

Resumen del contenido de la materia  
Optimización No Lineal (CO-5412)



## 1. PREFACIO

La presente guía recopila las clases del curso 'CO5412: Optimización No lineal I' que he dictado como profesora del Departamento de Cómputo Científico y Estadística de la Universidad Simón Bolívar. El objetivo al elaborar esta guía es que el estudiante pueda usarla como referencia y complemento de las clases pero siempre teniendo presente que no debe sustituir a los libros de textos que se presentan en la bibliografía del curso. La organización, presentación y contenido de este curso han ido variando en los distintos trimestres dictados pero esencialmente siguen los tópicos que aquí se presentan.

Este trabajo es producto de la dedicación y esmero del profesor Ildemaro García quien en el pasado fue estudiante del curso. Ildemaro, además de encargarse de la recopilación y transcripción del material, contribuyó a la claridad y exposición de los temas incorporando comentarios y gráficos, aclarando ideas, y completando detalles. Mucho le agradezco su excelente trabajo que me ha permitido concretar un deseo que tenía desde hace años y que espero sea de utilidad para futuros estudiantes y profesores.

Aprovecho también para agradecer a todos los estudiantes que han participado en mis clases. Sus comentarios e ideas me han permitido ir enriqueciendo el contenido y dictado del curso.

Finalmente deseo mencionar que esta es la primera versión del trabajo por lo cual es de esperarse que existan errores. Mucho les agradezco si me notifican de los que encuentren.

María de los Angeles González Lima

email: [mgl@cesma.usb.ve](mailto:mgl@cesma.usb.ve)

Enero 2009

## 2. INTRODUCCION

La búsqueda de la mejor solución a cada problema es una situación que se presenta continuamente. Un ejemplo que se repite constantemente en múltiples áreas de investigación es el problema de poseer una serie de datos para los que se requiere hallar una curva relativamente sencilla que se acerque lo más posible a los datos permitiendo así aproximar con el mínimo margen de error posible la información que no se posee.

Este documento presenta un resumen del material utilizado para las clases de la materia electiva **CO5412 - Optimización No Lineal I** donde se estudian métodos para resolver problemas como el antes mencionado y que obedecen a la clasificación general de minimización de funciones no lineales sin restricciones.

El material está dividido en ocho secciones comenzando con esta introducción, la segunda especifica el problema a resolver, la tercera sección se ocupa de la caracterización de las posibles soluciones, la cuarta hace una descripción general de los métodos de solución a ser estudiados, la quinta muestra varios métodos para el caso unidimensional y sus propiedades de convergencia, la sexta comprende la primera parte de las técnicas de globalización, la séptima abarca métodos de solución para el caso multidimensional y la octava y última sección cuenta lo referente a las técnicas de globalización.

También se incluyen grupos de problemas, algunos como ejemplos resueltos para ayudar a entender las ideas expuestas y otros como ejercicios propuestos a fin de que el lector aplique y afiance los conocimientos adquiridos.

## Índice general

1. PREFACIO	III
2. INTRODUCCION	IV
Índice de figuras	VI
Índice de cuadros	VII
3. EL PROBLEMA GENERAL A RESOLVER	1
3.1. Minimizador local y minimizador global	1
4. CONDICIONES DE OPTIMALIDAD	2
4.1. Repaso	2
4.2. Aproximaciones funcionales de primer y segundo orden en $R^n$	3
4.3. Condiciones de Optimalidad	4
4.4. Cómo identificar una matriz Semi-Positiva Definida (SPD)	5
4.5. Funciones Convexas	8
4.6. Ejercicios propuestos - I	10
5. METODOS ITERATIVOS	12
5.1. Idea general	12
5.2. Rapidez de convergencia	12
6. METODOS CUANDO $f : R \rightarrow R$ (caso unidimensional)	13
6.1. Método de la sección Aurea	13
6.2. Método de bisección	13
6.2.1. Convergencia del método de bisección	14
6.3. Método de Newton	14
6.3.1. Convergencia del método de Newton	15
6.4. Método de la secante	15
6.4.1. Convergencia del método de la secante	15
6.5. Método de diferencias finitas	17
6.5.1. Convergencia del método de diferencias finitas	17
6.6. Uso de estos métodos en la búsqueda de mínimos de $g : R \rightarrow R$	17

7. TECNICAS DE GLOBALIZACION - (parte I)	19
7.1. Direcciones de descenso	19
7.2. Búsqueda lineal	19
7.3. Condiciones de Armijo y Goldstein	19
7.4. Algoritmo general para realizar una búsqueda lineal inexacta	24
7.5. Ejercicios propuestos - II	25
8. METODOS CUANDO $f : R^n \rightarrow R$ (caso multidimensional - parte I)	26
8.1. Método de mayor descenso (Steepest descent)	26
8.1.1. Convergencia del método de mayor descenso	28
8.2. Método de Newton	29
8.2.1. Convergencia del método de Newton	30
8.2.2. Propiedades del método de Newton	32
8.2.3. ¿Cómo utilizar el método para resolver $\min_{x \in R^n} f(x) : f : R^n \rightarrow R?$	33
8.3. Método de Newton modificado	33
8.3.1. Globalización del método de Newton	34
8.4. Ejercicios propuestos - III	36
8.5. Método de diferencias finitas	37
8.5.1. Convergencia del método de diferencias finitas	37
8.6. Métodos casi-Newton	38
8.6.1. Actualización BFGS para la matriz $U_k$	38
8.6.2. Propiedades de la actualización BFGS	39
8.6.3. Actualización DFP para la matriz $U_k$	41
8.6.4. Propiedades de la actualización DFP	41
8.6.5. Algoritmo de los métodos casi-Newton estudiados	41
8.6.6. Convergencia de los métodos casi-Newton estudiados	42
9. TECNICAS DE GLOBALIZACION - (parte II)	44
9.1. técnica de región de confianza	44
9.1.1. Paso Dogleg y paso Double Dogleg	45
10. METODOS CUANDO $f : R^n \rightarrow R$ (caso multidimensional - parte II)	49
10.1. Método de la región de confianza	49
10.1.1. Algoritmo de la región de confianza	49
10.1.2. Convergencia del método de la región de confianza	49
10.2. Método del gradiente conjugado	50
10.2.1. Direcciones conjugadas y sus propiedades	50

10.2.2.	Método del gradiente conjugado para funciones cuadráticas	52
10.2.3.	Propiedades del método de gradiente conjugado para funciones cuadráticas	53
10.2.4.	Convergencia del método de gradiente conjugado para funciones cuadráticas	54
10.2.5.	Precondicionamiento	55
10.3.	Ejercicios propuestos - IV	56
10.4.	Método del gradiente conjugado para funciones no lineales en general	57
10.4.1.	Convergencia global del método de gradiente conjugado	57
10.5.	Método del gradiente espectral	58
10.5.1.	Propiedades del método de gradiente espectral	59
10.5.2.	Convergencia del método de gradiente espectral	59
10.5.3.	Globalización del método de gradiente espectral	59
10.5.4.	Convergencia del método de gradiente espectral globalizado	60
	Bibliografía	61

## Índice de figuras

1.	Método de Newton	14
2.	Condición de Armijo	20
3.	Pasos Dogleg y Double Dogleg	46

## Índice de cuadros

1.	Ventajas y desventajas de los métodos estudiados para el caso unidimensional	18
2.	Ejemplo de búsqueda lineal inexacta	21
3.	Valor de $\eta$ para los pasos Dogleg y Double Dogleg	46

### 3. EL PROBLEMA GENERAL A RESOLVER

Se desea resolver el problema general de minimización sin restricciones de una función no lineal  $f$  continuamente diferenciable dos veces; es decir:

$$\min_{x \in R^n} f(x); \quad f : R^n \rightarrow R, \quad f \in C^2 \quad (3.1)$$

En las secciones que siguen consideraremos dos tipos de soluciones para el problema 3.1; los minimizadores locales y el minimizador global.

#### 3.1. Minimizador local y minimizador global.

DEFINICIÓN 3.1. *Se dice que un punto  $x^* \in R^n$  es un **minimizador local** de  $f(x)$  cuando*

$$\exists \epsilon > 0 : f(x^*) \leq f(x) \quad \forall x \in B_{x^*}(\epsilon) = \{x : \|x - x^*\| \leq \epsilon\}.$$

DEFINICIÓN 3.2. *se dice que un punto  $x^* \in R^n$  es el **minimizador global** de  $f(x)$  cuando*

$$f(x^*) \leq f(x) \quad \forall x^* \in R^n$$

*evidentemente, todo mínimo global es también un mínimo local.*

En forma análoga se pueden definir los maximizadores locales y globales que aplicarían al problema de Maximizar  $f$ . Sin embargo, dado que “Maximizar  $f$ ” es equivalente a “Minimizar  $-f$ ” al trabajar sobre el problema de Minimización estamos abarcando la solución de ambos.

## 4. CONDICIONES DE OPTIMALIDAD

A fin de resolver el problema 3.1 es necesario caracterizar sus posibles soluciones, pero antes revisaremos algunos conceptos:

### 4.1. Repaso.

**Continuamente diferenciable:** se dice que la función  $f$  es continuamente diferenciable  $n$  veces y se denota como  $f \in C^n$ , cuando existe  $\nabla^n f(x), \forall x \in R^n$

**Desarrollo de Taylor:** sea  $f : R \rightarrow R, f \in C^n$ . Entonces el desarrollo de Taylor de la función  $f$  alrededor del punto  $a$ , viene dado por:

$$f(x) = f(a) + f'(a) \cdot (x - a) + \frac{f''(a)}{2!} \cdot (x - a)^2 + \dots + \frac{f^{(n)}(a)}{n!} \cdot (x - a)^n + \frac{f^{(n+1)}(c)}{(n+1)!} \cdot (x - a)^{n+1}$$

con  $c \in (a, x)$

**Derivada direccional:** la derivada direccional de la función  $f : R^n \rightarrow R$  en la dirección  $h \in R^n$  (con  $\|h\| = 1$ ) se define como:

$$\frac{\partial f(x)}{\partial h} = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(x + h \cdot t) - f(x)}{t}$$

**Gradiente:** el gradiente o derivada de primer orden en  $n$  dimensiones de la función  $f : R^n \rightarrow R, x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$  viene dado por:

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f(x)}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f(x)}{\partial x_2} \\ \dots \\ \frac{\partial f(x)}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

**Hessiano:** el Hessiano o derivada de segundo orden en  $n$  dimensiones de la función  $f : R^n \rightarrow R, x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$  viene dado por la matriz  $\nabla^2 f(x) \in R^{n \times n}$  tal que

$$[\nabla^2 f(x)]_{ij} = \left[ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_i \partial x_j} \right] \quad \forall i, j = 1, \dots, n$$

**Regla de la cadena:** la derivada de una función  $z = f(x(t), y(t))$  con respecto a  $t$ , viene dada por la regla de la cadena como se especifica a continuación:

$$\frac{dz}{dt} = \frac{dz}{dx} \cdot \frac{dx}{dt} + \frac{dz}{dy} \cdot \frac{dy}{dt}$$

## 4.2. Aproximaciones funcionales de primer y segundo orden en $R^n$ .

PROPOSICIÓN 4.1. Cuando la derivada direccional en la dirección  $h$ , ( $\|h\| = 1$ ) está definida, es decir, existe el límite cuando  $t \rightarrow 0$  en la definición de  $\frac{\partial f(x)}{\partial h}$ , entonces se cumple:

$$\frac{\partial f(x)}{\partial h} = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(x + h.t) - f(x)}{t} = \nabla f(x)^t h$$

PRUEBA 4.1. Sea  $c(t) = x + th$ , de manera que  $c(0) = x$ . Sustituyendo estas expresiones en la definición de derivada direccional nos queda:

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(c(t)) - f(c(0))}{t} &= \frac{df(c(t))}{dt} \Big|_{t=0} = \frac{\partial f(c(t))}{\partial c(t)_1} \frac{dc(t)}{dt} \Big|_{t=0} + \dots + \frac{\partial f(c(t))}{\partial c(t)_n} \frac{dc(t)}{dt} \Big|_{t=0} = \\ &= \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(c(t))}{\partial x_i} \frac{dc(t)}{dt} \Big|_{t=0} = \nabla f(c(t))^t \frac{dc(t)}{dt} \Big|_{t=0} = \nabla f(x)^t h \quad \square \end{aligned}$$

Es decir que dado  $\epsilon > 0$ ,  $\exists \delta > 0$  :  $\left| \frac{f(x+th) - f(x)}{t} - \nabla f(x)^t h \right| < \epsilon$ ,  $\forall |t| < \delta$ .

