

Cálculo del área de una superficie vía un Método no Monótono ¹

O.E. Mandrini, M.C. Maciel y M.G. Mendonça

Resumen. En este trabajo se presenta una forma novedosa de resolver un problema de optimización clásico que se adapta a cursos avanzados de Análisis Numérico y Optimización. En particular se sugiere como proyecto sobre métodos iterativos para problemas de optimización irrestrictos.

El problema consiste en hallar la superficie de área mínima en un recinto rectangular dados los valores en la frontera del mismo. El método propuesto para resolverlo es el de gradiente espectral al cual se le ha incorporado una estrategia de globalización.

Para resolver el problema, se desarrolló un algoritmo codificado en MATLAB. Se presentan resultados numéricos que muestran el comportamiento del método en este caso.

1. Introducción

En los cursos de Cálculo en varias variables se plantea el problema de hallar la superficie de área mínima. Esto es, hallar $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ tal que minimice la funcional, $\mathcal{A} : \mathcal{C}^2[\Omega] \rightarrow \mathbb{R}$ definida como sigue:

$$\mathcal{A}(f) = \iint_{\Omega} \sqrt{1 + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)^2} dx dy, \quad (1)$$

donde $\Omega = [a, b] \times [a, b]$ y $\mathcal{C}^2[\Omega] = \{ f : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \text{ con derivadas segundas continuas} \}$.

Para fijar ideas, supongamos que $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$, y que de f sólo se conocen valores en puntos igualmente espaciados de la frontera de Ω .

El problema está definido en un espacio infinitodimensional. En este trabajo se considera una aproximación, por medio de una discretización de Ω , estimando la solución del problema en un espacio de dimensión finita.

Un punto importante en el planteo del problema es enumerar los puntos de la malla determinada por la discretización. Por ejemplo, si se discretiza cada lado

¹Este trabajo ha sido parcialmente subsidiado por la Universidad Nacional del Sur, proyecto N° 24/057, y por la Universidad Nacional del Comahue, proyecto código E060.

en cuatro subintervalos ($m = 4$), una posible forma de enumerar los nodos se muestra en la Figura 1.

El problema presenta algunas dificultades para su resolución:

1. La solución del problema, los valores de f en el interior de Ω , no aparecen en forma explícita en la función objetivo (1).
2. El cálculo del área involucra derivadas parciales de una función que se desconoce.
3. En muchas situaciones, después de estimar las derivadas parciales, el cálculo directo de la integral no es una tarea sencilla, y dependiendo de la naturaleza del problema, muchas veces imposible de resolver en forma analítica. Por lo tanto se debe recurrir a otras herramientas como los métodos iterativos, y resolver el problema en cuestión en forma aproximada.

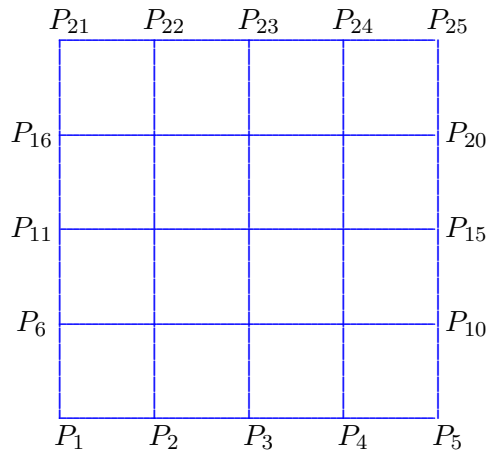


Figura 1: Ejemplo de una posible discretización

En nuestro problema resultará una funcional $A(z)$ definida para todo z perteneciente a un espacio de dimensión finita. La construcción de A es detallada en el sección 4.

El problema de optimización irrestricto resulta:

$$\min A(z), \quad z \in \mathbb{R}^n. \quad (2)$$

En la siguiente sección se describen brevemente métodos iterativos para resolver (2), y las dificultades que surgen cuando se trata de resolverlo. En la sección 3 se presenta el método de gradiente espectral introducido por Raydán [5], al cual se le incorpora una estrategia de globalización, la cual aplicada al problema (2) mostró ser la más eficiente. En la sección 4 se muestra la discretización tomada para transformar el problema (1) en (2) y los resultados numéricos para distintos conjuntos de datos. Finalmente, las conclusiones son presentadas en la sección 5.

