Lecturas de Optimización Numérica:

APLICACIONES DE LA OPTIMIZACIÓN NUMÉRICA

Prof. Dr. Fredy Vides

Scientific Computing Innovation Center, UNAH &
Centre for Analysis of Data-Driven Systems
E-mail: fredy.vides@unah.edu.hn

ÍNDICE

OBJETIVOS

1. Resolver problemas aplicados que involucran las técnicas de optimización numérica estudiadas hasta la fecha.

1. MINI PROYECTO DE APLICACIÓN: AJUSTE POR MÍNIMOS CUADRADOS

Considerando el problema determinado por el ajuste de una colección de datos $\mathcal{D} = \{(x_j, y_j)\}_{j=1}^{N} \subset \mathbb{R}^2$ a través de una curva determinada por una expresión $y = f(x)$ donde $f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots a_nx^n$.

Considerando además la matriz $X \in \mathbb{R}^{N\times(n+1)}$ definida por la expresión.

$$X = \begin{bmatrix} x_1^n & x_1^{n-1} & \cdots & x_1^2 & x_1 & 1 \\ x_2^n & x_2^{n-1} & \cdots & x_2^2 & x_2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_N^n & x_N^{n-1} & \cdots & x_N^2 & x_N & 1 \end{bmatrix} \tag{1.1}$$

Para este proyecto se hace la siguiente suposición.

Suposición 1.1. Se supone que $N \geq n+1$, y que las columnas de la matriz $X \in \mathbb{R}^{N\times(n+1)}$ definida por (1.1) son linealmente independientes.

Notación 1.2. Sean $a \in \mathbb{R}^{n+1}$ y $y \in \mathbb{R}^n$ los vectores definidos por las expresiones.

$$a = \begin{bmatrix} a_n \\ a_{n-1} \\ \vdots \\ a_1 \\ a_0 \end{bmatrix}, \quad y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{N-1} \\ y_N \end{bmatrix}, \tag{1.2}$$

Ejercicio para el lector 1. Demostrar o refutar que que el problema:

$$a = \operatorname{argmin}_{b \in \mathbb{R}^{n+1}} \frac{1}{2} \|Xb - y\|_2^2 \tag{1.3}$$

es equivalente a resolver el siguiente sistema.

$$X^\top X a = X^\top y \tag{1.4}$$

Ejercicio para el lector 2. Desarrollar un programa Octave que resuelva el problema (1.3), para las condiciones adecuadas de $X \in \mathbb{R}^{N \times (n+1)}$.

Ejercicio para el lector 3. Dado un número entero $n > 0$ (determinado por el usuario). Desarrollar un programa Octave que genere conjuntos de datos $\mathcal{D} = \{(x_j, y_j)\}_{j=1}^N \subset \mathbb{R}^2$ tales que la suposición 1.1 se cumple. Aplicar el programa desarrollado como parte del ejercicio para el lector 2 para calcular el polinomio que mejor ajusta los datos en $\mathcal{D}$ en el sentido de los mínimos cuadrados.

2. Mini Proyecto: Ajuste de curvas por métodos de mñimos cuadrados no lineales

Si se consideran los siguientes conjuntos de datos:

$$T = \{t_j\}_{j=1}^8 = \{0{,}055, 0{,}181, 0{,}245, 0{,}342, 0{,}419, 0{,}465, 0{,}593, 0{,}752\}$$
$$Y = \{y_j\}_{j=1}^8 = \{2{,}80, 1{,}76, 1{,}61, 1{,}21, 1{,}25, 1{,}13, 0{,}52, 0{,}28\}$$

El problema de encontrar la aproximación de mínimos cuadrados $\phi(t) = x_1 + x_2 t + x_3 t^2 + x_4 e^{-x_5 t}$ (con coeficientes $x_1, x_2, \ldots, x_5$) correspondiente a los pares de datos $\{(t_j, y_j)\}_{j=1}^8$, puede resolverse aplicando el siguiente procedimiento de optimización numérica.