PROPOSICIÓN 4.2. Dados  $f : R^n \rightarrow n$ ,  $f \in C^2$ ,  $p \in R^n$  se cumple que:

1.  $f(x + p) = f(x) + \nabla f(x + tp)^t p$ , para algún  $t \in (0, 1)$
2.  $f(x + p) = f(x) + \nabla f(x)^t p + \frac{1}{2} p^t \nabla^2 f(x + tp) p$ , para algún  $t \in (0, 1)$

PRUEBA 4.2. Sean  $g(t) = x + tp$ ,  $h : R \rightarrow R$ ,  $h = f(g(t))$ . Ahora aplicamos la fórmula de Taylor a la función  $h$  y obtenemos:

$$h(1) = h(0) + h'(c), \quad c \in (0, 1)$$

donde  $h(1) = f(g(1)) = f(x + p)$ ,  $h(0) = f(g(0)) = f(x)$ ,

$$h'(c) = \frac{d(f \circ g)}{dt} \Big|_{t=0} = \nabla f(g(t)) \circ g'(t) \Big|_{t=c} = \nabla f(g(c))^t p =$$

$$= \nabla f(x + cp)^t p, \quad \text{con } c \in (0, 1) \quad \square$$

De manera que queda probada la primera afirmación de la proposición. Para la segunda afirmación tenemos que:

$$h'(1) - h'(0) = \int_0^1 h''(t) dt. \quad \text{Ahora calculemos } h''(t), \quad h'(1) \text{ y } h'(0).$$

$$h''(t) = \frac{d(\nabla f(g(t)).g'(t))}{dt} = \sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial f(g(t))}{\partial x_i} \cdot g'_i(t) \right) = p^t \nabla^2 f(g(t)) p$$

$$h'(1) = \frac{dh(t)}{dt} \Big|_{t=1} = \nabla f(g(t))^t \cdot g'(t) \Big|_{t=1} = \nabla f(x+p)^t p$$

$$h'(0) = \nabla f(x)^t p$$

*Sustituyendo estas expresiones en la ecuación integral nos queda:*

$$\begin{aligned} \nabla f(x+p)^t p &= \nabla f(x)^t p + \int_0^1 p^t \nabla^2 f(x+tp) p dt \Rightarrow \\ \Rightarrow (\nabla f(x+p)^t - \nabla f(x)^t - \int_0^1 \nabla^2 f(x+tp) p dt)^t p &= 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow \nabla f(x+p)^t &= \nabla f(x)^t - \int_0^1 \nabla^2 f(x+tp) p dt \end{aligned} \quad (4.1)$$

**Ejercicio:** complete la demostración de la segunda afirmación basándose en la ecuación 4.1 y las ideas utilizadas para demostrar la primera afirmación.

### 4.3. Condiciones de Optimalidad.

PROPOSICIÓN 4.3. **Condición necesaria de primer orden:** Si  $x^* \in R^n$  es un minimizador local del problema 3.1, entonces  $\nabla f(x^*) = 0$ .

PRUEBA 4.3. Asumamos que  $\nabla f(x^*) \neq 0$ , entonces:

$$\exists p = -\nabla f(x^*) : p^t \cdot \nabla f(x^*) = -\|\nabla f(x^*)\|^2 < 0. \quad \text{Además como } \nabla f \text{ es continua,}$$

$$\exists T > 0 : p^t \nabla f(x^* + tp) < 0, \quad \forall t \in (0, T]$$

$$\text{Pero } f(x^* + \hat{t}p) = f(x^*) + \hat{t} \nabla f(x^* + tp)^t p, \quad \forall t \in (0, \hat{t})$$

$$\text{luego, } f(x^* + \hat{t}p) - f(x^*) < 0, \quad \forall \hat{t} \in (0, T]$$

y obtenemos una contradicción pues  $x^*$  es un minimizador local. De manera que la hipótesis  $\nabla f(x^*) \neq 0$  es falsa.  $\square$

PROPOSICIÓN 4.4. **Condiciones necesarias de segundo orden:** Si  $x^* \in R^n$  es un minimizador local del problema 3.1, entonces

$$\nabla f(x^*) = 0 \text{ y } \omega^t \nabla^2 f(x^*) \omega \geq 0, \quad \forall \omega \in R^n$$

PRUEBA 4.4. Asumamos que  $\exists p \in R^n : p^t \nabla^2 f(x^*) p < 0$  entonces por continuidad se cumple que  $p^t \nabla^2 f(x^* + tp) p < 0, \quad \forall t \in (0, T]$ .

Pero  $f(x^* + tp) = f(x^*) + \hat{t} p^t \nabla f(x^*) + \frac{1}{2} \hat{t}^2 p^t \nabla^2 f(x^* + tp) p, \quad \forall t \in (0, \hat{t}), \quad \forall \hat{t} \in (0, T]$   
y  $\nabla f(x^*) = 0$

de manera que la expresión quedará como:

$$f(x^* + \hat{t}p) - f(x^*) = \frac{1}{2} \hat{t}^2 p^t \nabla^2 f(x^* + tp) p < 0$$

lo que lleva a una contradicción que niega la hipótesis que asumimos antes, completando así la prueba.  $\square$

PROPOSICIÓN 4.5. **Condición de suficiencia:** Sea  $x^* \in R^n : \nabla f(x^*) = 0$  y  $\omega^t \nabla^2 f(x^*) \omega > 0 \quad \forall \omega \in R^n$ , entonces  $x^*$  es un minimizador local del problema 3.1.

PRUEBA 4.5. Como  $\nabla^2 f(x)$  es continua, entonces:

$$\exists r > 0 : \omega^t \nabla^2 f(z) \omega > 0, \quad \forall \omega \in R^n, \quad \forall z \in B_{x^*}(r);$$

ahora tomemos  $p \in R^n : z = (x^* + p) \in B_{x^*}(r)$  y al utilizar la aproximación funcional de segundo orden nos queda

$$f(x^* + p) = f(x^*) + \nabla f(x^*)^t p + \frac{1}{2} p^t \nabla^2 f(z) p, \quad t \in (0, 1) \Rightarrow f(x^* + p) - f(x^*) > 0$$

luego  $x^*$  es un minimizador local.  $\square$

Las condiciones necesarias y suficientes de segundo orden están asociadas a ciertas propiedades de la matriz hessiana. A continuación describimos estas propiedades.

#### 4.4. Cómo identificar una matriz Semi-Positiva Definida (SPD).

DEFINICIÓN 4.1. Una matriz simétrica  $A \in R^{n \times n}$  es *Semi-Positiva Definida (SPD)* cuando  $\omega^t A \omega \geq 0 \quad \forall \omega \in R^n$ . Cuando la desigualdad se cumple en forma estricta, es decir que  $\omega^t A \omega > 0 \quad \forall \omega \in R^n$  entonces se dice que la matriz  $A$  es *Positiva Definida PD*.

Si bien la definición permite identificar matrices SPD, estas matrices poseen también algunas características particulares que en algunos casos facilitan la tarea. Estas son:

Sea la matriz  $A$  de dimensiones  $(n \times n)$ , una matriz simétrica, es decir,  $A^t = A$ , entonces:

- Existe la matriz  $C$  ortogonal (es decir,  $C^t C = I$ ) tal que  $C^t A C = D$ , donde  $D$  es una matriz diagonal que contiene los autovalores de  $A$ .
- Los autovalores de  $A$  son reales.

Ahora sea  $A$  además de simétrica una matriz SDP, es decir,  $\omega^t A \omega \geq 0, \quad \forall \omega \in R^n$ , entonces:

1. Los elementos de la matriz diagonal  $D$  son todos no negativos
2. Los determinantes de todas las submatrices de  $A$  son no negativos

De manera que si se tiene una matriz simétrica como el Hessiano de una función de  $R^n \rightarrow R$ , se sabrá que es SPD si se cumple cualquiera de las condiciones 1 ó 2. En el caso en que cualquiera de las dos condiciones se cumpliera como desigualdad estricta, entonces podemos asegurar que la matriz  $A$  es Positiva Definida (PD).

De igual manera, si en las afirmaciones anteriores hablamos de que los elementos de la matriz diagonal  $D$  y los determinantes de las submatrices de  $A$  son “no positivos” podremos asegurar que la matriz  $A$  es Semi-Negativa Definida (SND) y si son “negativos”, que la matriz  $A$  es Negativa Definida (ND).

EJEMPLO 4.1. Hallar el minimizador  $x^*$  de la función  $f(x_1, x_2) = x_1^2 - x_1 x_2 + x_2^2 - 3x_2$ .

SOLUCIÓN 4.1. Buscamos primero la condición necesaria de primer orden al determinar los puntos estacionarios, es decir, los puntos donde el gradiente es cero,

$$\nabla f(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 2x_1 - x_2 \\ -x_1 + 2x_2 - 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

ahora busquemos la condición necesaria de segundo orden, mediante la determinación del Hessiano de  $f$

$$\nabla^2 f(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} \Rightarrow \text{Det}(\nabla^2 f(x_1, x_2)) = 3 > 0$$

El resultado anterior nos indica que  $\nabla^2 f(x_1, x_2)$  es Definida Positiva, por lo tanto, podemos invocar la condición de suficiencia y asegurar que el punto hallado  $x^* = (1, 2)^t$  es un minimizador local.

EJEMPLO 4.2. Hallar el minimizador  $x^*$  para la función  $f(x_1, x_2) = x_1^3 - x_1^2 x_2 + 2x_2^2$ .

SOLUCIÓN 4.2. usando el mismo procedimiento que en el ejemplo anterior se puede determinar que

$$\nabla f(0, 0) = \nabla f(6, 9) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\nabla^2 f(0, 0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}, \quad \nabla^2 f(6, 9) = \begin{pmatrix} 18 & -12 \\ -12 & 4 \end{pmatrix}$$

$$\text{Det}(\nabla^2 f(0, 0)) = 0, \quad \text{Det}(\nabla^2 f(6, 9)) = -72 < 0$$

De manera que podemos asegurar que ninguno de los puntos es un minimizador de  $f$ . Dejamos como ejercicio para el lector el determinar si con los datos obtenidos arriba es o no posible definir qué tipo de punto estacionario es  $(6, 9)^t$ .

Observe que las condiciones de optimalidad desarrolladas sólo aplican para mínimos o máximos locales, lo que deja abierta la pregunta: ¿es posible definir condiciones sobre un punto  $x^*$  y una función  $f$  que determinen que ese punto es mínimo global de  $f$ ?

PROPOSICIÓN 4.6. Si  $x^*$  es un minimizador global de  $f$ , entonces  $\nabla f(x^*) = 0$  y  $\nabla^2 f(x)$  es SPD  $\forall x \in R^n$ . Si  $\nabla f(x^*) = 0$  y  $\nabla^2 f(x)$  es PD  $\forall x \in R^n$ , entonces  $x^*$  es un minimizador global de  $f$ .

PRUEBA 4.6. Se obtiene directamente de las proposiciones 4.4 y 4.5.  $\square$

#### 4.5. Funciones Convexas.

DEFINICIÓN 4.2. **Funciones convexas:**  $f : R^n \rightarrow R$  es convexa si:

$$f(x_1\lambda + (1 - \lambda)x_2) \leq \lambda f(x_1) + (1 - \lambda)f(x_2), \quad \forall x_1, x_2 \in R^n, \quad \forall \lambda \in [0, 1] \quad (4.2)$$

PROPOSICIÓN 4.7. Sea  $f \in C^1$ , entonces:

$f$  es convexa  $\Leftrightarrow f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^t(y - x)$ ,  $\forall x, y \in R^n$ .

PRUEBA 4.7. Probemos primero la implicación hacia la derecha, de manera que aceptamos que  $f$  es convexa, por lo que se cumple la ecuación 4.2 y podemos escribir:

$$f(\lambda(y - x) + x) \leq \lambda(f(y) - f(x)) + f(x) \Rightarrow \frac{f(x + \lambda(y - x)) - f(x)}{\lambda} \leq f(y) - f(x), \forall \lambda \in [0, 1]$$

y tomando el límite cuando  $\lambda \downarrow 0$  se completa la prueba

$$\lim_{\lambda \downarrow 0} \frac{f(x + \lambda(y - x)) - f(x)}{\lambda} \leq f(y) - f(x) \Rightarrow \nabla f(x)^t(y - x) \leq f(y) - f(x)$$

Probemos ahora la implicación hacia la izquierda. Tomando como cierta la ecuación a la derecha de la doble implicación, podemos escribir que para  $x_1, x_2 \in R^n$ , se cumple:

$$\begin{aligned} \lambda f(x_1) &\geq \lambda(f(x) + \nabla f(x)^t(x_1 - x)) \\ (1 - \lambda)f(x_2) &\geq (1 - \lambda)(f(x) + \nabla f(x)^t(x_2 - x)) \end{aligned}$$

y al sumar ambas ecuaciones nos queda:

$$\lambda f(x_1) + (1 - \lambda)f(x_2) \geq f(x) + \nabla f(x)^t(\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2 - x) \quad (4.3)$$

Finalmente podemos hacer  $x = \lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2$  sin perder generalidad, y al sustituir esta expresión en la ecuación 4.3, se completa la prueba de la implicación hacia la izquierda.

□

PROPOSICIÓN 4.8. Sea  $f \in C^2$ , entonces

$f$  es convexa  $\Leftrightarrow \nabla^2 f(x)$  es Semi-Positiva Definida (SPD).