2. Breve revisión de los métodos Cuasi-Newton

Consideremos el problema de minimizar una función $\varphi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ continuamente diferenciable, esto es

$$\min \varphi(x). \quad (3)$$

Los métodos más utilizados para resolver (3) son los tipo cuasi-Newton, que generan una sucesión de iterados $\{x_k\}$ cuyo término general es

$$x_{k+1} = x_k + s_k.$$

donde s_k resulta de resolver en forma aproximada el sistema lineal $H_k s = -\nabla\varphi(x_k)$.

1. Si $H_k = \nabla^2\varphi(x_k)$ se obtiene el conocido método de Newton.
2. Si $H_k = I$ se tiene el método de máximo descenso o método del gradiente.
3. La matriz H_k puede ser una aproximación de $\nabla^2\varphi(x_k)$ vía diferencias finitas, o bien una actualización secante.

En estos últimos, la matriz H_{k+1} debe ser simétrica, definida positiva y satisfacer la ecuación de la secante

$$H_{k+1}s_k = y_k,$$

donde $y_k = \nabla\varphi(x_{k+1}) - \nabla\varphi(x_k)$. Ejemplos de actualizaciones secantes son las de Davidon-Fletcher-Powell (*DFP*) y Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shano (*BFGS*), entre otras.

Estos métodos comparten la misma propiedad: son de descenso, y además es bien conocido que bajo hipótesis adecuadas son localmente convergentes a una solución del problema, [3, 2]. A pesar de las buenas propiedades teóricas que tienen los métodos mencionados, se presentan dificultades prácticas al momento de aplicarlos al problema (2).

Se observa que al desconocer la función f , si bien es posible, con dificultad, evaluar el vector gradiente, el cálculo de la matriz Hessiana resulta muy costoso debido a la cantidad de evaluaciones de funciones que se requiere. Con respecto

a los métodos secantes, debido a la elección de la matriz inicial, es posible que el algoritmo genere una sucesión de actualizaciones de la Hessiana que son singulares y no se puede concluir sobre el comportamiento de la sucesión $\{x_k\}$. Para sobrellevar estas dificultades se eligió un método que no requiere de la matriz Hessiana ni operaciones matriciales, resultando de bajo costo computacional.

La siguiente sección está dedicada a la descripción de este método.

3. Método no monótono

El método de Gradiente Espectral fue introducido por Raydán [5] en 1991 para minimizar funciones cuadráticas. El algoritmo es una generalización del presentado por Barzilai y Borwein [1]. La principal característica de este método es que no es monótono.

La iteración general del método es la siguiente:

$$x_{k+1} = x_k + s_k$$

con

$$s_k = -\frac{1}{\alpha_k} \nabla \varphi(x_k)$$

donde $\alpha_{k+1} = \frac{s_k^T y_k}{s_k^T s_k}$ se obtiene como solución de la ecuación secante $H_k = \alpha_k I$.

Para resumir, si φ es cuadrática el algoritmo tiene el siguiente aspecto:

Algoritmo GE (Gradiente Espectral)

Dados $x_0 \in \mathbb{R}^n$ y $\alpha_0 \in \mathbb{R}$.

Para $k = 0, 1, \dots$, hasta convergencia

Paso 1: $s_k = -\frac{1}{\alpha_k} \nabla \varphi(x_k)$.

Paso 2: $x_{k+1} = x_k + s_k$.

Paso 3: $y_k = \nabla \varphi(x_{k+1}) - \nabla \varphi(x_k)$.

Paso 4: $\alpha_{k+1} = \frac{s_k^T y_k}{s_k^T s_k}$.

Si φ no es cuadrática, el método necesita incorporar una estrategia de globalización. Raydán [6] modificó el algoritmo introduciendo la estrategia de búsqueda lineal no monótona propuesta por L. Grippo, F. Lampariello y S. Lucidi [4] probando su convergencia global. Esta estrategia consiste en aceptar la longitud del paso siempre que se cumpla la condición

$$\varphi(x_{k+1}) \leq \max_{0 \leq j \leq M} \varphi(x_{k-j}) + \gamma \nabla \varphi(x_k)^T (x_{k+1} - x_k)$$

donde M es un entero no negativo y $0 \leq \gamma \leq 1$. Observemos que cuando $M = 0$ se reduce a la conocida condición de Armijo.

4. El problema y su discretización

Para establecer el problema discretizado se debe determinar una cantidad de subintervalos, m , del intervalo $[0, 1]$ de longitud $h = \frac{1}{m}$. En los $4m$ puntos de la frontera de Ω los valores de φ son conocidos, y los restantes $(m+1)^2 - 4m$ valores en el interior de Ω deben minimizar la funcional de área. Así, el problema de optimización consiste en determinar los valores $z_i = \varphi(x_i)$, con $x_i \in \mathbb{R}^2$ en el interior de Ω , de modo que el área de la superficie resultante sea mínima.

