

DETERMINACIÓN DE EXTREMOS DE FUNCIONES DADAS POR UN CONJUNTO FINITO DE VALORES MEDIANTE EL MIF¹.

Horacio E. Retamales²

Laboratorio de Matemáticas Aplicadas (LAMA)
Universidad Tecnológica Nacional (UTN),
Facultad Regional Mendoza (FRM)
Rodríguez 273, 5500-Mendoza, ARGENTINA
e-mail: lama@frm.utn.edu.ar

Key words: Extremes of functions, optimization, MIF

Abstract. *This work is a consequence of the determination of the best alternative in the design of equipment for an industrial activity carried out to answer the requirement of a local company. The long history of the company did not show an evolution of its own designs toward the optimization of those according to any criteria, but permanent modification to adapt equipment performance to the particular client requirements in each situation were made. In the reference [1] the experience is commented. On the other hand, coming from organizational Engineering considerations [2,3], we find problems where the extremes of functions with domains of high dimension and defined by points are to be solved. Data coming from the experience. The exact determination of the stationary points of a function of many variables, for functions given analytically, is known. In that case, the problem consists on solving the system of algebraic equations that is found from the nullity of the components of the gradient of the function. That is, every first derivative of the function is known analytically. It is not the case of a function given by points. It then conform a numeric problem that can be synthesized as follows: Approximate determination of the extremes of functions defined by points with domains of high dimension. As an extension of the gradient method an application of the MIF for the determination of stationary points of functions given by points is presented. The new method is applicable without changes to functions with any n-dimensional domain.*

¹ MIF: Método de los Incrementos Finitos

² Colaboradores: Gustavo Daniel Olguín-Alejandro Zabala

1 MÉTODO DE LA DETERMINACIÓN DIRECTA DEL PUNTO ESTACIONARIO MÁS PRÓXIMO A UN PUNTO DADO DEL DOMINIO

Consideramos conocer los valores que una función desconocida toma en un conjunto finito de puntos de su dominio. Sustituimos a la función desconocida por otra f que la interpola y que coincide con la función desconocida en los puntos dados. La determinación del punto estacionario se realizará sobre f . En trabajos posteriores se muestran condiciones que permiten controlar el error de aproximación de la función interpolante a la desconocida.

Veamos el siguiente caso (dominio tridimensional):

$$\begin{aligned} &\text{Sea una función dada por puntos}^3 \text{ que indicamos como sigue:} \\ &f: D \rightarrow R \quad \text{con} \quad D \subset R^3 \quad \text{tal que} \\ &f(X_i) = k_i \quad \text{para} \quad i=1,2,\dots,m \end{aligned} \quad (1)$$

El Método de los Incrementos Finitos (MIF) [4] permite calcular el desarrollo de Taylor de f en $X_0 \in D$. Si $m = 10$; se tiene que:

$$Tf(\bar{X}_0) = [f_0, f_{x0}, f_{y0}, f_{z0}, f_{xx0}, f_{xy0}, f_{xz0}, f_{yy0}, f_{yz0}, f_{zz0}]^T ;$$

está determinado a partir de (1).

La determinación de un punto estacionario de f en \bar{X} próximo a \bar{X}_0 se puede realizar, en primera aproximación, a partir de:

$$\nabla f(X) = \bar{0} \quad (2)$$

Esto es, calculando desde \bar{X}_0 , buscamos determinar un punto \bar{X} cercano en el que el gradiente de f sea nulo⁴:

$$\begin{bmatrix} \Delta'_{x_0} \bar{X} \\ \Delta'_{y_0} \bar{X} \\ \Delta'_{z_0} \bar{X} \end{bmatrix} \cdot Tf(\bar{X}_0) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3)$$

esto es:

³ Esta es otra diferencia con el método del gradiente.

⁴ Esta es una de las diferencias con el método del gradiente. En aquel caso, se seguiría en la dirección del gradiente desde \bar{X}_0 determinando los vértices de una trayectoria quebrada tal que, en varios pasos, se llega al punto estacionario \bar{X} .