PRUEBA 4.8. para hacer la prueba hacia la derecha nos valemos del desarrollo funcional de segundo orden

$$f(y) = f(x) + \nabla f(x)^t(y - x) + \frac{1}{2}(y - x)^t \nabla^2 f(x + t(y - x))(y - x), \quad t \in (0, 1) \quad (4.4)$$

pero dado que  $f$  es convexa, se cumple que  $\forall x, y \in R^n$

$$f(y) - f(x) - \nabla f(x)^t(y - x) \geq 0 \quad \text{y por lo tanto} \quad (4.5)$$

$$(y - x)^t \nabla^2 f(x + t(y - x))(y - x) \geq 0 \quad \forall (y - x) \in R^n \quad (4.6)$$

lo que completa la prueba hacia la derecha. Para la prueba hacia la izquierda basta con observar que la expresión 4.6 será cierta por hipótesis, de manera que si la sustituimos en la expresión 4.4 directamente obtenemos la expresión 4.5 que nos dice que la función es convexa y se completa la prueba.  $\square$

PROPOSICIÓN 4.9. Sea  $x^* \in R^n : \nabla f(x^*) = 0$  con  $f \in C^1$  convexa; entonces  $x^*$  es un mínimo global de  $f$ .

PRUEBA 4.9. Como  $f$  es convexa se cumple que  $f(x) \geq f(x^*) + \nabla f(x^*)^t(x - x^*)$  pero como  $\nabla f(x^*) = 0$ , queda  $f(x) \geq f(x^*), \forall x \in R^n$  y se completa la prueba.  $\square$

PROPOSICIÓN 4.10. Si  $f : R^n \rightarrow R$  es una función convexa, entonces todo mínimo local es también mínimo global.

PRUEBA 4.10. Asumamos que  $x^*$  es un minimizador local pero no global y tomemos un punto cualquiera en el segmento  $\lambda x^* + (1 - \lambda)\bar{x}$ ,  $\lambda \in [0, 1]$  que une a  $x^*$  con un  $\bar{x} \in R^n : f(\bar{x}) < f(x^*)$ , entonces se debe cumplir que:

$$f(\lambda x^* + (1 - \lambda)\bar{x}) \leq \lambda f(x^*) + (1 - \lambda)f(\bar{x}) < \lambda f(x^*) + (1 - \lambda)f(x^*) = f(x^*)$$

pero podemos ver claramente que si tomamos  $\lambda$  de manera que  $\lambda x^* + (1 - \lambda)\bar{x}$  esté en el entorno donde  $x^*$  es el minimizador local, obtendremos una contradicción para la hipótesis de la que se partió, de manera que  $x^*$  debe ser un minimizador global.  $\square$

EJEMPLO 4.3. En el ejemplo 4.1 determine si el minimizador local hallado  $(1, 2)^t$  es también un minimizador global.

SOLUCIÓN 4.3. Recordamos que  $\text{Det}(\nabla^2 f(x_1, x_2)) > 0 \forall x \in R^2$ , es decir que el Hessiano de la función es Positivo Definido; de manera que aplicando directamente la proposición 4.6 podemos asegurar que  $x^* = (1, 2)^t$  es un minimizador global. También se puede llegar a este resultado aplicando las proposiciones 4.8 que nos permite asegurar que la función es convexa y la proposición 4.10 que nos dice que todo mínimo local de una función convexa es también un mínimo global.

#### 4.6. Ejercicios propuestos - I.

PROBLEMA 4.1. considere el problema  $\min\{x_1^2 - x_1x_2 + 2x_2^2 - 2x_1 + e^{x_1+x_2}\}$

- a:** escriba las condiciones necesarias de optimalidad de primer orden. ¿Es esta condición también suficiente?; ¿por qué?
- b:** ¿es  $x = (0, 0)^t$  una solución?, si no, identifique una dirección  $d$  a lo largo de la cual la función decrece.
- c:** minimize la función a partir de  $(0, 0)^t$  en la dirección  $d$  obtenida en la pregunta anterior.

PROBLEMA 4.2. considere el problema  $\min\{\|Ax - b\|_2^2\}$ ,  $A \in R^{m \times n}$ ,  $b \in R^m$

- a:** de una interpretación geométrica del problema.
- b:** escriba una condición necesaria para optimalidad. ¿Es esta condición también suficiente.
- c:** ¿existe una única solución?, ¿por qué?
- d:** ¿puede expresar la solución en forma de ecuación cerrada?. Especifique cualquier suposición que pueda necesitar.

**e:** resuelva el problema propuesto para:  $A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 2 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ ,  $b = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

PROBLEMA 4.3. para aproximar una función  $g$  en el intervalo  $[0, 1)$  mediante un polinomio  $p$  de grado  $\leq n$ , se minimiza el criterio:  $f(\bar{a}) = \int_0^1 (g(x) - p(x))^2 dx$ , donde  $p(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_0$

Hállense las ecuaciones satisfechas por los coeficientes óptimos  $\bar{a} = (a_1, a_2, \dots, a_n)$

PROBLEMA 4.4. para la función  $f(x, y, z) = 2x^2 + xy + y^2 + yz + z^2 - 6x - 7y - 8z + 9$

- a:** utilice las condiciones necesarias de primer orden para hallar un punto minimizador de la función.
- b:** verifique que el punto hallado es un mínimo relativo comprobando que se cumplen las condiciones suficientes de segundo orden.
- c:** demuestre que el punto es un mínimo global.

PROBLEMA 4.5. Dado  $f(x_1, x_2) = 2x_1 + 6x_2 - 2x_1^2 - 3x_2^2 + 4x_1x_2$  demuestre que  $-f$  es convexa.

PROBLEMA 4.6. ¿Cuáles de las siguientes funciones son convexas, cuáles cóncavas (es decir, que  $-f$  es convexa) y cuáles son ni cóncavas ni convexas?

**a:**  $f(x_1, x_2) = x_1^2 + 2x_1x_2 - 10x_1 + 5x_2$

**b:**  $f(x_1, x_2) = x_1e^{-(x_1+x_2)}$

**c:**  $f(x_1, x_2) = -x_1^2 - 5x_2^2 + 2x_1x_2 + 10x_1 - 10x_2$

**a:**  $f(x_1, x_2, x_3) = 2x_1^2 + x_1x_2 + x_2^2 + 2x_3^2 - 6x_1x_3$

## 5. METODOS ITERATIVOS

**5.1. Idea general.** El esquema general de los métodos iterativos es como sigue: Se parte de un punto inicial  $x_0 \in R^n$  y hallamos  $x_{k+1}$  como  $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$ , donde  $\alpha_k \in R$  es el tamaño o longitud del paso y  $d_k \in R^n$  es la dirección unitaria de búsqueda.

**5.2. Rapidez de convergencia.** Sea la sucesión  $\{x_k\} \subseteq R^n$ ,  $k \geq 1$  tal que  $\lim_{k \uparrow \infty} x_k = \hat{x} \in R^n$ .

DEFINICIÓN 5.1. Se dice que  $\{x_k\}$  converge en forma *q-lineal* a  $\hat{x}$  si:

$$\exists C \in [0, 1) : \|x_{k+1} - \hat{x}\| \leq C \|x_k - \hat{x}\|$$

Se dice que  $\{x_k\}$  converge en forma *q-lineal* a  $\hat{x}$  si:

$$\|x_{k+1} - \hat{x}\| \leq C_k \|x_k - \hat{x}\|, \text{ donde } \{C_k\} \in R \text{ y } \lim_{k \uparrow \infty} C_k = 0$$

Se dice que  $\{x_k\}$  converge a  $\hat{x}$  en forma *q-orden al menos p* si:

$$\|x_{k+1} - \hat{x}\| \leq C \|x_k - \hat{x}\|^p \quad \forall k \geq \hat{k}; \quad C \geq 0; \quad p > 1$$

EJEMPLO 5.1. Dado  $x_k = 1 + 2^{-k}$ , se sabe que  $\{x_k\}_{k \uparrow \infty} = 1$ . Determine que tipo de rapidez de convergencia registra esta sucesión.

SOLUCIÓN 5.1.

$$|x_{k+1} - 1| = |1 + 2^{-(k+1)} - 1| = 2^{-(k+1)} \text{ luego } |x_{k+1} - 1| = \frac{1}{2} |x_k - 1|$$

lo que indica una convergencia *q-lineal* con  $C = 1/2$ .

EJEMPLO 5.2. Dado  $x_k = 1 + 2^{-2^k}$ , se sabe que  $\{x_k\}_{k \uparrow \infty} = 1$ . Determine que tipo de rapidez de convergencia registra esta sucesión.

SOLUCIÓN 5.2.

$$|x_{k+1} - 1| = |1 + 2^{-2^{k+1}} - 1| = 2^{-2^{k+1}} = (2^{-2^k})^2 \text{ luego } |x_{k+1} - 1| = |x_k - 1|^2$$

lo que indica una convergencia *q-cuadrática* con  $C = 1$ .

## 6. METODOS CUANDO $f : R \rightarrow R$ (caso unidimensional)

**6.1. Método de la sección Aurea.** Sea  $g : R \rightarrow R$  una función unimodal en el intervalo  $[a, b]$  (es decir que tiene un sólo mínimo en ese intervalo), para la que se desea hallar  $\min_{\gamma \in [a, b]} g(\gamma)$ . Los pasos del método de la sección Aurea aplicado a este problema serían como sigue:

- Se divide el intervalo en tres utilizando los puntos  $a_0, \lambda_0, \mu_0, b_0$  de manera que  $a = a_0 < \lambda_0 < \mu_0 < b_0 = b$ .
- Se evalúa la función en los cuatro puntos de manera que se producirá uno de los dos caso siguientes:
  1. Si  $g(\lambda_0) > g(\mu_0)$ , hago  $a_1 = \lambda_0, b_1 = b_0, \lambda_1 = \mu_0, \mu_1 = a_1 + (1 - \alpha)(b_1 - a_1)$
  2. Si  $g(\lambda_0) \leq g(\mu_0)$ , hago  $b_1 = \mu_0, a_1 = a_0, \mu_1 = \lambda_0, \lambda_1 = a_1 + (1 - \alpha)(b_1 - a_1)$
- Repetir estos pasos hasta que se alcance la condición de parada, siempre escogiendo los nuevos puntos de manera que se mantenga que  $\mu_i = a_i + \alpha(b_i - a_i)$  y que  $\lambda_i = a_i + (1 - \alpha)(b_i - a_i)$ , donde  $\alpha = \frac{\sqrt{5}-1}{2}$ .

El pseudocódigo del método sería como sigue:

- 1:**  $a_0 = a, b_0 = b, \alpha = \frac{\sqrt{5}-1}{2}, \epsilon > 0, k = 0$
- 2:** SI  $|b_k - a_k| < \epsilon$  PARE
- 3:**  $\lambda_k = a_k + (1 - \alpha)(b_k - a_k) \quad \mu_k = a_k + \alpha(b_k - a_k)$
- 4:** Evalúe  $g(\lambda_k), g(\mu_k)$
- 5:** SI  $g(\lambda_k) > g(\mu_k)$ , Haga  $a_{k+1} = \lambda_k, b_{k+1} = b_k, \lambda_{k+1} = \mu_k$   
(SI NO), Haga  $a_{k+1} = a_k, b_{k+1} = \mu_k, \mu_{k+1} = \lambda_k$
- 6:** Haga  $k = k + 1$  y regrese al paso 2

**6.2. Método de bisección.** Sea  $g : R \rightarrow R$  una función tal que los signos de  $g(a)$  y  $g(b)$  son distintos y se desea hallar el punto  $\hat{x}$  donde  $g(\hat{x}) = 0$ . El método de bisección consiste en evaluar la función en el punto medio del intervalo  $g(\frac{a+b}{2})$  conservando solamente el intervalo cuyos extremos verifican que la función tiene signos diferentes. Este procedimiento se repite hasta que el intervalo resultante sea menor que un  $\epsilon$  predeterminado. Ahora bien, sabiendo que la condición necesaria de primer orden nos dice que para que  $x^*$  sea un minimizador de  $g$ , se requiere que  $g'(x^*) = 0$ , bastará con aplicar el método de

bisección a  $g'$  para ubicar los posibles minimizadores de  $g$ .

*6.2.1. Convergencia del método de bisección.* Una de las características del método de bisección es su rapidez de convergencia lineal con  $C = 1/2$  pues  $|b_{k+1} - a_{k+1}| = \frac{1}{2}|b_k - a_k|$  y  $\lim_{k \uparrow \infty} a_k = \lim_{k \uparrow \infty} b_k = x^*$ .

**6.3. Método de Newton.** El método de Newton como el de bisección sirve para hallar puntos donde la función se anula, de manera que si se desea utilizar para hallar puntos estacionarios de la función, deberá utilizarse sobre la derivada de esa función pues como ya sabemos la condición necesaria de primer orden nos indica que la primera derivada de una función debe anularse en los puntos minimizadores.

