificación gráfica y/o conceptual de su funcionamiento.

Problema 2

Considere el siguiente problema de optimización:

$$\text{Min } f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$$

Resolver utilizando el método del Gradiente y, luego, el de Newton. Tome como punto de partida el (2,1).

Problema 3

Considere el siguiente problema de optimización:

$$\text{Min } f(x) = x^4 - 24x^2$$

Resolver utilizando el método de Newton. Tome como punto de partida el $x=1$. ¿Qué puede observarse?

Problema 4

Considere el siguiente problema de optimización:

$$\text{Min } f(x_1, x_2) = x_1^2 + \frac{1}{2}x_2^2$$

Resolver utilizando el Método de Newton y del Gradiente. Tome como punto de partida el (2,4). ¿Qué puede observarse de ambos métodos?

Problema 5

Nombre las principales ventajas y desventajas de ambos métodos.

Auxiliar N°2 21 de Marzo de 2007

Problema 1

1. Iteración k del Método del Gradiente:

- Calcular el gradiente de la función objetivo y verificar si $\nabla f(x^k) = 0$.
- Si no, obtener el siguiente punto como se indica a continuación:

$$x^{k+1} = x^k - \lambda_k \nabla f(x^k)$$

- Donde λ_k es la solución óptima del problema:

$$\min_{\lambda} h_k(\lambda) = f(x^k + \lambda d^k)$$

$$\text{s.a. } \lambda \geq 0$$

- Si es, la entonces se acaba iteración y el punto x^k es el óptimo.

Este método se basa en el hecho que la dirección de máximo ascenso de una función esta dado por su gradiente y por tanto la de mayor descenso viene dada por menos (-) el gradiente. Observar que nos acercamos zig-zageando al óptimo pues los gradientes de iteraciones sucesivas son ortogonales.

2. Iteración k del Método de Newton:

- Calcular el gradiente de la función objetivo y verificar si $\nabla f(x^k) = 0$.
- Si no, calcular el inverso del hessiano de la función objetivo para obtener el siguiente punto como se indica a continuación:

$$x^{k+1} = x^k - [H f(x^k)]^{-1} \nabla f(x^k)$$

- Si es, entonces se acaba la iteración y el punto x^k es el óptimo.

El Método de Newton se basa en aproximar la función f por una función cuadrática (en cada punto x^k se aproxima por la expansión de Taylor de orden 2) y esta aproximación se minimiza exactamente, generando un nuevo punto x^{k+1} .

Se detiene la aproximación cuando se llega a un punto estacionario de la función aproximada lo que es condición necesaria y suficiente.

Problema 2

Debemos resolver $\text{mín } f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$ con $\vec{x}_0 = (2, 1)$

- Método del gradiente: $\vec{x}_{k+1} = \vec{x}_k - \lambda_k \nabla f(\vec{x}_k)$

Claramente, antes de comenzar a iterar se requiere calcular $\nabla f(\vec{x})$:

$$\nabla f(\vec{x}) = \begin{pmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 \end{pmatrix}$$

Ahora, comenzamos a iterar:

- Iteración 1:

- Vemos si estamos en el óptimo: $\nabla f(2, 1) = (4, 2) \neq \vec{0} \Rightarrow$ Seguimos.
- Calculamos nuevo punto $\vec{x}_1$:

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} - \lambda_0 \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix}$$

Para calcular λ_0 minimizamos $h(\lambda)$:

$$\begin{aligned} h(\lambda) &= f(\vec{x}_0 - \lambda \nabla f(\vec{x}_0)) \\ &= f\left\{ \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} - \lambda \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix} \right\} \\ &= (2 - 4\lambda)^2 + (1 - 2\lambda)^2 \end{aligned}$$

$$\frac{dh(\lambda)}{d\lambda} = 0 \Rightarrow \lambda_0 = \frac{1}{2}$$

(Si quieren pueden verificar que el punto crítico es óptimo comprobando que $d^2h/d\lambda^2 > 0$)

Entonces:

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \vec{x}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

• Iteración 2:

◦ Vemos si estamos en el óptimo: $\nabla f(0,0) = (0,0) = \vec{0} \Rightarrow$ Fin.

$\therefore \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ es el mínimo de $x_1^2 + x_2^2$

■ Método de Newton: $\vec{x}_{k+1} = \vec{x}_k - \{H_f(\vec{x}_k)\}^{-1} \nabla f(\vec{x}_k)$

Claramente, antes de comenzar a iterar se requiere calcular $\nabla f(\vec{x})$ y $\{H_f(\vec{x})\}^{-1}$:

$$\nabla f(\vec{x}) = \begin{pmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 \end{pmatrix}$$

$$H_f(\vec{x}) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \Rightarrow \{H_f(\vec{x})\}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

Ahora, comenzamos a iterar:

• Iteración 1:

◦ Vemos si estamos en el óptimo: $\nabla f(2,1) = (4,2) \neq \vec{0} \Rightarrow$ Seguimos.

◦ Calculamos nuevo punto $\vec{x}_1$:

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \vec{x}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

• Iteración 2:

◦ Vemos si estamos en el óptimo: $\nabla f(0,0) = (0,0) = \vec{0} \Rightarrow$ Fin.