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \Delta x & \Delta y & \Delta z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \Delta x & 0 & \Delta y & \Delta z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \Delta x & 0 & \Delta y & \Delta z \end{bmatrix} \cdot [Tf(X_0)] = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3)$$

Que escribiremos como:

$$\begin{bmatrix} f_{x_0} \\ f_{y_0} \\ f_{z_0} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} f_{xx_0} & f_{xy_0} & f_{xz_0} \\ f_{xy_0} & f_{yy_0} & f_{yz_0} \\ f_{xz_0} & f_{yz_0} & f_{zz_0} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4)$$

Esto es un Sistema de Ecuaciones Algebraicas Lineales (SEAL) en $\Delta x, \Delta y, \Delta z$.

Luego,

$$\bar{X} = \bar{X}_0 + \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta z \end{bmatrix} \quad (5)$$

es el punto donde ∇f es nulo, esto es un punto estacionario de f .

En caso de que la aproximación al punto estacionario sea el $\nabla f(\bar{X}) \neq \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$, se puede repetir el

proceso, calculando el Taylor de f en $X y$, a partir de él, calcular un nuevo punto estacionario, hasta la proximidad exigida por la aplicación.

De (4), se tiene

$$\nabla f(\bar{x}_0) + \nabla \nabla f(\bar{x}_0) \Delta \bar{x} = 0 \quad (4')$$

Donde $\nabla \nabla f(\bar{x}_0) = \begin{bmatrix} \nabla f_{x_1} \\ \nabla f_{x_2} \\ \vdots \\ \nabla f_{x_i} \end{bmatrix}$, es una matriz $m * m$ y sus filas son los gradientes de las

componentes del gradiente de f en \bar{x}_0 .

El vector $\Delta \bar{x} = \begin{bmatrix} \Delta x_1 \\ \Delta x_2 \\ \vdots \\ \Delta x_i \end{bmatrix}$, corresponde a las incógnitas de (4) para un dominio tridimensional.

Debemos expresar las derivadas de la diferencial 2° en función de las componentes del Taylor para cualquier dimensión (n-ésima) del dominio. Esto es: La matriz $\nabla \nabla f(x_0)$, para el caso

de dominio de f de dimensión n - ésima y dada en función de las componentes del Taylor de f en x_0 y completada por simetría:

$$\nabla\nabla f(x_0) = \begin{bmatrix} Tf(n+2) & Tf(n+3) & Tf(n+4) \dots & Tf(2n+1) \\ Tf(n+3) & Tf(2n+2) & Tf(2n+3) \dots & Tf(3n) \\ Tf(n+4) & Tf(2n+3) & Tf(3n+1) \dots & Tf(3n+2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ Tf(2n+1) & Tf(3n) & Tf(3n+2) & Tf(3n+3) \end{bmatrix}_{x=x_0}$$

Como ejemplo de uso de la expresión (5), de una función con dominio en \mathbb{R}^2 , intentemos calcular el punto estacionario de una función desde un punto cualquiera del dominio. Sea

$$z = x^2 + y^2 + x + y + 1$$

Sabemos que su punto estacionario resulta de:

$$\begin{cases} z_x = 2x + 1 = 0 \\ z_y = 2y + 1 = 0 \end{cases}$$

de donde se tiene $\begin{cases} x_0 = -1/2 \\ y_0 = -1/2 \end{cases}$.

Consideremos el punto $X_1 = (-1/3; -1/4)$ y calculemos el gradiente de z en X_1

$$\nabla z = \begin{bmatrix} -2/3 + 1 \\ -1/2 + 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/3 \\ 1/2 \end{bmatrix}.$$

Por otra parte la matriz

$$\nabla\nabla z(X_1) = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$$

luego, la expresión (3), para un punto cualquiera X cercano a X_1 tal que

$$X - X_1 = \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{bmatrix}$$

se escribe

$$\begin{bmatrix} 1/3 \\ 1/2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

que resuelta en Δx y Δy resulta

$$\begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1/6 \\ -1/4 \end{bmatrix}.$$

Así, el punto estacionario es

$$X = X_1 + \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1/3 - 1/6 \\ -1/4 - 1/4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1/2 \\ -1/2 \end{bmatrix}.$$

2 DETERMINACIÓN DIRECTA DE VARIOS PUNTOS ESTACIONARIOS

Si en (1) $m = 21$ se puede determinar el Taylor de f en X_0 hasta las componentes de la diferencial 3º.