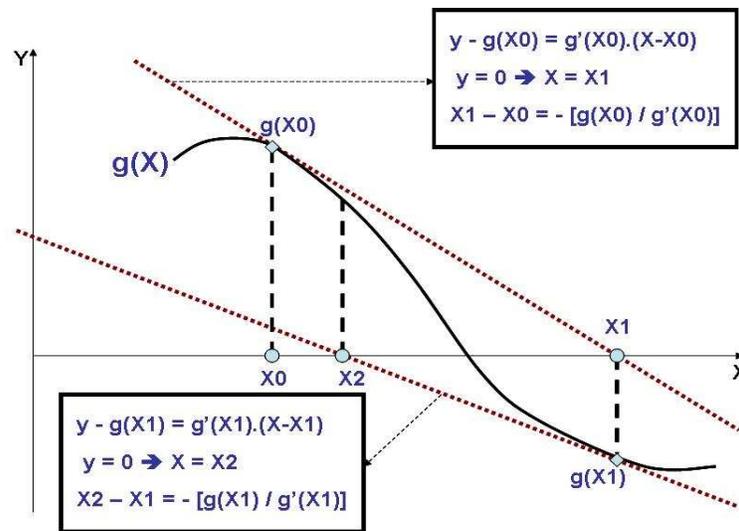


FIGURA 1. Método de Newton

En la figura 1 se muestra como se lleva a cabo la búsqueda del punto donde la función  $g$  se hace cero. Partiendo de un punto  $x_0$  se halla el valor de la función ese punto  $g(x_0)$  y el de su derivada  $g'(x_0)$  y se construye la recta tangente a  $g(x)$  que pasa por el punto  $(x_0, g(x_0))$ . Una vez definida esa recta, se halla su punto de corte con el eje horizontal  $x_1$  y a partir de este se repite el proceso, es decir, se halla el valor funcional  $g(x_1)$  y el valor de la derivada en ese punto  $g'(x_1)$ , la recta tangente a  $g(x)$  que pasa por el punto  $(x_1, g(x_1))$  y el corte de esta recta con el eje  $x_2$ . El proceso se repite hasta que  $g(x_k)$  esté suficientemente cercano a cero o hasta que se cumpla algún otro criterio de parada definido por el usuario.

De las ecuaciones que aparecen en recuadros en la figura 1 es fácil ver que el nuevo punto puede ser definido en base al anterior como:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{g(x_k)}{g'(x_k)}$$

De manera que para aplicar el método en la búsqueda de minimizadores se requiere que la función sea dos veces derivable pues como en el método de bisección, en lugar de buscar las raíces de  $g(x)$  se buscarán las de  $g'(x)$ .

### 6.3.1. Convergencia del método de Newton.

PROPOSICIÓN 6.1. *Sea  $g : R \rightarrow R$  que satisface  $g \in C^2$ ;  $\exists \hat{x} : g(\hat{x}) = 0$ ;  $g'(\hat{x}) \neq 0$ , entonces, para un  $x_0$  suficientemente cercano a  $\hat{x}$  se cumple que la sucesión  $\{x_k\}$  converge a  $\hat{x}$  en forma Q-cuadrática.*

PRUEBA 6.1. *De la expresión que define los términos de sucesión  $\{x_k\}$  tenemos que:*

$$|x_{k+1} - \hat{x}| = \left| x_k - \frac{g(x_k)}{g'(x_k)} - \hat{x} \right| = \left| \frac{(x_k - \hat{x})g'(x_k) - g(x_k)}{g'(x_k)} \right|$$

$$\text{pero, } g(\hat{x}) = g(x_k) + g'(x_k)(\hat{x} - x_k) + \frac{1}{2}g''(\eta_k)(\hat{x} - x_k)^2 = 0 \quad ; \quad \eta \in (x_k, \hat{x})$$

*Luego si sustituimos el valor de  $g(x_k)$  de la segunda ecuación en la primera nos quedará*

$$|x_{k+1} - \hat{x}| \leq \frac{1}{2} \left| \frac{g''(\eta_k)}{g'(x_k)} \right| |x_k - \hat{x}|^2$$

*y si  $x_k$  está en el entorno de  $\hat{x}$ , entonces  $\exists k_1, k_2 > 0 : |g''(\eta_k)| < k_2$  y  $|g'(x_k)| > k_1$ . Finalmente, si  $\frac{k_2}{2k_1}|x_k - \hat{x}| < 1$  esto implicaría que existe convergencia y que la misma es Q-cuadrática.  $\square$*

**6.4. Método de la secante.** Como en el método de Newton, se busca trabajar con una aproximación lineal de la función en un punto, pero en lugar de utilizar la derivada de la función, ésta se aproxima construyendo la secante que pasa por dos puntos suficientemente cercanos; es decir, defino  $x_0, x_0^-$  muy cercanos uno del otro, hallo  $g(x_0), g(x_0^-)$  y calculo los puntos de  $\{x_k\}$  como:

$$x_{k+1} = x_k - g(x_k) \left( \frac{x_k - x_{k-1}}{g(x_k) - g(x_{k-1})} \right) \quad \text{con } x_{0-1} = x_0^-$$

### 6.4.1. Convergencia del método de la secante.

PROPOSICIÓN 6.2. *Sea  $g : R \rightarrow R$  que satisface  $g \in C^2$  ;  $\exists \hat{x} : g(\hat{x}) = 0$  ;  $g'(\hat{x}) \neq 0$ , entonces, para un  $x_0$  suficientemente cercano a  $\hat{x}$  se cumple que la sucesión  $\{x_k\}$  converge a  $\hat{x}$  con orden  $p = \frac{1-\sqrt{5}}{2}$ .*

PRUEBA 6.2. Llamemos  $g[a, b] = \frac{g(b)-g(a)}{b-a}$  ;  $g[a, b, c] = \frac{g[a,b]-g[b,c]}{a-c}$ . Utilizando el teorema de punto medio y la aproximación de segundo orden de la función, obtenemos que

$$g(x_k) - g(x_{k-1}) = g'(\eta_k)(x_k - x_{k-1}) \quad \text{para } \eta_k \in (x_{k-1}, x_k) \quad \text{y} \quad (6.1)$$

$$g[x_{k-1}, x_k, \hat{x}] = \frac{1}{2}g''(\xi_k) \quad \text{para } \xi_k \in \text{segmento que une a } x_{k-1}, x_k, \hat{x} \quad (6.2)$$

De la expresión que define los términos de sucesión  $\{x_k\}$  tenemos que:

$$x_{k+1} - \hat{x} = x_k - \hat{x} - g(x_k) \left( \frac{x_k - x_{k-1}}{g(x_k) - g(x_{k-1})} \right) = x_k - \hat{x} - g(x_k) \left( \frac{1}{g[x_{k-1}, x_k]} \right)$$

$$x_{k+1} - \hat{x} = \frac{(x_k - \hat{x})g[x_{k-1}, x_k] - (g(x_k) - g(\hat{x}))}{g[x_{k-1}, x_k]} \quad \text{pues } g(\hat{x}) = 0$$

$$x_{k+1} - \hat{x} = (x_k - \hat{x}) \left( \frac{g[x_{k-1}, x_k] - g[x_k, \hat{x}]}{g[x_{k-1}, x_k]} \right) = (x_k - \hat{x})(x_{k-1} - \hat{x}) \left( \frac{g[x_{k-1}, x_k, \hat{x}]}{g[x_{k-1}, x_k]} \right)$$

Si ahora hacemos uso de las ecuaciones 6.1 y 6.2 y además tomamos dos constantes  $k_1, k_2$  :  $\frac{1}{2}g''(\xi_k) < k_1$  y  $g'(\eta_k) > k_2 \quad \forall x_k$  suficientemente cerca de  $\hat{x}$ , entonces la expresión anterior quedará como:

$$x_{k+1} - \hat{x} = \frac{g''(\xi_k)}{2g'(\eta_k)}(x_k - \hat{x})(x_{k-1} - \hat{x}) \leq \frac{k_1}{2k_2}(x_k - \hat{x})(x_{k-1} - \hat{x})$$

De manera que podemos decir que para  $k$  suficientemente grande, existirá una constante  $M$  tal que:

$$|x_{k+1} - \hat{x}| \approx M |x_k - \hat{x}| |x_{k-1} - \hat{x}|$$

Si ahora llamamos  $e_k = |x_k - \hat{x}|$  y tras sustituirlo en la expresión anterior tomamos logaritmos, nos quedará:

$$\log Me_{k+1} \approx \log Me_k + \log Me_{k-1} \quad \text{o visto de otra forma} \quad (6.3)$$

$$y_{k+1} \approx y_k + y_{k-1} \quad (\text{Fibonacci})$$

Ahora bien, para la sucesión de Fibonacci se sabe que  $\lim_{k \uparrow \infty} \frac{y_{k+1}}{y_k} = \frac{1-\sqrt{5}}{2} = \tau$ , o lo que es lo mismo, que para  $k$  suficientemente grande se cumple que  $\frac{y_{k+1}}{y_k} = \tau$ . Aplicando ésto a

la ecuación 6.3 no queda que para  $k$  suficientemente grande,

$$\begin{aligned}\log(Me_{k+1}) &= \tau \log(Me_k) \approx 0 \\ Me_k + 1 &= M^\tau e_k^\tau \Rightarrow e_{k+1} \approx Ce_k^\tau \quad \square\end{aligned}$$

**6.5. Método de diferencias finitas.** En método de diferencias finitas es una variante del método de Newton en la que se sustituye la derivada por su diferencia finita, de manera que los términos de la sucesión  $\{x_k\}$  quedan ahora expresados como:

$$x_{k+1} = x_k - g(x_k) \left( \frac{h_k}{g(x_k + h) - g(x_k)} \right)$$

6.5.1. *Convergencia del método de diferencias finitas.*

PROPOSICIÓN 6.3. *Sea  $g : R \rightarrow R$  que satisface  $g \in C^2$  ;  $\exists \hat{x} : g(\hat{x}) = 0$  ;  $g'(\hat{x}) \neq 0$ , con  $x_0$  suficientemente cercano a  $\hat{x}$  y  $h_k$  satisfaciendo una de las tres condiciones siguientes,*

1.  $|h_k| \leq \eta$  para algún  $\eta$  suficientemente pequeño.
2.  $\lim_{k \rightarrow \infty} h_k = 0$ .
3.  $|h_k| \leq C|x_k - \hat{x}|$  para algún  $C > 0$ , o,  $|h_k| \leq \hat{C}|g(x_k)|$  para algún  $\hat{C} > 0$ .

*entonces existe convergencia lineal cuando  $h_k$  cumple con la condición 1, convergencia superlineal cuando  $h_k$  cumple con la condición 2 y convergencia cuadrática cuando  $h_k$  cumple con la condición 3.*

PRUEBA 6.3. **Ejercicio:** dejamos al lector la elaboración de la prueba de esta proposición para la cual bastará que aplique lo utilizado en las pruebas de convergencia anteriores.

**6.6. Uso de estos métodos en la búsqueda de mínimos de  $g : R \rightarrow R$ .** Nótese que para todos los métodos presentados hasta ahora, excepto para la sección aurea, lo que se halla es un punto donde la función se hace cero; de manera que para utilizarlos en la búsqueda de mínimos de la función es necesario trabajar con la derivada de la misma a fin de conseguir los puntos estacionarios, es decir, los puntos donde la primera derivada de la función se anula.

Los métodos más utilizados en la búsqueda de óptimos suelen ser el de Newton y sus variantes (el de la secante y el de las diferencias finitas), principalmente debido a su rapidez de convergencia pues bajo ciertas condiciones puede llegar a ser cuadrática.

**TEOREMA 6.1.** *Sea  $\hat{x} = \min_{x \in R} g(x)$  con  $g \in C^2$  ;  $g''(\hat{x}) \neq 0$ , entonces el método de Newton y sus variantes convergen a  $\hat{x}$  en forma  $Q$ -cuadrática, cuando  $x_0$  está suficientemente cerca de  $\hat{x}$ .*

**PRUEBA 6.1.** *Se obtiene directamente de las pruebas de rapidez de convergencia para cada uno de los métodos.  $\square$*

En cuanto a las ventajas y desventajas mas importantes que presenta cada método estudiado, el cuadro 1 muestra un resumen comparativo basado principalmente en la rapidez y sencillez de cada uno.

<b>Método</b>	<b>Ventajas</b>	<b>Desventajas</b>
Bisección	sencillo, no necesita derivadas	lento, requiere intervalo inicial
Sec. Aurea	sencillo, minimiza directamente	lento, requiere intervalo inicial
Secante	rápido, no necesita derivadas	convergencia local
Dif. finitas	rápido, no necesita derivadas	convergencia local
Newton	rápido	necesita derivada, convergencia local

CUADRO 1. Ventajas y desventajas de los métodos estudiados para el caso unidimensional

## 7. TECNICAS DE GLOBALIZACION - (parte I)

Como se mencionó antes, la idea general de los métodos iterativos viene dada por la fórmula de actualización  $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$ . En esta sección estudiaremos condiciones que nos permitan asegurar que la dirección  $d_k$  y el tamaño de paso  $\alpha_k$  efectivamente nos acercarán a un punto con las características deseadas.

### 7.1. Direcciones de descenso.

**DEFINICIÓN 7.1.** Sea  $f : R^n \rightarrow R$ ; decimos que  $d \in R^n$  es una dirección de descenso para  $f$  en el punto  $x \in R^n$  si y sólo si  $\nabla f(x)^t d < 0$ . Si  $d$  es de descenso, entonces  $\exists \hat{\alpha} : f(x + \alpha d) < f(x) \quad \forall \alpha \in (0, \hat{\alpha}]$ .

**7.2. Búsqueda lineal.** Se llama búsqueda lineal a la búsqueda de un tamaño de paso que permita al método iterativo acercarse a la solución de manera efectiva en cada iteración. Dependiendo de la forma en que se realice esta búsqueda, se habla de **búsqueda lineal exacta** o de **búsqueda lineal inexacta**.

