

Minimització de funcions

Felip Alàez Nadal

23 de juny de 2005

Índex

1	Minimització de funcions d'una variable	3
1.1	Mètode auri	3
1.2	Interpolació parabòlica inversa: Mètode de Brent	4
1.3	Recerca unidimensional amb derivades primeres	5
2	Minimització de funcions de vàries variables	5
2.1	Mètodes de direccions conjugades	6
2.1.1	Mètode de Powell	6
2.1.2	Mètode del gradient conjugat	7
2.2	Mètode del símplex	8

1 Minimització de funcions d'una variable

Com ja he dit abans, en el cas de funcions d'una variable el és possible fitar els mínims d'una funció. Considerarem fitat un mínim si donat un triplet de punts a, b, c es compleixen les següents condicions:

$$a < b < c$$

$$f(a) > f(b) \quad f(c) > f(b)$$

Per tant, el primer que s'ha de fer en buscar un mínim d'una funció és acotar-lo. Existeixen diversos algorismes per tal de fer-ho, en els quals no em detindré aquí. En molts problemes físics és possible acotar d'avantmà l'interval en què es pot trobar el mínim. Amés, una inspecció gràfica amb un programa com Gnuplot, permet, generalment, acotar-los. Per tant directament descriuré els algorismes per esbrinar els mínims i suposaré que ja estan acotats.

1.1 Mètode auri

Aquest mètode consisteix a intentar reduir el triplet original (a, b, c) en un altre menor. Es procedeix de forma similar a una bisecció: es prova un punt x en l'interval a, b o b, c , el de major amplitut, i es calcula la imatge de la funció en eixe punt. Si $f(x)$ és menor que els dos la imatge de la funció als dos extrems, el mínim es troba al subinterval considerat. Si no, es redueix l'interval original substituïnt l'extrem del subinterval per x . La diferència amb el mètode de bisecció és que aquest redueix l'interval original en un factor dos rere cada bisecció, mentre que aquest algorisme després d'un pas pot haver guanyat un factor 2, més o menys, depenent del valor de $f(x)$. És possible demostrar que el valor òptim per a la reducció de l'interval ve donat per :

$$\frac{|x - a|}{|x - b|} = \frac{\sqrt{5} - 1}{2} \simeq 0.6180$$

Aquest nombre s'anomena nombre auri i dona nom a aquest mètode. Té molta importància en la matemàtica, l'art i la biologia. De la relació anterior es dedueix que el nou x es triarà com :

$$x = a + 0.6180 * |b - a| \quad \text{ó} \quad x = c - 0.6180 * |c - b|$$

Es triarà una de les dues fòrmules segons es treballa a l'interval a, b o b, c . Finalment, s'ha de triar una condició per a finalitzar les iteracions. Una possible tria és que la variació de la funció siga molt menor que la variació

d'aquesta. També és possible triar que l'interval en què s'estiga treballant siga molt menor que l'interval inicial. Tot açò es pot resumir amb :

$$\frac{\min(f(a) - f(b), f(c) - f(b))}{|f(a) + f(c)|} < \epsilon$$

$$\frac{|c - a|}{D} < \sqrt{\epsilon} \quad (1)$$

A l'equació 1 , D és una distància que caracteritza l'interval de variació de la funció. A la majoria de problemes físics, és possible conèixer-la. Si s'ha acotat el mínim D serà, per exemple, l'amplària de l'interval inicial. Note's que a la condició 1 apareix $\sqrt{\epsilon}$ enlloc de ϵ . Açò ve donat pel fet què als mínims no es pot ser tan exigent amb la precissió.

1.2 Interpolació parabòlica inversa: Mètode de Brent

En el cas de funcions que es comporten de forma aproximadament parabòlica prop del mínim, resulta immediat adonar-se de què és possible obtindre una bona aproximació al mínim interpolant una paràbola i minimitzant-la. Aquest mètode es comporta bé amb la majoria de funcions, excepte per a unes quantes funcions *patològiques* per a les quals s'ha de recórrer al mètode auri.

Donada una interpolació parabòlica a una funció realitzada mitjançant tres nodes (a,b,c) s'obté l'abscissa on es troba el mínim aplicant la condició d'extrem ($\frac{\partial F}{\partial x} = 0$). El resultat és:

$$x = b - 1/2 \left(\frac{(b-a)^2[f(b) - f(c)] - (b-c)^2[f(b) - f(a)]}{(b-a)[f(b) - f(c)] - (b-c)[f(b) - f(a)]} \right)$$

Donat que es busca una abscissa enlloc d'una ordenada, el mètode s'anomena interpolació parabòlica inversa. Aquest mètode falla en el cas què a,b i c es siguen col·lineals, cas en el qual el denominador es fa zero.