◦ Calculamos nuevo punto $\vec{x}_1$:

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \vec{x}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$\therefore$ También se concluye que $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ es el mínimo de $x_1^2 + x_2^2$

Problema 3

Calculamos el gradiente y el hessiano:

$$\nabla f(x) = 4x^3 - 48x$$

$$Hf(x) = 12x^2 - 48 \Rightarrow Hf^{-1}(x) = \frac{1}{(12x^2 - 48)}$$

- Iteración 0:
 - Vemos si estamos en el óptimo: $\nabla f(x=1) = 4 - 48 = -44 \neq 0$, entonces seguimos.
 - Calculamos el segundo punto: $x^1 = 1 - \frac{1}{36}(-44) = -\frac{2}{9}$.
- Iteración 1:
 - Vemos si estamos en el óptimo: $\nabla f(x = -\frac{2}{9}) = \frac{7744}{729} \neq 0$, entonces seguimos.
 - El segundo punto: $x^2 = -\frac{2}{9} - \left(\frac{1}{12\left(\frac{2}{9}\right)^2 - 48} \right) \left(\frac{7744}{729} \right) = \frac{1}{540}$.
- Iteración 2:
 - Vemos si estamos en el óptimo: $\nabla f(x = \frac{1}{540}) = \frac{-4}{45} \neq 0$, entonces seguimos.
 - El segundo punto: $x^3 = \frac{1}{540} - \left(\frac{1}{12\left(\frac{1}{540}\right)^2 - 48} \right) \left(\frac{-4}{45} \right) = 0$.
- Iteración 3:
 - Vemos si estamos en el óptimo: $\nabla f(x=0) = 0$, por lo tanto se acaba la iteración.
 - El hessiano esta dado por: $Hf(x) = 12(0)^2 - 48 = -48$

Iteración	Puntro (x)	Gradiente (f'(x))	Hessiano (f''(x))	Funcion objetivo
0	1	-44	-36	-23
1	- 2/9	7744/729	-1280/27	-1042/881
2	1/540	- 4/45	-48	0
3	0	0	-48	0

Como se puede observar el método hace crecer a la función objetivo, convergiendo a un máximo, esto es porque el punto x_0 no fue bien elegido dado que el hessiano de f es definido negativa en el intervalo $(-2,2)$.

Problema 4

Método de Newton:

Iteración 1:

Primero calculamos el gradiente: $\nabla f \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$

Luego el Hessiano: $Hf \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow Hf^{-1} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

El punto de partida es: $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 4 \end{pmatrix}$

Evaluamos el gradiente en el punto: $\nabla f \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 4 \end{pmatrix} \neq \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, lo que implica que no

estamos en el óptimo.

Calculamos un segundo punto a partir del método:

$$x^1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 4 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 4 \\ 4 \end{pmatrix}$$

El siguiente punto es:

$$x^1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Iteración 2:

Evaluamos el gradiente en el punto: $\nabla f(x^1) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \text{FIN.}$

El óptimo es: $x^1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$

Método del Gradiente:

Iteración 1:

Primero calculamos el gradiente: $\nabla f \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$

El punto de partida es: $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 4 \end{pmatrix}$

Evaluamos el gradiente en el punto: $\nabla f \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 4 \end{pmatrix} \neq \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, lo que implica que no

estamos en el óptimo.

Calculamos un segundo punto a partir del método:

$$x^1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 4 \end{pmatrix} - \lambda_0 \nabla f \begin{pmatrix} 2 \\ 4 \end{pmatrix}$$

$$\text{con } \lambda_k \rightarrow \min_{\lambda} f(x^k - \lambda_k \nabla f(x^k))$$

$$f(x^0 - \lambda_0 \nabla f(x^0)) = f \begin{pmatrix} 2 - \lambda_0 4 \\ 4 - \lambda_0 4 \end{pmatrix} = (2 - \lambda_0 4)^2 + (4 - \lambda_0 4)^2$$

$$\lambda_0 \rightarrow \min (2 - \lambda_0 4)^2 + \frac{1}{2} (4 - \lambda_0 4)^2$$

$$\frac{\partial ((2 - \lambda_0 4)^2 + \frac{1}{2} (4 - \lambda_0 4)^2)}{\partial \lambda_0} = 0 \Rightarrow \lambda_0 = \frac{2}{3}$$

El siguiente punto es:

$$x^1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 4 \end{pmatrix} - \frac{2}{3} \begin{pmatrix} 4 \\ 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{2}{3} \\ \frac{4}{3} \end{pmatrix}$$

Iteración 2:

etc....

Vemos que la convergencia del método de Newton en este caso es mejor que la del método del Gradiente. Esto es, con el método de Newton se converge más rápido al punto. Esto se debe a que las superficies de nivel son excéntricas lo que se traduce en un mayor número de iteraciones en el método del gradiente. Los gráficos siguientes fueron generados con Matlab e ilustran la forma de elipsoide de las curvas de nivel de esta función.

```
[x,y]=meshgrid(-10:.5:10);  
z=x.^2+(1/2)*y.^2;  
plot3(x,y,z)  
mesh(x,y,z)  
surf(x,y,z)
```

```
[x,y]=meshgrid(-10:.5:10);
z=x.^2+(1/2)*y.^2;
contour3(x,y,z,10)
```

```
[x,y]=meshgrid(-10:.5:10);
z=x.^2+(1/2)*y.^2;
contour(y,x,z,10)
```

Problema 5

En general el método de Newton converge más rápido que el del gradiente, este último es muy bueno cuando las superficies de nivel son hiperesferas (circunferencias en dos o más dimensiones), en tal caso el gradiente encuentra el mínimo en una iteración, pero si las superficies de nivel son excéntricas la convergencia puede ser muy lenta.

Otra característica del método del gradiente es que siempre irá orientándose hacia el punto buscado, lo que no necesariamente ocurre con el método de Newton. Otro problema de este es que hay que calcular el Hessiano e invertirlo, lo que puede ser complicado.

Una buena técnica sería partir con el método del gradiente, y seguir con el de Newton.

Dudas y/o comentarios a:
Leonardo López
llopez@ing.uchile.cl