**DEFINICIÓN 7.2.** Si llamamos  $\alpha^*$  al valor de  $\alpha$  para el cual se registra el mayor descenso de  $f$  a lo largo de la dirección  $d$ , entonces:

$$\alpha^* = \arg\{\min_{\alpha > 0} f(x + \alpha d)\} \quad (7.1)$$

Cuando la búsqueda del tamaño de paso se realiza resolviendo la ecuación 7.1 entonces se habla de una **búsqueda lineal exacta**.

Para conocer cómo se realiza la búsqueda lineal inexacta primero introduciremos algunos conceptos.

**7.3. Condiciones de Armijo y Goldstein.** En general los métodos iterativos (con excepción de los no monótonos) buscan conseguir en cada iteración una dirección de descenso y un tamaño de paso que les permita acercarse suficientemente al minimizador de la función; sin embargo, la existencia de esta dirección por si sola no garantiza que se convergerá a la solución buscada. Considérese el siguiente ejemplo.

Sea  $f(x) = x^2$  ;  $x_0 = 2$  ;  $d_k = (-1)^{k+1}$  ;  $\alpha_k = 2 + 3(2^{-k+1})$ , donde  $d_k$  y  $\alpha_k$  son la dirección de descenso y el tamaño del paso respectivamente en en cada iteración; De manera que  $x_k = (-1)^k(1 + 2^{-k})$ . Es fácil ver que a pesar de que la dirección resulta de descenso en cada iteración  $k$ , la sucesión  $\{x_k\}$  no sólo no converge al minimizador de la función  $\hat{x} = 0$  sino que tendrá dos puntos de acumulación,  $-1$  y  $1$ .

Considérese el mismo problema donde ahora  $d_k = -1$  y  $\alpha_k = \frac{1}{2^k}$ , de manera que  $x_k = 2 - \sum_{i=1}^{k-1} \frac{1}{2^i}$ . En este caso, si bien la sucesión siempre se está acercando a la solución, nuevamente no converge a ésta sino a  $x = 1$ .

De los ejemplos anteriores resulta evidente la necesidad de incluir condiciones adicionales para asegurar que el movimiento realizado en cada iteración efectivamente nos acerque de manera suficiente a la solución. En otras palabras, debemos establecer una cota superior y una inferior para cada paso, a fin de asegurar que la sucesión convergerá a una solución del problema; estas cotas son respectivamente las condiciones de Armijo y de Goldstein.

**Condición de Armijo:**  $f(x_{k+1}) \leq f(x_k) + \eta \nabla f(x_k)^t \alpha_k d_k$  ;  $\eta \in (0, 1)$ .

**Condición de Goldstein:**  $\nabla f(x_{k+1})^t d_k \geq \beta \nabla f(x_k)^t d_k$  ;  $\beta \in (0, 1)$ .

En la figura 2 se muestra como la condición de Armijo establece la cota superior del tamaño de paso dependiendo del valor que se le de a  $\eta$ .

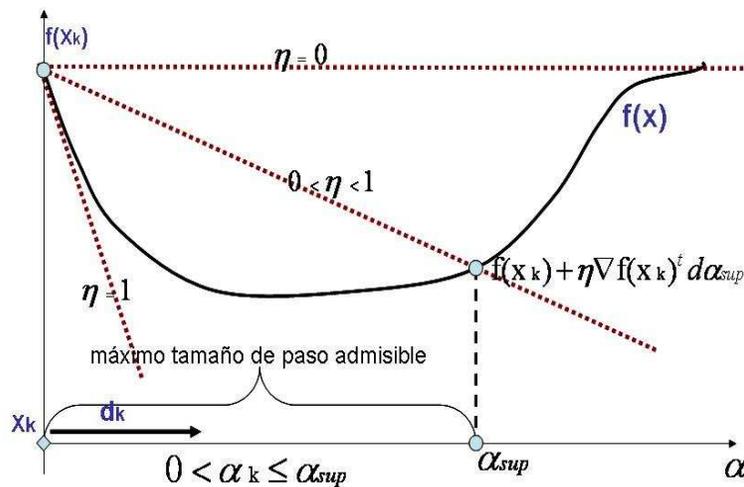


FIGURA 2. Condición de Armijo

En cuanto a la condición de Goldstein, nótese que si llamamos  $\theta_k$  al ángulo existente entre  $\nabla f(x_k)^t$  y  $d_k$  y llamamos  $\theta_{k+1}$  al ángulo existente entre  $\nabla f(x_{k+1})^t$  y  $d_k$ , entonces puede ser re-escrita como:

$$\begin{aligned} \|\nabla f(x_{k+1})\| \|d_k\| \cos(\theta_{k+1}) &\geq \beta \|\nabla f(x_k)\| \|d_k\| \cos(\theta_k) &\Rightarrow \\ \Rightarrow \|\nabla f(x_{k+1})\| \cos(\theta_{k+1}) &\geq -\beta \|\nabla f(x_k)\| |\cos(\theta_k)| &\text{ pues } \cos(\theta_k) < 0 \end{aligned}$$

es decir, que para aceptar el nuevo punto  $x_{k+1}$ , la condición exige una disminución suficiente (basada en el valor de  $\beta$ ) bien sea del módulo del gradiente en el nuevo punto  $\|\nabla f(x_{k+1})\|$ , del módulo del ángulo  $|\theta_{k+1}|$  que éste forma con la dirección de descenso  $d_k$ , o de ambos.

EJEMPLO 7.1. Sea  $f(x_1, x_2) = x_1^4 + x_1^2 + x_2^2$  con  $x_k = (1, 1)^t$  y  $d_k = (-3, -1)^t$ , y se desea hallar un tamaño de paso que cumpla con las condiciones de Armijo y Goldstein para  $\eta = 0,1$  y  $\beta = 0,5$ .

SOLUCIÓN 7.1. Primero verificamos que  $d_k$  es una dirección de descenso:

$$\nabla f(1, 1)^t d_k = (6, 2)(-3, -1)^t = -20 < 0 \Rightarrow d_k \text{ es de descenso}$$

Ahora tomamos  $x(\alpha) = x_k + \alpha d_k$ , probamos para varios valores de  $\alpha$  y tabulamos los resultados a comparar en el cuadro 2.

$\alpha$	$x(\alpha)$	$f(x(\alpha))$	$f(x_k) + \eta\alpha \nabla f(x_k)^t d_k$	$\nabla f(x(\alpha))$	$\nabla f(x(\alpha))^t d_k$	$\beta \nabla f(x_k)^t d_k$
1	$(-2, 0)^t$	20	1	$(-36, 0)^t$	107	-10
0,5	$(-0,5, 1,5)^t$	2,5625	2	$(-1,5, 3)^t$	7,5	-10
0,1	$(-0,7, 1,1)^t$	1,9401	2,8	$(-2,772, 2,2)^t$	10,516	-10

CUADRO 2. Ejemplo de búsqueda lineal inexacta

Los resultados muestran que la condición de Goldstein se cumple para todos los valores de  $\alpha$  escogidos pero la de Armijo sólo se cumple para  $\alpha = 0,1$ ; de manera que si bien todos los tamaños de paso cumplen con la cota inferior, sólo el último cumple con la cota superior para el  $\eta$  establecido.

El ejemplo anterior nos lleva a plantearnos la pregunta: **¿es posible establecer parámetros que nos permitan hallar siempre un  $\alpha$  que satisfaga las condiciones de Armijo y Goldstein ?**

PROPOSICIÓN 7.1. *Sea  $f : R^n \rightarrow R$  ;  $x_k, d_k \in R^n$  :  $\nabla f(x_k)^t d_k < 0$  y supongamos que  $\{f(x_k + \alpha d_k) : \alpha > 0\}$  está acotada inferiormente. Entonces si  $0 < \eta < \beta < 1 \Rightarrow \exists \lambda_u, \lambda_l > 0$  tal que  $x_{k+1} = x_k + \lambda d_k$  satisface las condiciones de Armijo y Goldstein  $\forall \lambda \in (\lambda_l, \lambda_u)$ .*

PRUEBA 7.1. *Sabemos por el teorema del valor medio y por la definición de derivada direccional que:*

$$f(x_k + \lambda d_k) = f(x_k) + \lambda \nabla f(x_k + \hat{\lambda} d_k)^t d_k \quad \text{con } \hat{\lambda} \in (0, \lambda) \quad (7.2)$$

$$\nabla f(x_k)^t d_k = \lim_{\lambda \downarrow 0} \frac{f(x_k + \lambda d_k) - f(x_k)}{\lambda}$$

de manera que para  $\lambda$  suficientemente pequeño se cumplirá que

$$\lambda \nabla f(x_k)^t d_k = f(x_k + \lambda d_k) - f(x_k)$$

además, como  $\eta < 1$  se cumple que

$$\eta \lambda \nabla f(x_k)^t d_k > \lambda \nabla f(x_k + \hat{\lambda} d_k)^t d_k \quad \forall \lambda$$

$$\text{es; decir, que } f(x_k + \lambda d_k) - f(x_k) < \eta \lambda \nabla f(x_k)^t d_k$$

y por consiguiente, he encontrado que efectivamente existe  $\hat{\lambda}$  tal que la condición de Armijo se cumple  $\forall \lambda \in (0, \hat{\lambda})$ .

Ahora bien, dado que en las condiciones establecimos que  $f(x_k + \lambda d_k)$  estaba acotada inferiormente, entonces debe existir un  $\tilde{\lambda}$  para el cual la expresión anterior se convierte en igualdad. De manera que combinando esta igualdad con la expresión 7.2 obtenemos que:

$$\eta \tilde{\lambda} \nabla f(x_k)^t d_k = f(x_k + \tilde{\lambda} d_k) - f(x_k) = \tilde{\lambda} \nabla f(x_k + \tilde{\lambda} d_k)^t d_k$$

$$\text{y como } \beta > \eta \text{ queda } \nabla f(x_k + \tilde{\lambda} d_k)^t d_k > \nabla f(x_k)^t d_k \quad \forall \tilde{\lambda} \in (0, \hat{\lambda})$$

así que hemos encontrado que la condición de Goldstein también se cumple, completando así la demostración.  $\square$

DEFINICIÓN 7.3. *Cuando la búsqueda del tamaño de paso se realiza mediante tanteo, tratando de que el mismo cumpla las condiciones de Armijo y Goldstein, entonces es una **búsqueda lineal inexacta**, a veces también llamada **regresión** o **backtracking**. Cuando se cumplen las condiciones invocadas en la proposición 7.1, siempre será posible realizar una búsqueda lineal inexacta exitosa.*

Ahora nos interesa establecer una relación entre estos tamaños de paso  $\alpha_k$  y el hecho de que al utilizarlos el gradiente de la función  $\nabla f(x_k)$  pueda acercarse a 0. El teorema 7.1 que aparece más abajo, nos presenta esta relación permitiendo asegurar que si el ángulo entre el gradiente en cada punto de la sucesión  $\nabla f(x_k)$  y la dirección de descenso utilizada  $d_k$  se mantiene lejos de  $\frac{\pi}{2}$  entonces el gradiente tenderá a cero.

Antes sin embargo, introducimos una definición que nos permitirá relajar la condición de que  $f$  sea continuamente derivable dos veces y por lo tanto, incluir en el estudio un rango más amplio de funciones.

**DEFINICIÓN 7.4.** Sea  $f : R \rightarrow R : f \in C^1$ . Decimos que  $\nabla f$  es una función **Lipschitz continua con constante  $\gamma$**  en el conjunto abierto  $D \subset R^n$  y se denota como  $\nabla f \in Lip_\gamma(D)$ , si:

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \leq \gamma \|x - y\| \quad \forall x, y \in D$$

Evidentemente  $f \in C^2 \Rightarrow f$  es Lipschitz.