En la pràctica és desitjable idear un mètode per tal què per a funcions problemàtiques siga lent però segur, i quan siga convenient faça realitze interpolacions parabòliques inverses per tal d'augmentar la velocitat de convergència. Típicament aquests mètodes han d'usar un mètode com l'auri quan la funció està mal comportada, i canviar a interpolació parabòlica inversa quan no.

Un d'aquests mètodes és el de Brent. Aquest mètode fa ús de 6 punts: a,b,u,v,w i x. El significat d'aquests punts és el següent:

- El mínim està acotat en l'interval (a,b).
- x és el punt on s'ha trobat el mínim valor de la funció.

- w és el punt on s'ha trobat el segon menor valor.
- v és el valor previ de w .
- u és el punt on la funció va ser evaluada més recentment.

El mètode actua de la següent forma: intenta una interpolació parabòlica inversa mitjançant els punts x, v i w . Aquest moviment serà acceptat si el mínim obtés cau dins de l'interval (a, b) i el pas respecte de l'anterior millor valor x representa menys de la meitat del pas anterior.

1.3 Recerca unidimensional amb derivades primeres

Si es disposa de la derivada primera de la funció que es desitja minimitzar, és possible aprofitar aquesta informació per dissenyar mètodes que convergisquen més ràpidament. Un primer atac al problema ve de la mà d'un teorema que ens assegura que si una funció té un extrem relatiu en x_0 , aleshores la seua primera derivada s'anul·la en x_0 . Fent ús d'aquest teorema, és possible trobar els extrems d'una funció aplicant mètodes per a trobar arrels a la primera derivada, com per exemple el mètode de Regula-Falsi o el de bisecció.

Aquest procediment, però, té l'inconvenient de que pot portar tant a un màxim com a un mínim, donat que en ambdós casos la primera derivada és zero. Una altra forma d'aprofitar la primera derivada és, donat el triplet (a, b, c) que fita el mínim, consultar el valor de la primera derivada en b , el qual ens indicarà si pendre el nou punt en l'interval (a, b) o en (b, c) . El valor de la primera derivada al punt millor i al segon millor s'extrapola a zero mitjançant el mètode d'interpolació parabòlica inversa, provant les mateixes condicions que al mètode de Brent. Si el pas ha de ser negligit, es realitza una bisecció a l'interval adequat.

2 Minimització de funcions de vèries variables

La minimització de funcions de vèries variables té una diferència fonamental respecte del procés anàleg en una variable: no és possible acotar el mínim. Açò augmenta la complexitat dels mètodes, que busquen tindre conjunts de punts (o direccions) a partir de les quals avançar cap al mínim.

Novament es pot dividir els mètodes en dos grans grups: els que només usen la informació que proporciona la funció i els que, amés, usen la informació proporcionada per la primera derivada.

Cal dir que, a pesar de què algunes mètodes presenten convergència supralinial, han de combinar-se amb altres mètodes per tal d'assegurar la convergència. En molts casos açò comporta que el major percentage de les iteracions siga emprat en buscar direccions (o punts) convenients per aplicar els mètodes supralinials.

2.1 Mètodes de direccions conjugades

Els mètodes de Powell es fonamenten en el fet què sabem com minimitzar funcions d'una variable. Per tant, una forma de procedir amb funcions de més d'una variable és triar certs conjunts de direccions i minimitzar la funció sobre eixos conjunts com si fora una funció d'una variable. Una possible elecció és triar com a direccions dels eixos habituals. Aquesta elecció no és roïna per a moltes funcions, però si la direcció del gradient s'allunya d'elles potser no siga la millor elecció. Així doncs, una part important d'aquests mètodes és la tria dels conjunts de direccions a seguir. Les direccions triades han de complir les següents condicions:

- Incloure algunes bones direccions que allunyen de planes multidimensionals
- Incloure direccions amb la propietat especial de *no interferir*, és a dir, la minimització al llarg d'una direcció no es veu arruïnada per la minimització al llarg d'una altra.

A les direccions que compleixen la segona condició se les anomena direccions conjugades.

2.1.1 Mètode de Powell

El mètode de Powell convergeix quadràticament. Es basa en un mètode descobert per Powell que proporciona un conjunt de N direccions conjugades. Es comença inicialitzant els N vectors als vectors cartesianes i es procedeix com segueix:

- Es guarda la posició inicial com P_0
- Mou P_{i-1} fins al mínim al llarg de la direcció u_i i anomena aquest P_i
- Canvia $u_{i+1} \rightarrow u_i$
- Canvia $P_N - P_0 \rightarrow u_N$
- Moure P_N fins al mínim en la direcció u_N i anomenar aquest P_0

Powell demostrà que k iteracions del procés anterior produeixen k direccions conjugades.