Solución. El problema de ajuste de los datos considerados anterioremente equivale al problema de optimización.

$$x = \operatorname{argmin}_{x \in \mathbb{R}^5} \sum_{j=1}^{8} |x_1 + x_2 t_j + x_3 t_j^2 + x_4 \exp(-x_5 t_j) - y_j|^2$$

Es posible ingresar los datos t_j, y_j correspondientes a las variables t, y utilizando la siguiente secuencia de comandos.

```
>> t = [
   0.055000
   0.181000
   0.245000
   0.342000
   0.419000
   0.465000
```

```
   0.593000
   0.75200];

>> y =[
   2.80000
   1.76000
   1.61000
   1.21000
   1.25000
   1.13000
   0.52000
   0.28000];
```

Para resolver el problema:

$$x = \text{argmin}_{x\in\mathbb{R}^5} \sum_{j=1}^{8} |x_1 + x_2 t_j + x_3 t_j^2 + x_4 \exp(-x_5 t_j) - y_j|^2$$

Es posible definir ahora la función objetivo $\Phi \in C(^2\mathbb{R}^5, \mathbb{R})$ utilizando la siguiente secuencia de comandos.

```
>> Phi=@(x)norm(x(1)+x(2)*t+x(3)*t.^2+x(4)*exp(-x(5)*t)-y,2);
```

Una vez definida la función objetivo es posible aplicar el comando `sqp` de Octave para resolver el problema de optimización correspondiente, utilizando la siguiente secuencia de comandos.

```
>> x0=ones(5,1);
>> [x, obj, info, iter, nf, lambda] = sqp (x0, Phi, []);
```

Para visualizar los resultados es posible utlizar la siguiente secuencia de comandos.

```
>> tt=t(1):(t(8)-t(1))/100:t(8);
>> phi=@(t,x)x(1)+x(2)*t+x(3)*t.^2+x(4)*exp(-x(5)*t);
>> plot(t,y,'r.','markersize',25,tt,phi(tt,x),'b','markersize',15);
>> grid on
>> axis tight
```

La visualización de resultados correspondiente se muestra en la figura 2.1.

Ejercicio para el lector 4. Para los datos anteriormente considerados en esta sección. Resolver el problema de ajuste de datos correspondiente al problema de optimización.

$$x = \text{argmin}_{x\in\mathbb{R}^5} \max_{1\leq j\leq 8} |x_1 + x_2 t_j + x_3 t_j^2 + x_4 \exp(-x_5 t_j) - y_j|$$

Visualizar resultados y "comparar con resultados previos", al visualizar las curvas de ajuste producidas por los problemas de optimización correspondientes, junto con los datos, en una misma figura.

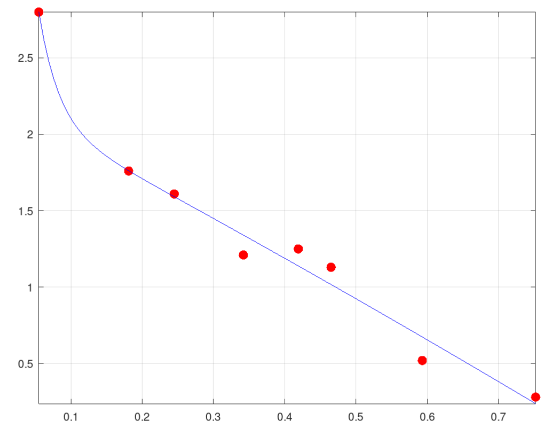

FIGURA 2.1. Salida gráfica de la solución del computacional del mini-proyecto de ajuste de datos por mínimos cuadrados no lineales.

REFERENCIAS

[1] A. S. Householder (1964). The Theory of Matrices in Numerical Analysis. Dover Publications, Inc.
[2] R. L. Burden, D. J. Faires, A. M. Burden. (2017). Análisis Numérico. 10a Ed. Cengage Learning Editores.
[3] Golub, G. H., Van Loan C. F (1996). Matrix Computations (3aEd.). The Johns Hopkins University Press.
[4] Quarteroni A., Saleri F., Gervasio P. (2014). Scientific computing with MATLAB and Octave (Textbook).
[5] D. G. Luenberger, Y. Ye. (2016). Linear and Nonlinear Programming. 4a Ed. Springer International Publishing Switzerland.