**TEOREMA 7.1.** Sea  $f : R \rightarrow R : f \in C^1$ ,  $\nabla f \in Lip_\gamma(R^n)$ ,  $f(x) \geq \varphi \in R \quad \forall x \in R^n$  y consideremos a  $\{x_k\}$  definida por la expresión  $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$ , donde  $d_k$  es una dirección unitaria de descenso y  $\alpha_k$  satisface las condiciones de Armijo y Goldstein. Entonces, si llamamos  $\theta_k$  al ángulo entre  $\nabla f(x_k)$  y  $d_k$ , se cumple que  $\sum \cos^2 \theta_k \|\nabla f(x_k)\|^2$ , converge y por lo tanto:

$$\begin{aligned} \lim_{k \uparrow \infty} \cos^2(\theta_k) \|\nabla f(x_k)\|^2 &= 0 \\ \cos(\theta_k) \geq \cos(\theta) > \cos\left(\frac{\pi}{2}\right) &\Rightarrow \lim_{k \uparrow \infty} \|\nabla f(x_k)\|^2 = 0 \end{aligned}$$

**PRUEBA 7.1.** Si  $\sigma_k = \nabla f(x_k)^t d_k$ , entonces como la condición de Armijo se cumple,

$$f(x_1) \leq \eta \alpha_0 \sigma_0$$

$$f(x_2) \leq f(x_1) + \eta \alpha_1 \sigma_1 \leq f(x_0) + \eta \alpha_0 \sigma_0 + \eta \alpha_1 \sigma_1$$

$$\text{luego} \quad f(x_j) - f(x_0) \leq \eta \sum_{k=0}^{j-1} \alpha_k \sigma_k \Rightarrow \lim_{j \uparrow \infty} (f(x_j) - f(x_0)) \leq \eta \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k \sigma_k$$

$$\text{pero} \quad \alpha_k \sigma_k < 0 \quad \text{y} \quad f(x) \geq \varphi \quad \text{por lo tanto} \quad \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k \sigma_k = -M \quad \text{con} \quad M > 0$$

por otro lado, como la condición de Goldstein también se cumple,

$$\begin{aligned}\nabla f(x_{k+1})^t d_k &\geq \beta \nabla f(x_k)^t d_k = \beta \sigma_k \Rightarrow \\ \nabla f(x_{k+1})^t d_k - \nabla f(x_k)^t d_k &\geq \beta \nabla f(x_k)^t d_k - \nabla f(x_k)^t d_k \Rightarrow \\ (\nabla f(x_{k+1})^t - \nabla f(x_k)^t) d_k &\geq (\beta - 1) \nabla f(x_k)^t d_k\end{aligned}$$

utilizando la desigualdad de Cauchy-Schwarz ( $a^t b \leq \|a\| \|b\|$ ) y el hecho de que  $f$  es Lipschitz, y combinándolo con la ecuación anterior, obtenemos:

$$\begin{aligned}\alpha_k \gamma \|x_{k+1} - x_k\| &\geq \alpha_k \|\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)\| \|d_k\| \geq \alpha_k (\beta - 1) \nabla f(x_k)^t d_k \\ \text{pero} \quad \|x_{k+1} - x_k\| &\leq \alpha_{k-1} \quad \text{luego} \\ \alpha_k &\geq (\beta - 1) \alpha_k \sigma_k \Rightarrow \alpha_k \geq \left(\frac{\beta - 1}{\gamma}\right) \sigma_k \Rightarrow \sigma_k \alpha_k \leq \left(\frac{\beta - 1}{\gamma}\right) \sigma_k^2 \Rightarrow \\ \sum_{k \geq 0} \sigma_k \alpha_k &\leq \left(\frac{\beta - 1}{\gamma}\right) \sum_{k \geq 0} \sigma_k^2 \quad \text{lo que completa la prueba } \square\end{aligned}$$

**7.4. Algoritmo general para realizar una búsqueda lineal inexacta.** Ahora se establece un método general que puede ser utilizado en la búsqueda lineal inexacta, o back-tracking. El método es como sigue:

1. Dados  $\eta \in (0, \frac{1}{2})$ ;  $0 < l < u < 1$ ;  $\alpha_k = 1$
2. Mientras  $f(x_k + \alpha_k d_k) > f(x_k) + \eta \alpha_k \nabla f(x_k)^t d_k$ , repita el paso **3**
3. Haga  $\alpha_k \leftarrow \rho_k \alpha_k$ ;  $\rho_k \in (l, u)$
4. Haga  $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$

En otras palabras, se escoge inicialmente un paso unitario y se va reduciendo hasta que se cumpla la condición de Armijo. La de Goldstein será automáticamente cumplida pues sabemos que basta con escoger  $\beta : \eta < \beta < 1$ .

## 7.5. Ejercicios propuestos - II.

PROBLEMA 7.1. considere la expresión  $x_k = 1 + \frac{1}{k!} \quad \forall k \geq 0$  y responda.

- a:** ¿ $\{x_k\}$  converge a 1 en forma Q-lineal?
- b:** ¿ $\{x_k\}$  converge a cualquier constante  $c > 0$  en forma Q-lineal? ¿Qué tipo de convergencia es ésta?
- c:** ¿ $\{x_k\}$  converge a 1 con Q-orden  $l$  para cualquier constante  $l > 1$ ?

PROBLEMA 7.2. Implemente en Matlab los métodos de bisección, de Newton, de la secante y el de diferencias finitas, y utilícelos para hallar  $x^* : f(x^*) = 0$ , con:

- a:**  $f(x) = x^2 - 1$
- b:**  $f(x) = x^2 - 2x + 1$

Considere a  $x_0 = 2$  como punto inicial para los métodos de Newton, de la secante y de diferencias finitas y a  $[a_0, b_0] = [-1, 3]$  como intervalo inicial para el método de bisección.

Compare número de iteraciones y rapidez de convergencia de los métodos. Haga pruebas adicionales partiendo de otros puntos iniciales y observe que sucede. En particular comente por qué el método de Newton tiene ese comportamiento para la función en **b**.

PROBLEMA 7.3. Considere ahora el problema mín  $f(x)$ ;  $f(x) = -\frac{x^4}{4} + \frac{x^3}{3} + x^2$

- a:** Resuélvalo utilizando los métodos de Newton y de la secante, partiendo de  $x_0 = 1$ . Comente sus resultados.
- b:** Repita lo anterior para  $f(x) = \sin x - \cos 2x$ .

PROBLEMA 7.4. sea  $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} : f(\hat{x}) = 0$ .

- a:** probar que si  $f'(\hat{x}) = 0$ ;  $f''(\hat{x}) \neq 0$ , entonces el método de Newton converge en forma Q-lineal a  $\hat{x}$  con  $\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{e_{k+1}}{e_k} = \frac{1}{2}$ .
- b:** generalizar para el caso  $f'(\hat{x}) = f''(\hat{x}) = \dots = f^{(n)}(\hat{x}) = 0$ ;  $f^{(n+1)}(\hat{x}) \neq 0$ .

**Sugerencia:** usar las aproximaciones de Taylor para la función y sus derivadas.

## 8. METODOS CUANDO $f : R^n \rightarrow R$ (caso multidimensional - parte I)

**8.1. Método de mayor descenso (Steepest descent).** El método de mayor descenso, también conocido como método de Cauchy o del gradiente (ver comentario 8.1 más abajo), consiste en utilizar la dirección de descenso que resuelve el problema  $\min_{d_k} \nabla f(x_k)^t d_k$ , con  $\|d_k\| = 1$  en cada iteración; y la solución de este problema viene dado por:

$$\begin{aligned} \min_{d_k} \nabla f(x_k)^t d_k &= \min_{\cos(\theta_k)} \|\nabla f(x_k)\| \|d_k\| \cos(\theta_k) \\ &= -\|\nabla f(x_k)\| \quad \text{pues } \|d_k\| = 1 \\ \Rightarrow \quad d_k &= -\frac{\nabla f(x_k)}{\|\nabla f(x_k)\|} \end{aligned}$$

Una vez conocida la dirección a utilizar en cada iteración, pasamos a enumerar los pasos del algoritmo.

**Paso 0:** dado un punto inicial  $x_0 \in R^n$

**Paso 1:** para  $k = 0, 1, \dots$  hasta obtener convergencia, HAGA

$$\begin{aligned} d_k &= -\frac{\nabla f(x_k)}{\|\nabla f(x_k)\|} \\ \alpha_k &= \arg \min_{\alpha \geq 0} [f(x_k + \alpha d_k)] \\ x_{k+1} &= x_k + \alpha_k d_k \end{aligned}$$

COMENTARIO 8.1. Cuando la dirección de descenso utilizada es  $d_k = -\nabla f(x_k)$  en lugar de  $d_k = -\frac{\nabla f(x_k)}{\|\nabla f(x_k)\|}$ , entonces se le suele llamar “método del gradiente”.

Ahora veamos la aplicación del algoritmo en un ejemplo sencillo.

EJEMPLO 8.1. Realizar un paso del método de mayor descenso para minimizar  $f$ , con  $f(x_1, x_2) = \frac{1}{2}x_1^2 + \frac{9}{2}x_2^2$ ,  $x_k = (9, 1)^t$ .

SOLUCIÓN 8.1.  $\nabla f = \begin{pmatrix} x_1 \\ 9x_2 \end{pmatrix} \Rightarrow \nabla f(9, 1) = \begin{pmatrix} 9 \\ 9 \end{pmatrix}$

$$\begin{aligned} \|\nabla f(9, 1)\| &= \sqrt{162} = 9\sqrt{2} \quad ; \quad d_k = -\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ x_k + \alpha d_k &= (9, 1)^t - \frac{1}{\sqrt{2}}\alpha(1, 1)^t = \left(9 - \frac{\alpha}{\sqrt{2}}, 1 - \frac{\alpha}{\sqrt{2}}\right)^t \\ \alpha_k &= \arg \min_{\alpha \geq 0} \left[ f \left(9 - \frac{\alpha}{\sqrt{2}}, 1 - \frac{\alpha}{\sqrt{2}}\right) \right] \\ \alpha_k &= \arg \min_{\alpha \geq 0} \left[ \frac{1}{2} \left(9 - \frac{\alpha}{\sqrt{2}}\right)^2 + \frac{9}{2} \left(1 - \frac{\alpha}{\sqrt{2}}\right)^2 \right] \\ \frac{df(x_k + \alpha d_k)}{d\alpha} &= -\frac{1}{2} (9\sqrt{2} - \alpha) - \frac{9}{2} (\sqrt{2} - \alpha) = 0 \Leftrightarrow \alpha = 9\sqrt{2} \\ \frac{d^2 f(x_k + \alpha d_k)}{d\alpha^2} &= \frac{1}{2} + \frac{9}{2} = 5 > 0 \quad \Rightarrow \alpha_k = 9\sqrt{2} \\ x_{k+1} &= x_k + \alpha_k d_k = (9, 1)^t + 9(1, 1)^t = (18, 10)^t \end{aligned}$$

Del ejemplo anterior se puede observar que puede llegar a ser muy difícil la búsqueda de  $\alpha$ , de hecho, la literatura registra que en algunos casos resulta imposible. A continuación analizaremos el uso del método de mayor descenso en un tipo de función que es muy utilizada en la práctica.

**DEFINICIÓN 8.1.** Cuando  $f : R^n \rightarrow R$  es tal que  $f(x) = \frac{1}{2}x^t Qx - b^t x + c$  con  $Q \in R^{n \times n}$ ,  $b, c \in R^n$ , entonces se dice que  $f$  es cuadrática. Además si  $Q$  es simétrica y positiva definida (PD), entonces se dice que  $f$  es cuadrática positiva definida.

Para una función  $f$  cuadrática positiva definida, se cumple que  $\nabla^2 f(x) = Q \rightarrow (PD)$  y por lo tanto  $f$  es convexa. Además  $\nabla f(x^*) = Qx^* - b = 0 \Leftrightarrow x^* = Q^{-1}b$ , siendo  $x^*$  un minimizador global de  $f$ .

**PROPOSICIÓN 8.1.** El tamaño de paso para el método de mayor descenso  $\alpha_k$  aplicado a una función  $f : R^n \rightarrow R$ ; cuadrática positiva definida, donde  $f = \frac{1}{2}x^t Qx - b^t x + c$ ; viene dado por la expresión.

$$\alpha_k = \frac{\nabla f(x_k)^t \nabla f(x_k) \|\nabla f(x_k)\|}{\nabla f(x_k)^t Q \nabla f(x_k)} \quad \text{con} \quad d_k = -\frac{\nabla f(x_k)}{\|\nabla f(x_k)\|}$$

PRUEBA 8.1. *Dejamos la prueba de esta proposición como ejercicio para el lector.*

COMENTARIO 8.2. *De acuerdo a la proposición 8.1 sabemos que los puntos de la sucesión resultante de aplicar el método de mayor descenso a una función cuadrática definida positiva viene dado por:*

$$x_{k+1} = x_k - \frac{\nabla f(x_k)^t \nabla f(x_k)}{\nabla f(x_k)^t Q \nabla f(x_k)} \nabla f(x_k) \quad (8.1)$$

8.1.1. *Convergencia del método de mayor descenso.* Cuando converge, el método lo hace en forma Q-lineal con una constante que depende de los autovalores del Hessiano de  $f$  y que viene dada por  $c = (1 - \frac{a}{A})$ ; donde  $a$  es el mínimo autovalor de  $\nabla^2 f(x^*)$ ,  $A$  es el máximo autovalor de  $\nabla^2 f(x^*)$ . En el texto que sigue enunciamos un teorema que aplica al caso de funciones cuadráticas positivas definidas, pero antes introduciremos dos lemas que nos facilitarán su demostración.

LEMA 8.1. *La sucesión definida por la ecuación 8.1 satisface la relación:*

$$E(x_{k+1}) = \left( 1 - \frac{(\nabla f(x)^t \nabla f(x))^2}{(\nabla f(x)^t Q \nabla f(x))(\nabla f(x)^t Q^{-1} \nabla f(x))} \right) E(x_k) \quad (8.2)$$

PRUEBA 8.1. *Podemos asumir sin pérdida de generalidad que  $x^t Q x^* = b^t x - c$ , de manera que podemos escribir que  $E(x) = f(x) + \frac{1}{2} x^{*t} Q x^*$ . Luego, bastará con sustituir esta última expresión y la ecuación 8.1 en la ecuación 8.2, para obtener la prueba.  $\square$ .*

LEMA 8.2. *Sea  $B \in R^{n \times n}$  una matriz simétrica y llamemos  $\lambda_{max}$  y  $\lambda_{min}$  al máximo y mínimo autovalor de  $B$  respectivamente; entonces:*

$$\lambda_{min} \leq \frac{x^t B x}{x^t x} \leq \lambda_{max} \quad \forall x \in R^n$$

y

$$\frac{x^t x}{x^t B x} \leq \frac{1}{\lambda_{min}} \quad \forall x \in R^n$$

PRUEBA 8.2. *La dejamos como ejercicio para el lector.*

COMENTARIO 8.3. *Si  $B$  es positiva definida se cumple que cuando  $\lambda$  es autovalor de  $B$  entonces  $\lambda^{-1}$  será autovalor de  $B^{-1}$ , de manera que si aplicamos esta cualidad al lema 8.2 obtenemos que cuando  $B$  es positiva definida se cumple que:*

$$\left( \frac{x^t x}{x^t B x} \right) \left( \frac{x^t x}{x^t B^{-1} x} \right) \geq \frac{\lambda_{min}}{\lambda_{max}} \quad (8.3)$$

Ahora enunciamos el teorema de convergencia para el caso de funciones cuadráticas positivas definidas.