Aquest mètode té un problema i és que el fet de descartar la direcció u_1 en cada iteració tendeix a crear conjunts de direccions linealment dependents. Açò provoca que es trobe el mínim en un subespai, la qual cosa no és el resultat correcte. Per tal de corregir-ho existeixen diverses opcions: reinicialitzar les direccions després de N iteracions ; resetejar les direccions a les direccions principals d'una matriu ortogonal , i sacrificar la propietat de conjugació d'algunes direccions a canvi de orientar-les cap a valls on la funció minva.

Sol usar-se una modificació del mètode de Powell consistent en descartar la direcció del conjunt vell en la qual la funció es va minimitzar més. Aquesta direcció segurament siga la que més pes tinga en la nova millor direcció, i no descartar-la pot portar construir un conjunt de direccions linealment dependents i, com a conseqüència, obtindre un resultat fals. Definim $f_0 \equiv f(P_0)$, $f_N \equiv f(P_N)$ i $f_E \equiv f(2P_N - P_0)$. f_N és una extrapolació en la nova direcció. Si definim Δf com la magnitud de la màxima minimització en la iteració actual, procedirem de la següent forma:

- Si $f_E \geq f_0$ seguirem amb el vell conjunt de direccions, doncs la direcció $P_N - P_0$ no aporta minimitzacions de la funció.
- Si $2 * ((f_0 - 2 * f_N + f_E)(f_0 - \Delta f)^2 \geq (f_0 - f_E)^2 * \Delta f$ conservarem el vell conjunt de direccions, ja que o bé la minimització de la funció no està provocada per cap direcció en particular o bé existeix una derivada segona substancial al llarg del conjunt i semblen estar prop del seu mínim.

2.1.2 Mètode del gradient conjugat

És possible, a l'igual que es feia en una dimensió, incorporar la informació que ofereix la primera derivada a la busca de mínims. Una primera aproximació pot ser *baixar* sempre en la direcció oposta al gradient. Aquest mètode, però, pot causar problemes: si suposem que en situem a una vall, el primer pas ens portarà cap al sòl, el següent ens aproparà un poc més i finalment, quan ens trobem prop del sòl, el gradient sortirà en direcció perpendicular a aquest i generalment ens allunyarem del mínim.

De forma similar als mètodes de direccions conjugades, ens interessarà avançar per direccions que siguin conjugades a la major quantitat possible de les direccions preses anteriorment. Els mètodes que intenten aconseguir aquests tipus de direccions s'anomenen mètodes de gradient conjugat.

2.2 Mètode del símplex

Un símplex és, donat un espai de dimensió n , un conjunt de $n+1$ punts diferents. El mètode del símplex consisteix en anar canviant els punts que el formen fins que tanquen un mínim de la funció amb la tolerància requerida. Per a açò suposem que tenim els punts ordenats de menor a major valor de la funció f , la qual volem minimitzar:

$$f(x_1) < f(x_2) < \dots < f(x_n) < f(x_{n+1})$$

Per a manipular el símplex necessitem singularitzar 4 punts :

- Millor: es representa per la lletra M . Es tracta del punt x_1 , on la funció pren el menor valor
- Pitjor: es representa per P . És el punt x_{n+1} , punt on, de tots els considerats, la funció pren el major valor.
- Quasipitjor: es representa per Q . És el punt x_n .
- Centre de gravetat: es representa per G , i és el centre geomètric de tots els punts del símplex exceptuant el pitjor:

$$G = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n x_k$$

Per tal de trobar el mínim es procedeix substituïnt punts del símplex, de forma que després de cada substitució el nou punt no siga el pitjor. Es comença realitzant la reflexió del punt pitjor al llarg de la línia PG :

$$N = G + (G - P)$$

N és el nou punt. S'actua en funció del valor de $f(N)$:

- Cas 1: El nou punt és millor que tots els anteriors, és a dir, $f(N) \leq f(M)$. En aquest cas es realitza una pas en la mateixa direcció, definint el punt N' :

$$N' = G + 2(G - P)$$

En funció del valor de $f(N')$ es realitza una de les següents opcions:

- Cas 1a : $f(N') \leq f(N)$. El nou punt és millor que N . Es dilata el símplex substituïnt P per N' i tornem al principi.
- Cas 1b: $f(N) \leq f(N')$. Es substitueix P per N i el símplex no es dilata.

- Cas 2: El nou punt és millor que Q. Es canvia P per N, sense dilatar el símplex.
- Cas 3: en aquest cas N és pitjor que Q. És un símptoma de què el pas realitzat en la reflexió és massa gran. Es procedeix acceptant com a nou P el millor de P i N. Seguidament es prova a contraure el símplex :

$$N = G + (P - G)/2$$

i s'actua en funció del valor de $f(N)$.

- Cas 3a: N és millor que Q: es canvia P per N i es torna a començar.
- Cas 3b: N és pitjor que Q: es contrau tot el símplex en la direcció del punt millor:

$$X_k = X_1 + (X_k - X_1)/2$$

Una vegada contret el símplex, es torna al principi.