Práctica 2

Métodos de búsqueda para funciones de una variable

Introducción

Definición 1. *Una función real f se dice que es fuertemente cuasiconvexa en el intervalo (a,b) si para cada par de puntos $x_1, x_2 \in (a,b)$ con $x_1 \neq x_2$ se verifica que:*

$$f(\lambda x_1 + (1-\lambda)x_2) < \max\{f(x_1), f(x_2)\}, \quad \forall \lambda \in (0,1).$$

Se puede demostrar que si f es una función continua y fuertemente convexa en el intervalo (a,b), entonces f tiene un mínimo en este intervalo y es único.

Proposición 2. *Sea f una función fuertemente cuasiconvexa en (a,b) y sea y, z tales que $a < y < z < b$. Entonces, se verifica que:*

1. *Si* $f(y) \geq f(z) \Rightarrow f(x) \geq f(z), \forall x \in [a,y]$
2. *Si* $f(y) \leq f(z) \Rightarrow f(x) \geq f(y), \forall x \in [z,b]$

Demostración. 1. Por reducción al absurdo. Supongamos que existe $x \in [a,y]$ tal que $f(x) < f(z)$. Entonces, para el intervalo $[x,z]$ se verifica que

$$f(\lambda x + (1-\lambda)z) < \max\{f(x), f(z)\} = f(z), \quad \forall \lambda \in (0,1).$$

En particular, como $y \in [x,z]$, $f(y) < \text{máx}\{f(x), f(z)\} = f(z)$. Contradicción

2. Demostración análoga al caso anterior.

La consecuencia del resultado anterior es que basta con controlar lo que vale f en dos puntos y, z. Si $f(y) \geq f(z)$, entonces $f(x) \geq f(z)$ para todo $x \in [a, y]$, luego podemos restringir la búsqueda del mínimo al intervalo $[y, b]$. Sucesivamente iremos reduciendo la longitud de nuestro intervalo de incertidumbre hasta que sea menor que un cierto nivel ϵ.

Realmente para los métodos que vamos a presentar, basta con que la función sea **unimodal**. Una función es unimodal en una cierta región si sólo tiene un óptimo en dicha región. Una función unimodal podría ser continua o discontinua; incluso se podrían desarrollar métodos de búsqueda para funciones unimodales definidas sólo sobre un conjunto de valores discretos.

Definición 3. *Una función real f es unimodal en el intervalo $[a,b]$ si existe un punto $x^* \in [a,b]$ tal que f es decreciente en $[a,x^*]$ y f es creciente en $[x^*,b]$.*

Los métodos que se van a presentar para funciones unimodales podrían funcionar también sobre funciones multimodales, pero en este caso sólo localizarían uno de los óptimos. En lo que sigue consideraremos una función unimodal con un único mínimo en el interior del intervalo o en su frontera.

Búsqueda Dicotómica

Consiste en reducir al máximo la longitud del intervalo de incertidumbre en cada iteración.

$\boxed{\textit{Paso Inicial}}$

Fijar $\epsilon > 0$, $h > 0$. Hacer $[a_1, b_1] = [a, b]$ y $k = 1$.

$\boxed{\textit{Paso General}}$

Repetir:

1. Si $b_k - a_k < h$, PARAR. $[a_k, b_k]$ es el intervalo buscado.

2. Si $b_k - a_k \geq h$, hacer $y_k = \frac{a_k+b_k}{2} - \epsilon$, $z_k = \frac{a_k+b_k}{2} + \epsilon$ y comparar los valores $f(y_k)$ y $f(z_k)$.

   - Si $f(y_k) \geq f(z_k)$, hacer $a_{k+1} = y_k$ y $b_{k+1} = b_k$. Hacer $k = k + 1$. Ir a 1
   - Si $f(y_k) < f(z_k)$, hacer $a_{k+1} = a_k$ y $b_{k+1} = z_k$. Hacer $k = k + 1$. Ir a 1

Método de la sección áurea

La idea del método es la siguiente. Dado un intervalo (a, b) generamos inicialmente dos nuevos puntos $y_1 = a + (1 - \alpha)(b - a)$ y $z_1 = a + \alpha(b - a)$, para algún $\alpha \in \left(\frac{1}{2}, 1\right]$ convenientemente elegido. Según los valores que tomen $f(y)$ y $f(z)$, el intervalo de incertidumbre en el siguiente paso será (a, z) o (y, b). Pues bien, la idea del método es elegir α de forma que según el caso que corresponda el valor y_k coincida con el z_{k-1}, o bien z_k coincida con y_{k-1}.