**TEOREMA 8.1.** *Dada  $f$  cuadrática positiva definida, el método de mayor descenso converge al minimizador global  $x^*$ .*

*Además,  $E(x_{k+1}) \leq (1 - \frac{a}{A}) E(x_k)$ , donde  $E(x) = \frac{1}{2}(x - x^*)^t Q(x - x^*)$ , es decir, que se tendrá rapidez de convergencia  $Q$ -lineal con constante  $c = (1 - \frac{a}{A})$ .*

**PRUEBA 8.1.** *De acuerdo con la ecuación 8.3:*

$$1 - \frac{(\nabla f(x)^t \nabla f(x))^2}{(\nabla f(x)^t Q \nabla f(x))((\nabla f(x)^t Q^{-1} \nabla f(x)))} \geq 1 - \frac{a}{A} \quad (8.4)$$

*sustituyendo esta desigualdad en la expresión 8.2 obtenemos directamente que:*

$$E(x_{k+1}) \leq \left(1 - \frac{a}{A}\right) E(x_k)$$

*completando así la prueba.  $\square$*

**COMENTARIO 8.4.** *Nótese que si se utiliza la norma  $\|x\|_Q = \frac{1}{2}x^t Qx$ , entonces la desigualdad expresada en el teorema 8.1 se puede re-escribir como:  $\|x_{k+1} - x^*\| \leq c \|x_k - x^*\|$ .*

**EJEMPLO 8.2.** *En el ejemplo 8.1 halle la constante  $c$  de convergencia  $Q$ -lineal.*

**SOLUCIÓN 8.2.** Como  $\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 9 \end{pmatrix} \Rightarrow c = 1 - \frac{1}{9} = \frac{8}{9}$

*Lo que indica que para este ejemplo, el método tenderá a converger de forma bastante lenta.*

**8.2. Método de Newton.** Antes de describir el método de Newton, revisaremos algunos resultados preliminares que nos ayudarán a entender su funcionamiento.

1. Sea  $g : R^n \rightarrow R$  continuamente diferenciable, entonces se llama Jacobiano de  $g$  a la matriz  $(J(x))_{ij} = \frac{\partial g_i(x)}{\partial x_j}$ .
2. Sea  $g : R^n \rightarrow R$  continuamente diferenciable en un abierto convexo  $D \subseteq R^n$ , entonces  $g(x+p) - g(x) = \int_0^1 J(x+tp)dt \quad \forall x, x+p \in D$ .
3. Sea  $g : R^n \rightarrow R$  continuamente diferenciable en un abierto convexo  $D \subseteq R^n$  que además cumple que  $\|J(x) - J(y)\| \leq \gamma \|x - y\|$  para algún  $\gamma \in (0, 1)$ ,  $\forall x, y \in D$ . Entonces  $\|g(x+p) - g(x) - J(x)p\| \leq \frac{\gamma}{2} \|p\|^2 \quad \forall p \in R^n$ .

4. a) Si  $E \in R^{n \times n}$  :  $\|E\| \leq 1$  entonces  $(I - E)^{-1}$  existe y se cumple que  $\|(I - E)^{-1}\| \leq \frac{1}{1 - \|E\|}$ .
- b) Si  $A$  es no singular y  $\|A^{-1}(A - B)\| < 1$ , entonces  $B$  es no singular y  $\|B^{-1}\| \leq \frac{\|A^{-1}\|}{1 - \|A^{-1}(A - B)\|}$ .

Ahora pasamos a describir el algoritmo de Newton. Sea  $g : R^n \rightarrow R^n$  y se desea encontrar la solución al sistema  $g(x) = 0$ , entonces el método es como sigue:

**Paso 0:** defina un punto inicial  $x_0$

**Paso 1:** Para  $k = 0, 1 \dots$  hasta convergencia, HAGA

$$x_{k+1} = x_k + d_k, \quad \text{donde} \quad J(x_k)d_k = -g(x_k)$$

Veamos la aplicación del algoritmo en un ejemplo.

EJEMPLO 8.3. Realice una iteración del método de Newton en la resolución del sistema  $g(x) = \begin{pmatrix} x_1 + x_2 - 3 \\ x_1^2 + x_2^2 - 9 \end{pmatrix} = 0$  con  $x_k = (1, 5)^t$ .

$$\text{SOLUCIÓN 8.3. } J(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial g_1(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial g_1(x)}{\partial x_2} \\ \frac{\partial g_2(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial g_2(x)}{\partial x_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2x_1 & 2x_2 \end{pmatrix}$$

$$J(x_k) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 10 \end{pmatrix} ; \quad g(x_k) = \begin{pmatrix} 1 \\ 17 \end{pmatrix} \Rightarrow d_k = -\frac{1}{8} \begin{pmatrix} 13 \\ 11 \end{pmatrix}$$

$$x_{k+1} = x_k + d_k = \begin{pmatrix} 1 \\ 5 \end{pmatrix} - \frac{1}{8} \begin{pmatrix} 13 \\ 11 \end{pmatrix} = \frac{1}{8} \begin{pmatrix} -5 \\ 29 \end{pmatrix}$$

### 8.2.1. Convergencia del método de Newton.

TEOREMA 8.2. Sea  $g : R^n \rightarrow R^n$  continuamente diferenciable en  $D \subseteq R^n$  abierto y convexo, y supongamos que:

1.  $\exists x^* \in D : g(x^*) = 0$  (existe la solución  $x^*$ ).
2.  $\exists J^{-1}(x^*)$  con  $\|J^{-1}(x^*)\| \leq \beta$  (el Jacobiano evaluado en  $x^*$  es diferente de cero, luego  $\beta$  está relacionada con su cercanía a cero).

3.  $\exists \gamma \in (0, 1) : \|J(x) - J(y)\| \leq \gamma \|x - y\|$  ,  $\forall x, y \in B_\delta(x^*)$  (el Jacobiano es Lipschitz dentro de una hiper-esfera de centro  $x^*$  y radio  $\delta$ , donde  $\gamma$  da una idea de la linealidad de  $g$ ).

Entonces, existe  $\epsilon > 0 : \|x_0 - x^*\| \leq \epsilon$  implica que la sucesión  $\{x_k\}$  generada por el método de Newton converge en forma  $Q$ -cuadrática a  $x^*$  con  $\|x_{k+1} - x^*\| \leq \gamma\beta \|x_k - x^*\|^2$ .

PRUEBA 8.2. Sabemos que  $x_1 = x_0 - J^{-1}(x_0)g(x_0)$  de manera que:

$$\begin{aligned} x_1 - x^* &= x_0 - x^* - J^{-1}(x_0)g(x_0) \\ x_1 - x^* &= J^{-1}(x_0) [-J(x_0)(x^* - x_0) - g(x_0) + g(x^*)] \\ \|x_1 - x^*\| &\leq \|J^{-1}(x_0)\| \|-J(x_0)(x^* - x_0) - g(x_0) + g(x^*)\| \\ \|x_1 - x^*\| &\leq \|J^{-1}(x_0)\| \frac{\gamma}{2} \|x^* - x_0\|^2 \end{aligned} \quad (8.5)$$

por otro lado, también sabemos que:

$$\begin{aligned} \|J^{-1}(x^*)(J(x_0) - J(x^*))\| &\leq \|J^{-1}(x^*)\| \|J(x_0) - J(x^*)\| \\ \|J^{-1}(x^*)(J(x_0) - J(x^*))\| &\leq \beta \|J(x_0) - J(x^*)\| \\ \|J^{-1}(x^*)(J(x_0) - J(x^*))\| &\leq \beta\gamma \|x_0 - x^*\| \\ \|J^{-1}(x^*)(J(x_0) - J(x^*))\| &\leq \beta\gamma\epsilon \end{aligned}$$

y haciendo  $\epsilon = \min\{\delta, \frac{1}{2\gamma\beta}\}$ , entonces quedará que:

$$\|J^{-1}(x^*)(J(x_0) - J(x^*))\| \leq \frac{1}{2}$$

luego, de acuerdo a lo visto en los resultados preliminares resulta cierto que:

$$\begin{aligned} \|J^{-1}(x_0)\| &\leq \frac{\|J^{-1}(x^*)\|}{1 - \|J^{-1}(x^*)(J(x_0) - J(x^*))\|} \\ \|J^{-1}(x_0)\| &\leq \frac{\|J^{-1}(x^*)\|}{1 - \frac{1}{2}} \\ \|J^{-1}(x_0)\| &\leq 2 \|J^{-1}(x^*)\| \leq 2\beta \end{aligned} \quad (8.6)$$

finalmente, sustituyendo la ecuación 8.6 en la ecuación 8.5 llegamos a la relación que nos dice que  $\|x_1 - x^*\| \leq \gamma\beta \|x_0 - x^*\|^2$ , lo que completa la prueba.  $\square$

El teorema 8.2 nos asegura que cuando el punto inicial  $x_0 \in R^n$  está suficientemente cerca de la solución  $x^* : g(x^*) = 0$ , entonces el método de Newton converge de forma Q-cuadrática. En el ejemplo que sigue se muestra como la frase “suficientemente cerca” es de vital importancia para la convergencia del método.

EJEMPLO 8.4. *Revise el comportamiento del método de Newton al utilizarlo para resolver  $g(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} e^{x_1} - 1 \\ e^{x_2} - 1 \end{pmatrix} = 0$  cuando se arranca desde el punto  $x_0 = \begin{pmatrix} -10 \\ -10 \end{pmatrix}$ .*

$$\text{SOLUCIÓN 8.4. } J(x) = \begin{pmatrix} e^{x_1} & 0 \\ 0 & e^{x_2} \end{pmatrix} \Rightarrow J(x_0) = \begin{pmatrix} e^{-10} & 0 \\ 0 & e^{-10} \end{pmatrix}$$

$$d_0 = \begin{pmatrix} e^{10} - 1 \\ e^{10} - 1 \end{pmatrix} \rightarrow x_1 = X_0 + d_0 = \begin{pmatrix} e^{10} - 11 \\ e^{10} - 11 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 22000 \\ 22000 \end{pmatrix}$$

y como sabemos que la solución es  $x^* = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$  podemos asegurar que nos estamos alejando demasiado de la solución, de manera que en este caso  $\epsilon = 10\sqrt{2}$  va a resultar demasiado grande para que el método converja.

### 8.2.2. Propiedades del método de Newton.

1. Es localmente convergente.
2. Si  $g(x) = Ax - b$  con  $A \in R^{n \times n}$  invertible, y  $x, b \in R^n$ . Entonces el método halla la solución en un sólo paso no importa cual sea el punto inicial  $x_0$ , pues
 
$$J(x) = A \Rightarrow Ad_0 = -Ax_0 + b \Rightarrow d_0 = -x_0 + A^{-1}b$$
 y por lo tanto
 
$$x_1 = x_0 + d_0 = x_0 - x_0 + A^{-1}b.$$
 En otras palabras, si  $g$  es lineal y existe la solución, el método de Newton la halla en un sólo paso.
3. Para el caso de  $g$  lineal, el cálculo de  $d_0$  requiere la resolución de un sistema lineal lo que en general resulta costoso. Además, si  $J(x)$  es cercano a ser singular el método por lo general no convergera.
4. En los casos que converge, el método tiene buena rapidez de convergencia

8.2.3. ¿Cómo utilizar el método para resolver  $\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) : f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ ?

TEOREMA 8.3. Sea  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  continuamente diferenciable y supongamos que:

1. Existe  $x^* : \nabla f(x^*) = 0$  y  $\nabla^2 f(x^*)$  es positiva definida.
2.  $\|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(y)\| \leq \gamma \|x - y\| ; \forall \gamma \in (0, 1) ; \forall x, y \in B_\delta(x^*)$ .

Entonces, la sucesión generada por el método de Newton al ser aplicada a  $\nabla f(x)$  converge localmente a  $x^*$  de forma  $Q$ -cuadrática.

PRUEBA 8.3. Claramente la prueba de este teorema es básicamente la misma del teorema 8.2.  $\square$

De manera que para resolver el problema de minimizar  $f$ , se aplica el método de Newton a  $\nabla f(x)$  lo cuál bajo condiciones apropiadas nos llevará a un punto que cumple la condición necesaria de primer orden.

### 8.3. Método de Newton modificado.

LEMA 8.3. Sea  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ , entonces las direcciones generadas por el método de Newton serán siempre de descenso **si y sólo si** el Hessiano de  $f$  es positivo definido.