Para construir el problema discretizado se prosigue como sigue:

- Se aproximan los valores de las derivadas parciales en cada punto usando diferencias finitas hacia adelante en los puntos (x_i, y_j) , $i, j = 0, \dots, m-1$, y en los puntos de la malla que tienen la forma $(x_i, 1)$ y $(1, y_i)$, $i = 0, \dots, m$, se usan diferencias finitas hacia atrás. Esto último tiene como finalidad no introducir mayor cantidad de variables al problema pues no se conoce información sobre φ fuera del recinto Ω .
- La integral a minimizar, es aproximada mediante reglas de integración numérica. En este trabajo se usó la regla del trapecio y la de Simpson, a fin de poder comparar los resultados obtenidos con cada uno de los métodos y poder así determinar, según las dimensiones del problema cuál regla conviene más según su costo computacional.

Resumiendo, si se usa la regla trapezoidal, el problema de optimización resultante consiste en minimizar:

$$A(z) = \frac{h^2}{4} [F(0,0) + F(0,1) + F(1,0) + F(1,1)] + \frac{h^2}{2} \sum_{i=1}^{m-1} [F(ih,0) + F(ih,1) + F(0,ih) + F(1,ih)] + h^2 \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=1}^{m-1} F(ih, jh),$$

con

$$F(0,0) = \left[1 + \frac{1}{h^2} (f(h,0) - f(0,0))^2 + \frac{1}{h^2} (f(0,h) - f(0,0))^2 \right]^{1/2},$$

$$F(1,0) = \left[1 + \frac{1}{h^2} (f(1-h,0) - f(1,0))^2 + \frac{1}{h^2} (f(1,h) - f(1,0))^2 \right]^{1/2},$$

$$\begin{aligned}
F(0, 1) &= \left[1 + \frac{1}{h^2}(f(h, 1) - f(0, 1))^2 + \frac{1}{h^2}(f(0, 1-h) - f(0, 1))^2 \right]^{1/2}, \\
F(1, 1) &= \left[1 + \frac{1}{h^2}(f(1-h, 1) - f(1, 1))^2 + \frac{1}{h^2}(f(1, 1-h) - f(1, 1))^2 \right]^{1/2}, \\
F(hi, 0) &= \left[1 + \frac{1}{h^2}(f(h(i+1), 0) - f(hi, 0))^2 + \frac{1}{h^2}(z_i - f(hi, 0))^2 \right]^{1/2}, \\
&\qquad\qquad\qquad i = 1, \dots, m-1, \\
F(hi, 1) &= \left[1 + \frac{1}{h^2}(f(h(i+1), 1) - f(hi, 1))^2 + \frac{1}{h^2}(z_{(m-2)(m-1)+i} - f(hi, 1))^2 \right]^{1/2}, \\
&\qquad\qquad\qquad i = 1, \dots, m-1, \\
F(0, hi) &= \left[1 + \frac{1}{h^2}(z_{(m-1)(i-1)+1} - f(0, hi))^2 + \frac{1}{h^2}(f(0, h(i+1)) - f(0, hi))^2 \right]^{1/2}, \\
&\qquad\qquad\qquad i = 1, \dots, m-1, \\
F(1, hi) &= \left[1 + \frac{1}{h^2}(z_{(m-1)i} - f(1, hi))^2 + \frac{1}{h^2}(f(1, h(i+1)) - f(1, hi))^2 \right]^{1/2}, \\
&\qquad\qquad\qquad i = 1, \dots, m-1, \\
F(hi, hj) &= \left[1 + \frac{1}{h^2}(z_{(m-1)(i-1)+j+1} - z_{(m-1)(i-1)+j})^2 + \right. \\
&\qquad\qquad\qquad \left. \frac{1}{h^2}(z_{(m-1)i+j} - z_{(m-1)(i-1)+j})^2 \right]^{1/2}, \quad i, j = 1, \dots, m-2, \\
F(h(m-1), hi) &= \left[1 + \frac{1}{h^2}(f(1, hi) - z_{(m-1)i})^2 + \frac{1}{h^2}(z_{(i+1)(m-1)} - z_{(m-1)i})^2 \right]^{1/2}, \\
&\qquad\qquad\qquad i = 1, \dots, m-2, \\
F(hi, h(m-1)) &= \left[1 + \frac{1}{h^2}(z_{(m-1)(m-2)+j+1} - z_{(m-1)(m-2)+j})^2 + \right. \\
&\qquad\qquad\qquad \left. \frac{1}{h^2}(f(hi, 1) - z_{(m-1)(m-2)+j})^2 \right]^{1/2}, \quad i = 1, \dots, m-2, \\
F(h(m-1), h(m-1)) &= \left[1 + \frac{1}{h^2}(f(1, h(m-1)) - z_{(m-1)^2})^2 + \right. \\
&\qquad\qquad\qquad \left. \frac{1}{h^2}(f(h(m-1), 1) - z_{(m-1)^2})^2 \right]^{1/2},
\end{aligned}$$