$$f_{x_i^3}, f_{x_i^2 y_i}, f_{x_i^2 z_i}, f_{x_i y_i^2}, f_{x_i y_i z_i}, f_{z_i^2 x_i}, f_{y_i^3}, f_{y_i^2 z_i}, f_{z_i^2 y_i}, f_{z_i^3}$$

luego, es plantear en segunda aproximación la determinación de los puntos estacionarios de f cercanos a X_0 mediante (6) al primer miembro de (4').

$$\begin{bmatrix} [\Delta x, \Delta y, \Delta z] & [0] & [0] \\ [0] & [\Delta x, \Delta y, \Delta z] & [0] \\ [0] & [0] & [\Delta x, \Delta y, \Delta z] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A & \Phi & \Phi \\ \Phi & B & \Phi \\ \Phi & \Phi & C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} [\Delta x, \Delta y, \Delta z]^T & [0]^T & [0]^T \\ [0]^T & [\Delta x, \Delta y, \Delta z]^T & [0]^T \\ [0]^T & [0]^T & [\Delta x, \Delta y, \Delta z]^T \end{bmatrix} \cdot 1/2! \quad (6)$$

5 donde: $[0]$ es un bloque 1×3 nulo; Φ es un bloque 3×3 nulo y $[0]^T$ es el bloque transpuesto de $[0]$, además:

$$A = \begin{bmatrix} f_{xxx0} & f_{xxy0} & f_{xxz0} \\ f_{xxy0} & f_{xyy0} & f_{xyz0} \\ f_{xxz0} & f_{xyz0} & f_{xzz0} \end{bmatrix}; \quad B = \begin{bmatrix} f_{xxy0} & f_{xyy0} & f_{xyz0} \\ f_{xxy0} & f_{xyy0} & f_{xyz0} \\ f_{xyz0} & f_{xyy0} & f_{xyz0} \end{bmatrix} \quad \text{y} \quad C = \begin{bmatrix} f_{xxz0} & f_{xyz0} & f_{xzz0} \\ f_{xyz0} & f_{yyz0} & f_{yzz0} \\ f_{xxz0} & f_{yyz0} & f_{zzz0} \end{bmatrix}$$

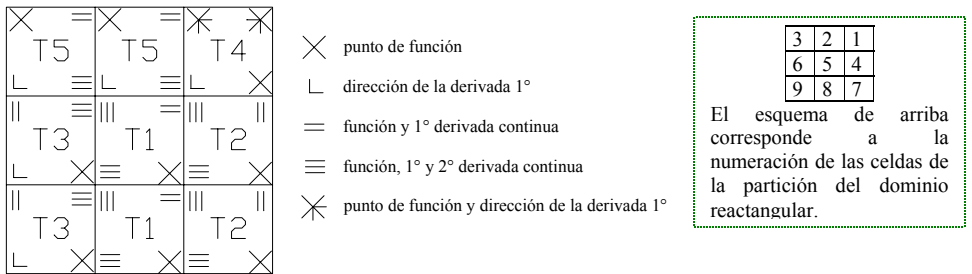
El sistema algebraico de ecuaciones resultado de sumar (6) al primer miembro de (4') es cuadrático en $\Delta x, \Delta y, \Delta z$. El conjunto de soluciones posibles es 2^n , donde n es la dimensión del dominio de f .

3 PARTICIÓN DEL DOMINIO

Si la búsqueda de los extremos de una función de muchas variables dada por un conjunto finito de valores se realiza sobre su interpolante (polinomio de Taylor) mediante (4') más particiones adecuadas de su dominio (e.g. ver ref. [5] "Aproximación numérica de funciones múltiplemente paramétricas") el procedimiento sería un alternativa del método del gradiente.

La búsqueda de algoritmos más eficientes para el cálculo de los Taylor de la función nos lleva a las consideraciones que siguen:

El ejemplo que planteamos es para establecer formas recursivas de cálculo de los Taylors en cada celda de una partición, del dominio bidimensional de una función, en 9 celdas rectangulares con las respectivas condiciones de continuidad entre celdas contiguas y la consideración de condiciones de borde en cantidad y tipo para la compatibilidad del sistema de ecuaciones resultante. La función está dada por puntos que son las condiciones de borde del problema a resolver. Las condiciones de continuidad se imponen arbitrariamente.



Observación: Si el tipo de elementos y la numeración se adecua es posible establecer el cálculo de Taylor mediante un procedimiento recursivo.