Por ejemplo, si $f(y_1) \geq f(z_1)$, entonces el nuevo intervalo de incertidumbre es $(a_2 = y_1, b_2 = b)$ y α debe ser tal que $y_2 = a_2 + (1 - \alpha)(b - a_2) = z_1$. Puesto que

$a_2 = y_1$, la relación anterior quedaría

$$a + (1-\alpha)(b-a) + (1-\alpha)(b-(a+(1-\alpha)(b-a)) = a + \alpha(b-a)$$
$$2(1-\alpha)(b-a) - (1-\alpha)^2(b-a) = \alpha(b-a)$$
$$2(1-\alpha) - (1-\alpha)^2 = \alpha$$
$$(1-\alpha) - (2-(1-\alpha)) = \alpha$$
$$(1-\alpha)(1+\alpha) = \alpha$$
$$1-\alpha^2 = \alpha$$
$$\alpha^2 + \alpha - 1 = 0$$

cuya solución (positiva) es

$$\alpha = \frac{1+\sqrt(5)}{2} \sim 0{,}618033989$$

Obsérvese que con este método se tiene siempre que la longitud de un intervalo L_k respecto del anterior L_{k-1} es $L_k = \alpha L_{k-1}$.

La denominación del método se debe a que α es el número conocido como la *sección áurea* un número descubierto en la antigüedad (los griegos ya lo usaban) y que se asocia a proporciones que encontramos en la naturaleza en la morfología de diversos elementos tales como caracolas, nervaduras de las hojas de algunos árboles, el grosor de las ramas, proporciones humanas, etc. La sección áurea se obtiene dividiendo un segmento en dos partes de forma que la proporción de la parte menor frente a la parte mayor coincida con la proporción entre ésta última y la longitud total del segmento.

Algoritmo de la sección áurea

Paso Inicial

Fijar $h > 0$, $\alpha = \frac{1+\sqrt(5)}{2}$, $a_1 = a$, $b_1 = b$. Obtener $y_1 = a_1 + (1-\alpha)(b_1 - a_1), z_1 = a_1 + \alpha(b_1 - a_1)$. Calcular $f(y_1), f(z_1)$. Hacer k=1.

$\boxed{\textit{Paso General}}$

Repetir:

1. Si $b_k - a_k < h$, PARAR. $[a_k, b_k]$ es el intervalo buscado. En caso contrario, ir a 2.

2. Calcular $f(y_k)$ y $f(z_k)$. Si $f(y_k) \geq f(z_k)$, ir a 3. En caso contrario, ir a 4.

3. Hacer $a_{k+1} = y_k$, $b_{k+1} = b_k$,$y_{k+1} = z_k$ y $z_{k+1} = a_{k+1} + \alpha(b_{k+1} - a_{k+1})$. Calcular $f(z_{k+1})$. Hacer $k = k+1$ e ir a 1.

4. Hacer $a_{k+1} = a_k$, $b_{k+1} = z_k$,$z_{k+1} = y_k$ e $y_{k+1} = a_{k+1} + (1-\alpha)(b_{k+1} - a_{k+1})$. Calcular $f(y_{k+1})$. Hacer $k = k+1$ e ir a 1.

Método de Búsqueda de Fibonacci

El método de Fibonacci está considerado cómo el más eficiente entre los métodos de búsqueda. Difiere del método de la sección áurea en el hecho de que el valor de α no permanece constante en cada iteración. Además, el número de iteraciones viene predeterminado en base al nivel de exactitud especificado por el usuario.

El método de Fibonacci debe su nombre a que se utiliza la sucesión de Fibonacci

$$F_0 = F_1 = 1, \qquad F_n = F_{n-1} + F_{n-2}.$$

para determinar en cada iteración los nuevos valores y_k y z_k con los que evaluar el actual intervalo de incertidumbre. Como veremos, en el método de Fibonacci el $(k+1)$-ésimo subintervalo se obtiene reduciendo la longitud del k-ésimo subintervalo por un factor $\frac{F_{n-k-1}}{F_{n-k}}$. Por consiguiente, después de $n-2$ pasos, la longitud del último subintervalo será

$$\frac{F_{n-1}}{F_n}\frac{F_{n-2}}{F_{n-1}}\frac{F_{n-3}}{F_{n-2}}\cdots\frac{F_2}{F_3}\frac{F_1}{F_2}(b-a) = \frac{1}{F_n}(b-a).$$

Algoritmo de búsqueda de Fibonacci

$\boxed{\textit{Paso Inicial}}$

Fijar $h > 0$ y $\epsilon > 0$. Elegir n tal que $F_n > \frac{b-a}{h}$. Hacer $a_1 = a$, $b_1 = b$,

$$y_1 = a_1 + \left(1 - \frac{F_{n-1}}{F_n}\right)(b_1 - a_1) \qquad z_1 = a_1 + \frac{F_{n-1}}{F_n}(b_1 - a_1),$$

y $k = 1$.

$\boxed{\textit{Paso General}}$

Repetir:

1. Si $f(y_k) \geq f(z_k)$, ir a 2. En caso contrario, ir a 3.

2. Hacer $a_{k+1} = y_k$, $b_{k+1} = b_k$, $y_{k+1} = z_k$ y

$$z_{k+1} = a_{k+1} + \frac{F_{n-k-1}}{F_n - k}(b_{k+1} - a_{k+1}).$$

   Si $k = n - 2$, ir a 5. En caso contrario, calcular $f(z_{k+1})$ e ir a 4.