donde $z \in \mathbb{R}^{(m+1)^2-4m}$.

Se obtiene un problema análogo pero con expresiones más complejas si se usa la regla de Simpson.

5. Resultados numéricos

Se han resuelto tres problemas usando diferentes valores de f en la frontera del cuadrado $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$.

1. $f(x, y) = x + y + 1$.
2. $f(x, y) = x^2 + xy + y^2$.
3. $f(x, y) = e^{-(x^2+y^2)}$.

Para cada uno de ellos se ha fijado $m = 25, 30, 40$, con una tolerancia de 10^{-6} .

En las siguientes tablas y gráficos se muestran algunos resultados obtenidos. Para $m = 30, 40$ los mismos no se presentan para aproximaciones de la integral vía la regla de Simpson, ya que se excedió el número máximo de iteraciones, fijado en 300000. La cantidad de variables del problema de optimización es var , el valor del área para cada solución es $area$, kit es la cantidad de iteraciones realizadas por el algoritmo, $normg$ indica $\|\nabla A(z^*)\|_2$ y finalmente $CPUtime$ indica el tiempo de máquina en segundos demandado por el algoritmo.

$f(x, y) = x + y + 1$						
Regla de integración	m	var	$area$	kit	$normg$	$CPUtime$
Trapezoidal	25	576	1.9184	850	$3,2153 \times 10^{-7}$	12.64
	30	780	1.9294	1139	$9,8103 \times 10^{-7}$	25.141
	40	1440	1.9435	1403	$9,8529 \times 10^{-7}$	63.704
Simpson	25	576	1.4836	2720	$8,9685 \times 10^{-7}$	52.125

$f(x, y) = x^2 + xy + y^2$						
Regla de integración	m	var	$area$	kit	$normg$	$CPUtime$
Trapezoidal	25	576	2.5686	1078	$7,7751 \times 10^{-7}$	15.203
	30	780	2.5779	1142	$8,1784 \times 10^{-7}$	25.406
	40	1440	2.7895	1729	$8,7665 \times 10^{-7}$	79.141
Simpson	25	576	1.9046	247576	$9,2015 \times 10^{-7}$	5672.1

$f(x, y) = e^{-(x^2+y^2)}$						
Regla de integración	m	var	$area$	kit	$normg$	$CPUtime$
Trapezoidal	25	576	1.3757	1134	$3,9331 \times 10^{-7}$	16.297
	30	780	1.3847	1489	$3,9406 \times 10^{-7}$	32.734
	40	1440	1.3964	1937	$9,3577 \times 10^{-7}$	86.188
Simpson	25	576	1.154	2362	$9,4325 \times 10^{-7}$	36.407
	30	780	1.1824	10594	$9,6806 \times 10^{-7}$	237.2810

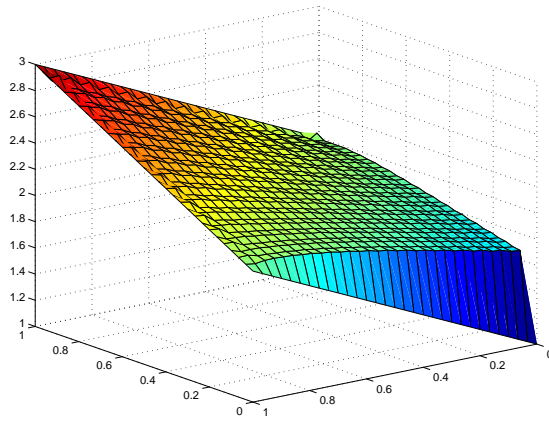


Figura 2: $f(x, y) = x + y + 1$, Regla del Simpson, $m = 30$.