- El elemento N° 1 debe ser del tipo 4 (sin condición de continuidad)
- El elemento N° 2 debe tener condiciones de continuidad solo con el N° 1.
- El elemento N° 3 condición de continuidad con el N° 2 .
- El elemento j-ésimo solo con condición de continuidad con los contiguos anteriores.

Observación: Si se cuenta con un procedimiento eficiente para la determinación de Taylor en cada celda de una partición de un dominio dado, se plantea la búsqueda de los puntos estacionarios de una función más cercanos al punto de cálculo del Taylor en cada celda. Luego a partir de aquel conjunto de puntos estacionarios y respectiva determinación de los extremos de la función determinar el máximo o mínimo de aquéllos. La aplicación de las expresiones derivadas en (1) adecuadamente en cada celda de la partición del dominio de f , y las correspondientes a las condiciones de continuidad, permiten establecer el siguiente seal (7) , que tiene como indeterminadas un Taylor en cada celda.

$$\begin{bmatrix} A_{11} & & & & & & & & & & \\ A_{21} & A_{22} & & & & & & & & & \\ & A_{32} & A_{33} & & & & & & & & \\ A_{41} & & & A_{44} & A_{45} & & & & & & \\ & A_{52} & & & A_{55} & & & & & & \\ & A_{62} & A_{63} & & A_{65} & A_{66} & & & & & \\ & A_{72} & & A_{74} & A_{75} & & A_{77} & & & & \\ & & & & A_{85} & A_{86} & & A_{88} & & & \\ & & & & & & & A_{97} & A_{98} & A_{99} & \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \overline{y_1} \\ \overline{y_2} \\ \overline{y_3} \\ \overline{y_4} \\ \overline{y_5} \\ \overline{y_6} \\ \overline{y_7} \\ \overline{y_8} \\ \overline{y_9} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \\ y_6 \\ y_7 \\ y_8 \\ y_9 \end{bmatrix} \quad (7)$$

Así, observamos que el tipo de condiciones de borde y de continuidad genera un elemento al que le corresponde una igualdad particular:

$$\left. \begin{aligned} \{T_4\} \quad \overline{y'_1} &= A_{11}^{-1} \cdot y_1 \\ \{T_1\} \quad \overline{y'_2} &= A_{22}^{-1} \cdot [\overline{y_2} - A_{21} \cdot \overline{y'_1}] \\ \{T_1\} \quad \overline{y'_3} &= A_{33}^{-1} \cdot [\overline{y_3} - A_{32} \cdot \overline{y'_2}] \\ \{T_2\} \quad \overline{y'_4} &= A_{44}^{-1} \cdot [\overline{y_4} - A_{41} \cdot \overline{y'_1}] \\ \{T_3\} \quad \overline{y'_5} &= A_{55}^{-1} \cdot [\overline{y_5} - A_{52} \cdot \overline{y'_2} - A_{54} \cdot \overline{y'_4}] \\ \{T_3\} \quad \overline{y'_6} &= A_{66}^{-1} \cdot [\overline{y_6} - A_{63} \cdot \overline{y'_3} - A_{65} \cdot \overline{y'_5}] \\ \{T_2\} \quad \overline{y'_7} &= A_{77}^{-1} \cdot [\overline{y_7} - A_{74} \cdot \overline{y'_4}] \\ \{T_3\} \quad \overline{y'_8} &= A_{88}^{-1} \cdot [\overline{y_8} - A_{85} \cdot \overline{y'_5} - A_{87} \cdot \overline{y'_7}] \\ \{T_3\} \quad \overline{y'_9} &= A_{99}^{-1} \cdot [\overline{y_9} - A_{96} \cdot \overline{y'_6} - A_{98} \cdot \overline{y'_8}] \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

Observación: Si la partición es regular, todas las celdas iguales geoméricamente, las condiciones de borde y de continuidad generan solo 4 tipos de elementos diferentes.

$$\left. \begin{aligned}
 A_{11} = A_{22} = A_{33} = A_{44} \\
 A_{44} = A_{55} = A_{66} = A_{77} = A_{88} = A_{99} \\
 A_{21} = A_{32} \\
 A_{41} = A_{52} = A_{63} = A_{74} = A_{85} = A_{96} \\
 A_{54} = A_{65} = A_{87} = A_{98}
 \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} A \\ \\ = B \\ = C \\ = D \end{array} \quad (9)$$