3. Hacer $a_{k+1} = a_k$, $b_{k+1} = z_k$, $z_{k+1} = y_k$ y calcular

$$y_{k+1} = a_{k+1} + \left(1 - \frac{F_{n-k-1}}{F_n - k}\right)(b_{k+1} - a_{k+1}).$$

   Si $k = n - 2$, ir a 5. En caso contrario, calcular $f(z_{k+1})$ e ir a 4.

4. Hacer $k = k + 1$ e ir a 1.

5. Hacer $y_n = y_{n-1}$, $z_n = y_{n-1} + \epsilon$.

   - Si $f(y_n) \leq f(z_n)$, tomar $a_n = a_{n-1}, b_n = z_{n-1}$.
   - Si $f(y_n) \geq f(z_n)$, tomar $a_n = y_{n-1}, b_n = b_{n-1}$.

   FINAL. $[a_n, b_n]$ es el intervalo de incertidumbre final.

Para un valor de n suficientemente grande, la proporción $\frac{F_{n-1}}{F_n}$ tiende al número áureo, y por lo tanto el método de Fibonacci se aproxima al método de la sección áurea.

Método de aproximación de la función. Interpolación cuadrática

Como hemos visto, los métodos de búsqueda consisten en ir reduciendo adecuadamente el intervalo de incertidumbre en el que se encuentra el óptimo de la función. Los métodos de aproximación de la función se basan en, a partir de la evaluación de la función en unos pocos puntos, aproximar ésta por un polinomio, y posteriormente aproximar la posición del óptimo de la función por la del óptimo del polinomio, más sencillo de obtener.

Evaluamos la función f en tres puntos x_1, x_2, x_3 y aproximamos $f(x)$ por la función cuadrática $g(x) = Ax^2 + Bx + C$, donde A,B y C se determinan por las ecuaciones:

$$Ax_1^2 + Bx_1 + C = f(x_1)$$
$$Ax_2^2 + Bx_2 + C = f(x_2)$$
$$Ax_3^2 + Bx_3 + C = f(x_3)$$

la solución a este sistema viene dada por:

$$A = \frac{[(x_3 - x_2)f(x_1) + (x_1 - x_3)f(x_2) + (x_2 - x_1)f(x_3)]}{\Delta}$$
$$B = \frac{[(x_2^2 - x_3^2)f(x_1) + (x_3^2 - x_1^2)f(x_2) + (x_1^2 - x_2^2)f(x_3)]}{\Delta}$$
$$C = \frac{[x_2x_3(x_3 - x_2)f(x_1) + x_1x_3(x_1 - x_3)f(x_2) + x_1x_2(x_2 - x_1)f(x_3)]}{\Delta}$$

donde $\Delta = (x_1 - x_2)(x_2 - x_3)(x_3 - x_1)$. Como $g(x)$ tiene un óptimo en $\frac{-B}{2A}$, podemos aproximar la ubicación del mínimo de $f(x)$ por

$$x^* \approx \frac{-1}{2} \frac{[(x_2^2 - x_3^2)f(x_1) + (x_3^2 - x_1^2)f(x_2) + (x_1^2 - x_2^2)f(x_3)]}{[(x_3 - x_2)f(x_1) + (x_1 - x_3)f(x_2) + (x_2 - x_1)f(x_3)]} \tag{1}$$

Algoritmo de Interpolación Cuadrática

Supongamos que tenemos una función real, f, unimodal en el intervalo $[a, b]$ y de una variable. Vamos a desarrollar el procedimiento suponiendo que el óptimo se trata de un mínimo.

Paso Inicial

Tomar $h > 0$ cota del error de aproximación.

Paso General

Repetir:

1. Seleccionar tres puntos $x_1, x_2, x_3 \in [a, b]$ tales que $f(x_2) < f(x_1)$ y $f(x_2) < f(x_3)$.
2. Obtener el valor mínimo del polinomio de interpolación correspondiente a los puntos x_1, x_2, x_3. Dicho mínimo viene dado por la expresión 1.
3. Si $|x_2 - x^*| < h$, PARAR. x^* se toma como aproximación al verdadero óptimo de la función. En caso contrario, ir a 4.
4. Si $x_2 \leq x^*$, entonces tomar $a = x_1$, $b = x_2$ y volver al paso 1. En caso contrario, tomar $a = x_2$, $b = x_3$ y volver al paso 1.

El siguiente es otro posible algoritmo basado en el mismo método:

Paso Inicial

Seleccionar tres puntos $x_1, x_2, x_3 \in [a, b]$. Tomar $h > 0$ cota del error de aproximación. Hacer $k = 1$.

$\boxed{\textit{Paso General}}$

Repetir:

1. Obtener x^* el valor mínimo del polinomio cuadrático de interpolación correspondiente a los puntos x_1, x_2, x_3. Dicho mínimo viene dado por la expresión 1. Sea $y_k = f(x^*)$. Si $k = 1$, ir al paso 3, en caso contrario ir al paso 2.

2. Si $|y_k - y_{k-1}| < h$, PARAR. x^* se toma como aproximación al verdadero óptimo de la función. En caso contrario, ir a 3.

3. Sea i tal que $f(x_i) = \max\{f(x_1), f(x_2), f(x_3)\}$. Hacer $x_i = x^*$ y volver al paso 1.