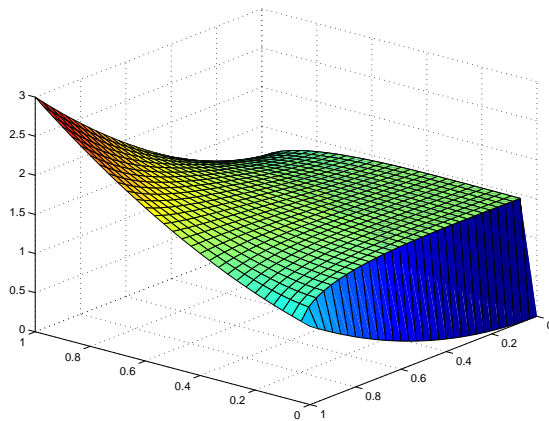


Figura 3: $f(x, y) = x^2 + xy + y^2$, Regla del trapecio, $m = 30$.

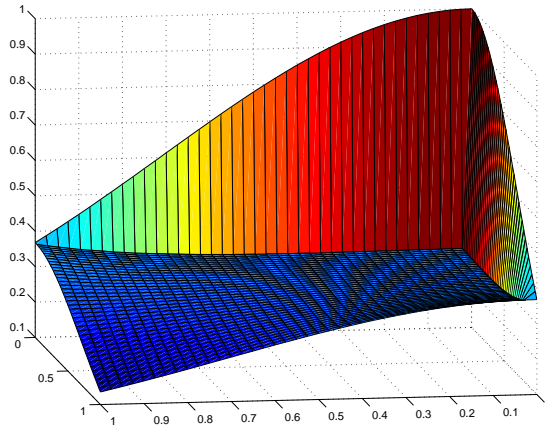


Figura 4: $f(x, y) = e^{-(x^2+y^2)}$, Regla del trapecio, $m = 30$.

De las tablas y figuras se puede observar, como es de esperar, que todos los valores de la solución tienden a yacer en un mismo plano horizontal. Es interesante notar que a medida que se refina la malla, el valor del área aumenta. Esto se debe a la ubicación de los puntos en la frontera como puede verse en los gráficos. Aunque es bien conocido que la aproximación de la integral vía la regla de Simpson tiene un error menor que la trapezoidal, en nuestro problema se requiere una gran cantidad de evaluaciones de funciones, lo que hace que el uso de esta regla no resulte eficaz. Como conclusión, las características del problema permiten aconsejar el uso de la regla de los trapecios.

6. Conclusiones

Con un simple problema de Cálculo se ha validado el algoritmo de Gradiente Espectral. Un punto interesante es que se puede proponer como proyecto a alumnos de cursos avanzados de Análisis Numérico y Optimización, con el objetivo de hacer un análisis de las propiedades teóricas de métodos bien conocidos y los comportamientos prácticos de los mismos. Un punto que escapa a este trabajo es el análisis del error que se comete al aproximar la solución exacta con esta estimación.

Referencias

- [1] J. BARZILAI and J.M. BORWEIN. Two point step size gradient methods. *IMA Journal on Numerical Analysis*, 8:141–148, 1988.
- [2] D.P. BERTSEKAS. *Nonlinear Programming*. Athenas Scientific, Belmont, MA, 1999. Second Edition.
- [3] J.E. DENNIS and R.B. SCHNABEL. *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Systems*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1983.
- [4] L. GRIPPO, F. LAMPARIELLO, and S. LUCIDI. A nonmonotone line search technique for newton's method. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 23:707–716, 1986.
- [5] M. RAYDAN. *Covergence properties of the Barzilai and Borwein gradient method*. PhD thesis, Dept. of Mathematical Science, Rice University, Houston, Texas, 1991.
- [6] M. RAYDAN. The Barzilai and Borwein gradient method for the large scale unconstrained minimization problem. *SIAM Journal on Optimization*, 7:26–33, 1997.

Departamento de Matemática. Facultad de Economía y Administración. Universidad Nacional del Comahue. Santa Fe 1400. 8300, Neuquén. Argentina.
emiliamandrini@yahoo.com.ar

Departamento de Matemática. Universidad del Sur. Av. Alem 1253. 8000, Bahía Blanca. Argentina.
immaci@criba.edu.ar

Departamento de Matemática. Facultad de Ingeniería. Universidad Nacional de la Patagonia San Juan Bosco. Ciudad Universitaria, KM 4. 9000, Comodoro Rivadavia. Argentina.
mendonca@ing.unp.edu.ar