De (8) y (9)

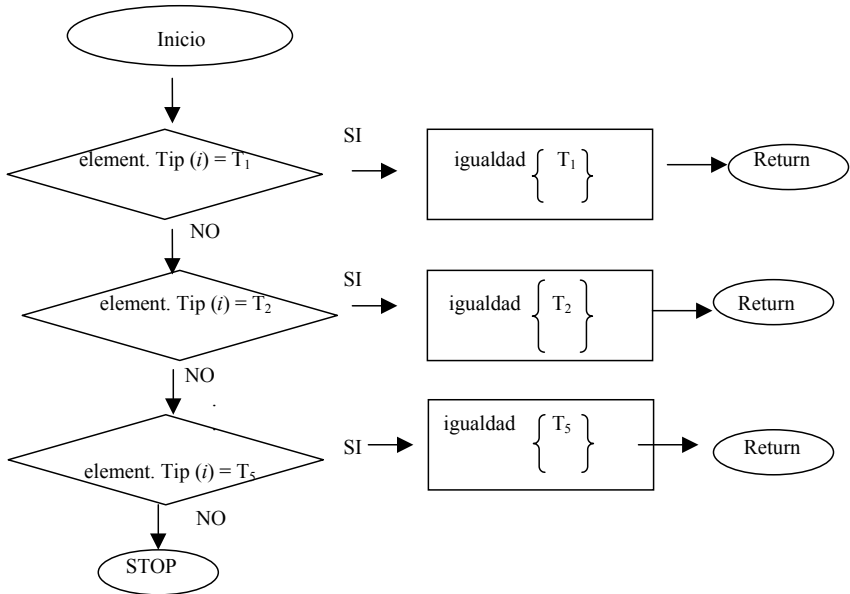
$$\begin{aligned}
 \overline{y}'_1 &= A^{-1} \overline{y}_1 \\
 \overline{y}'_i &= A^{-1} [\overline{y}_i - B \overline{y}'_{i-1}]; \quad i = 2;3 \\
 \overline{y}'_i &= A^{-1} [\overline{y}_i - C \overline{y}'_{i-3} - D \overline{y}'_{i-1}]; \quad i = 5;6;8;9 \\
 \overline{y}'_i &= A^{-1} [\overline{y}_i - C \overline{y}'_{i-1}]; \quad i = 4;7
 \end{aligned}$$

Observación: La regularidad (geométrica) del dominio tratado es desventajosa para la aplicación a un caso práctico en el que seguramente los bordes no son regulares y los datos se tienen en un conjunto discreto de puntos de distribución también irregular.

La consecuencia sobre el algoritmo numérico es convertirlo en pseudorecursivo (lo que indicamos como de razón variable con el índice de la sucesión). Sin embargo, sigue presentando ventajas sobre eficiencia computacional. En este caso no son válidas las igualdades (9) por la desigualdad geométrica de las celdas de la partición del dominio.

Consecuentemente deben calcularse todos los bloques de la matriz de coeficientes del SEAL (7) y el procedimiento de cálculo de los Taylor es el (8). Cada igualdad corresponde a un tipo de elemento (celda) como se ha indicado entre llaves. Los factores (matrices) resultan de la matriz de conectividad de cada elemento.

4 PROCEDIMIENTO PSEUDO-RECURSIVO PARA CÁLCULO DEL TAYLOR POR ELEMENTO.



Observación: El algoritmo es pseudo-recursivo por la dos causas siguientes:

1. El tipo de elemento
2. La forma de numerar las celdas de la partición del dominio.

Vimos que el tipo de elemento de la partición determina la relación entre los vectores de la sucesión recursiva. La forma de numeración es la que justifica la disposición “bandas” de los bloques de la matriz de coeficientes del seal (7) (e.g. ver Matrices Ralas y Representación de redes [5]). En trabajos en desarrollo en la actualidad se determinó el algoritmo recursivo para calcular los Taylor de una función en cada celda de una partición del dominio de dimensión cualquiera. Las siguientes consideraciones amplían el procedimiento de optimización iniciado:

1. La facilidad del cálculo del Tf en cada celda de una partición del dominio de f sirve para optar por partir el dominio en vez de calcular más términos del Taylor para agregar términos de tercer orden en la búsqueda de los puntos estacionarios de f .

2. El procedimiento de optimización se completaría entonces, como sigue:
 - 2.1 Cálculo del Taylor de f hasta los términos de 2° orden en cada celda de una partición del dominio.
 - 2.2 Cálculo de $\nabla \nabla f(\bar{x}_{i0})$, x_{i0} es el punto de cálculo del Taylor de f en la celda i -ésima.
 - 2.2.1 Resolución del seal (7)
 - 2.2.2. Verificación de pertenencia del punto $\bar{x}_i = \bar{x}_{0i} + \Delta \bar{x}$ a la celda i -ésima.
 - Si pertenece, \bar{x}_i es un punto estacionario.
 - Si no pertenece desecharlo.
- 2.3 Verificar el tipo de extremo de $f(x_i)$ en todos los puntos estacionarios.

Observación: Una partición demasiado densa puede identificarse por la propiedad siguiente: “Los puntos estacionarios determinados no pertenecen a sus respectivas celdas”. No hemos identificado la propiedad mediante la que se identifica una partición poco densa. Seguramente estará relacionada con la multiplicidad de puntos estacionarios por celda.

4 CONCLUSIONES

Operar con dominios de dimensión alta en particular mediante particiones supone una complejidad que solo puede resolverse mediante la automatización del proceso. Esto es, mínima participación del operador semejante a la generación automática de redes. Un logro significativo en este aspecto sería un procedimiento totalmente automático, salvo la definición del dominio. Un ejemplo sería:

- Dar la función objetivo
- Listado de variables con su intervalo de variabilidad.

Con sólo esto, determinar sus extremos.

En trabajos recientes hemos determinado el algoritmo que automatiza el procedimiento respectivo con el agregado de incorporación de formas recursivas en la determinación de los Taylors de cada celda. Para la implementación informática, no se han completado aún las tareas y pruebas correspondientes, razón por la que completaremos la presentación en un futuro inmediato.

5 REFERENCIAS

- [1] H.E. Retamales y Gustavo D. Olguín., “Optimización de Diseños. Aplicación al diseño de intercambiadores de Calor”, Informe Interno Empresa TIRSA, Mendoza, 1999.
- [2] H.E. Retamales, “Ingeniería Organizacional para la Construcción y Operación de la Organización Inteligente”, Editorial ExLibris, ISBN 987-99907-1-4, Mendoza, Octubre 2000.

- [3] H.E. Retamales, "La Ingeniería Organizacional en la Integración de Empresas", Editorial Libros en la Red, Febrero 2002.
- [4] H.E. Retamales, "El Método de los Incrementos Finitos", Notas del INMASJ. Serie B. Nro. 3, San Juan, 1986.
- [5] H. E. Retamales, "Matrices Ralas y la Representación de Redes, expuesto en la XXXV, Reunión de la UMA, Salta, Argentina. Notas del INMASJ. Serie B, 1. San Juan, 1985.
- [6] H.E. Retamales, "Aproximación Numérica de Magnitudes Múltiplemente Paramétricas", Informe 1, presentado a SECYT, San Juan, 1988.
- [7] H.E. Retamales, "Solución numérica de la ecuación de Laplace mediante un computador de muy pequeña capacidad. Aplicación a la distribución de presiones en la lenteja de una válvula mariposa", MECOM 1988. Córdoba.
- [8] H.E. Retamales y colaboradores, "Aplicación de Técnicas de Interpolación y Filtrado a un Estudio Gravimétrico Areal, Informe 1, Subsidio de la UNSJ. Secr. de Investigaciones.
- [9] H.E. Retamales y A. Sarazúa, "Aplicación de técnicas de interpolación y filtrado a un estudio gravimétrico areal", Informe 2, San Juan. 1991.
- [10] H.E. Retamales, "Solución numérica de sistemas de ecuaciones no lineales mediante una forma finito incremental", LAMA UTN- Mza. Mendoza, 1995.
- [11] H.E. Retamales, "Interpolación n-dimensional mediante una forma finito incremental", LAMA, UTN- Mza. Mendoza, 1995.
- [12] H.E. Retamales, "Solución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias por el método de los incrementos finitos (MIF). Una propiedad de las soluciones", Mendoza, 1996.