PRUEBA 8.3. Según el método de Newton  $\nabla^2 f(x_k) d_k = -\nabla f(x_k)$  por lo tanto,  $\nabla f(x_k)^t d_k = -d_k^t \nabla^2 f(x_k) d_k < 0 \Leftrightarrow \nabla^2 f(x_k)$  es PD.  $\square$

Del lema 8.3 se concluye que las direcciones generadas por el método de Newton, no siempre serán de descenso, sin embargo, es posible lograr que lo sean en tanto podamos hacer que la matriz que multiplica a la dirección en la fórmula de actualización de la misma sea siempre positiva definida.

El método de Newton modificado consiste básicamente en redefinir la fórmula de actualización de  $d_k$  como sigue:

$$[\nabla^2 f(x_k) + \mu_k I] d_k = -\nabla f(x_k)$$

$$\text{con } \mu_k \geq 0 : \left\{ \begin{array}{ll} \mu_k = 0 & \text{si } \nabla^2 f(x_k) \text{ es PD} \\ \mu_k > |\lambda_{\min}| & \text{si } \nabla^2 f(x_k) \text{ no es PD} \end{array} \right\}$$

donde  $\lambda_{min} < 0$  es el mínimo autovalor de  $\nabla^2 f(x_k)$ .

Para confirmar que la matriz así definida resulta siempre positiva definida, calculamos:

$$\begin{aligned} x^t [\nabla^2 f(x_k) + \mu_k I] x &= x^t \nabla^2 f(x_k) x + \mu_k \|x\|^2 = \\ &= \|x\|^2 \left( \frac{x^t \nabla^2 f(x_k) x}{x^t x} + \mu_k \right) \end{aligned}$$

pero dado que  $\nabla^2 f(x_k)$  es simétrica y tomado en cuenta que  $\lambda_{min} < 0$  (que es el caso que nos interesa), se cumplirá que:

$$\begin{aligned} \frac{x^t \nabla^2 f(x_k) x}{x^t x} \geq \lambda_{min} &\Rightarrow -\frac{x^t \nabla^2 f(x_k) x}{x^t x} \leq |\lambda_{min}| < \mu_k \\ &\Rightarrow \frac{x^t \nabla^2 f(x_k) x}{x^t x} + \mu_k > 0 \end{aligned}$$

de manera que la matriz será efectivamente positiva definida.

*8.3.1. Globalización del método de Newton.* Nótese que bajo el esquema del Newton modificado todas las direcciones serán de descenso, de manera que si agregamos un tamaño de paso que cumpla con las condiciones de Armijo y Goldstein, podremos globalizar el método siempre que  $\nabla f(x_k)$  no tienda a ser ortogonal a  $d_k$ , pues de ser así, como vimos en secciones anteriores, los avances en cada iteración podrían no ser suficientemente grandes de manera que el gradiente de la función puede no tender a cero.

En otras palabras, si puedo asegurar que:

1. La dirección  $d_k$  es de descenso
2. El tamaño de paso  $\alpha_k$  cumple con las condiciones de Armijo y Goldstein
3.  $\cos(\theta_k) > a > 0$ , donde  $\theta$  es el ángulo entre  $d_k$  y  $\nabla f(x_k)$

entonces bajo las condiciones con las que hemos estado trabajando para la función  $f(x)$  se cumplirá que el método converge a un punto  $x^*$  que cumple la condición necesaria de primer orden, es decir,  $\nabla f(x^*) = 0$ .

Ya mostramos que las direcciones  $d_k$  generadas por el método de Newton modificado son de descenso y sabemos que usando backtracking podemos encontrar  $\alpha_k$  que cumpla

las condiciones de Armijo y Goldstein; luego, sólo falta encontrar si la tercera condición se cumple o no.

Si llamamos  $H_k$  a la matriz que sustituye al Hessiano de  $f$  en el método de Newton modificado, entonces

$$H_k d_k = -\nabla f(x_k) \quad \text{con} \quad \left\{ \begin{array}{ll} H_k = \nabla^2 f(x_k) & \text{si } \nabla^2 f(x_k) \text{ es PD} \\ H_k = \nabla^2 f(x_k) + \mu_k I & \text{si } \nabla^2 f(x_k) \text{ no es PD} \end{array} \right\}$$

de manera que  $d_k = -H_k^{-1} \nabla f(x_k)$  y

$$d_k \nabla f(x_k) = -\nabla f(x_k)^t - H_k^{-1} \nabla f(x_k) = \left\| -H_k^{-1} \nabla f(x_k) \right\| \left\| \nabla f(x_k) \right\| \cos(\theta_k)$$

$$\Rightarrow |\cos(\theta_k)| = \frac{\left| -\nabla f(x_k)^t - H_k^{-1} \nabla f(x_k) \right|}{\left\| -H_k^{-1} \nabla f(x_k) \right\| \left\| \nabla f(x_k) \right\|} \quad (8.7)$$

pero por propiedades de las normas de matrices se sabe que

$$\|A\| = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} \quad \Rightarrow \quad \|Ax\| \leq \|A\| \|x\| \quad (8.8)$$

luego, aplicando 8.8 en la ecuación 8.7 y llamando  $\lambda(H_k)$  a los autovalores de  $H_k$  obtenemos:

$$|\cos(\theta_k)| \geq \frac{\left| -\nabla f(x_k)^t - H_k^{-1} \nabla f(x_k) \right|}{\left\| \nabla f(x_k) \right\|^2 \left\| H_k^{-1} \right\|} \geq \min_{\nabla f(x_k) \neq 0} \left[ \frac{\left| -\nabla f(x_k)^t - H_k^{-1} \nabla f(x_k) \right|}{\nabla f(x_k)^t \nabla f(x_k)} \right] \frac{1}{\left\| H_k^{-1} \right\|}$$

$$\text{Pero} \quad \frac{1}{\lambda_{max}(H_k)} \leq \frac{-\nabla f(x_k)^t - H_k^{-1} \nabla f(x_k)}{\nabla f(x_k)^t \nabla f(x_k)} \leq \frac{1}{\lambda_{min}(H_k)}$$

$$\text{luego} \quad |\cos(\theta_k)| \geq \frac{1}{\lambda_{max}(H_k)} \frac{1}{\left\| H_k^{-1} \right\|} = \frac{1}{\left\| H_k \right\| \left\| H_k^{-1} \right\|}$$

por último, como existe  $M$  tal que  $\left\| H_k \right\| \left\| H_k^{-1} \right\| \leq M \quad \forall k$  (llamada condición de la matriz  $H_k$ ), entonces se cumple que  $|\cos(\theta_k)| \geq \frac{1}{M} > 0$ ; lo que completa la tercera condición antes propuesta.

### 8.4. Ejercicios propuestos - III.

PROBLEMA 8.1. Demuestre que si  $f(x)$  es una función cuadrática definida positiva, entonces la longitud de paso dado por el método de Newton para cualquier  $x_k \in \mathbb{R}^n$  satisface las condiciones de Armijo y Goldstein cuando  $\alpha \leq \frac{1}{2}$  y  $\beta > 0$ .

PROBLEMA 8.2. Para cada una de las funciones  $f_1(x) = x$ ;  $f_2(x) = x^2 + x$ ;  $f_3(x) = e^x - 1$  responda:

**a:** ¿El método de Newton converge en forma cuadrática?

**b:** ¿Cuál es la región de convergencia?

**c:** Halle la constante de Lipschitz para  $f'(x)$  en el intervalo  $[-a, a]$ , con  $a > 0 \in \mathbb{R}$ .

PROBLEMA 8.3. Sea  $f(x) = \frac{1}{2} \|F(x)\|^2$  donde  $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ ,  $F \in C^1$ . Considere  $x_{k+1} = x_k - \lambda_k (F'(x_k))^{-1} F(x_k)$  y suponga que  $F(x)$  es no singular  $\forall x \in \mathbb{R}^n$ .

Pruebe que si en la condición de Armijo usamos  $\alpha = \frac{1}{2}$ , entonces  $\frac{f(x_{k+1})}{f(x_k)} \leq 1 - \lambda_k$ .

PROBLEMA 8.4. Dada la función  $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ ,  $f = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2^2 + x_2 \\ e^{x_3} - 1 \end{pmatrix}$ , hallar la región de convergencia cuando se aplica el método de Newton para resolver  $f = 0$ .

**8.5. Método de diferencias finitas.** El método de Newton presenta la desventaja de requerir información de segundo orden sobre la función a trabajar y una forma en que se ha logrado evitar esta necesidad es sustituyendo al Hessiano de la función por de una matriz que aproxime la información de ese Hessiano.

El método de diferencias finitas mantiene la estructura del algoritmo de Newton pero modificando la actualización de la dirección, es decir,  $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$ ; con  $A_k d_k = -\nabla f(x_k)$ , donde  $A_k \approx \nabla^2 f(x_k)$ .

Para lograr que  $A_k \approx \nabla^2 f(x_k)$ , se define como se expresa a continuación, donde  $h_j^k \in R$ ,  $e_j$  es un vector columna tal que  $e_j(i) = 0$  ( $\forall i \neq j$ );  $e_j(j) = 1$ , y llamamos  $A_{.j}$  a la columna  $j$  de la matriz  $A$ ,

$$A_{.j} = \frac{\nabla f(x_k + h_j^k e_j) - \nabla f(x_k)}{h_j^k} \quad (8.9)$$

$$A_k = \frac{A + A^t}{2} \Rightarrow A_k^t = A_k \quad (8.10)$$

La expresión que aparece a continuación, es una variación de la definición en 8.9 y 8.10 que se utiliza cuando no se dispone de una expresión analítica para  $\nabla f(x)$

$$(A_k)_{ij} = \frac{[f(x_k + h_i^k e_i + h_j^k e_j) - f(x_k + h_i^k e_i)] - [f(x_k + h_j^k e_j) - f(x_k)]}{h_i^k h_j^k}$$

*8.5.1. Convergencia del método de diferencias finitas.* La bondad de la aproximación del Hessiano que se realiza en el método de diferencias finitas, puede ser apreciada en el siguiente teorema donde se habla de la velocidad de convergencia del método hacia la solución  $x^*$ .

**TEOREMA 8.4.** *Sea  $\nabla^2 f(x)$  positiva definida y sea  $x_0$  un punto suficientemente cercano a  $x^*$ . Entonces:*

1. **Si**  $|h^k| \leq h$ , se tendrá convergencia *Q-lineal*.
2. **Si**  $\lim_{k \rightarrow \infty} h^k = 0$ , se tendrá convergencia *Q-superlineal*.
3. **Si**  $|h^k| \leq C \|\nabla f(x_k)\|$  o  $|h^k| \leq C^* \|x_k - x^*\|$ , se tendrá convergencia *Q-cuadrática*.

**PRUEBA 8.4.** *Dejamos la prueba como ejercicio para el lector.*

En la práctica, los valores que se suelen tomar para  $h^k$  son:

1.  $h^k = h = \epsilon^{\frac{1}{2}}$ , donde  $\epsilon$  es la precisión de la máquina
2.  $|h_j^k| = \epsilon^{\frac{1}{2}} |x_j^k|$ , donde  $x_j^k$  es la componente  $j$  de  $x_k$ .

**8.6. Métodos casi-Newton.** En los métodos casi-Newton se sigue manteniendo la estructura del algoritmo de Newton, pero modificando el cálculo de la dirección  $d_k$ , de manera que ahora  $H_k d_k = -\nabla f(x_k)$  ;  $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$ , donde se busca que  $H_k$  sea una matriz con propiedades análogas a las del Hessiano de la función.

Las **condiciones** que se requiere cumpla la sucesión de matrices  $\{H_k\}$  son:

1.  $H_k$  debe ser simétrica.
2. Si  $H_k$  es positiva definida, entonces  $H_{k+1}$  también será positiva definida.
3.  $H_{k+1} = H_k + U_k$ , donde  $U_k$  debe ser computacionalmente económica de generar.
4.  $H_{k+1} d_k = y_k$ , donde  $y_k = \nabla f(x_k + d_k) - \nabla f(x_k)$ .

COMENTARIO 8.5. La ecuación  $H_k d_k = y_k$  recibe el nombre de ecuación de la secante o ecuación casi-Newton. Nótese que  $\int_0^1 \nabla^2 f(x_k + td_k) dt dk = \nabla f(x_k + d_k) - \nabla f(x_k) = y_k$ .

Entre los métodos más utilizados para generar la matriz  $U_k$  están el de **Broyden, Fletcher, Goldfarb y Shanno** conocido como **método BFGS** y el de **Davidon, Fletcher y Powell** conocido como **método DFP**.

8.6.1. *Actualización BFGS para la matriz  $U_k$ .* Definimos  $U_k$  como una matriz simétrica de rango 2 utilizando los vectores  $a_k, b_k \in R^n$  y los escalares  $\alpha_k, \beta_k$

$$U_k = \alpha_k (a_k a_k^t) + \beta_k (b_k b_k^t) \quad \text{con} \quad a_k = y_k \quad (8.11)$$

$$b_k = H_k d_k \quad (8.12)$$

sustituyendo ahora 8.11 y 8.12 en las condiciones 3 y 4, nos queda:

$$\begin{aligned}
H_{k+1}d_k &= H_k d_k + U_k d_k = H_k d_k + \alpha(y_k y_k^t) d_k + \beta(H_k d_k d_k^t H_k) d_k = y_k \\
H_{k+1}d_k &= H_k d_k + \underbrace{(y_k^t d_k \alpha_k)}_{\text{escalar}} y_k + \beta_k \underbrace{(d_k H_k d_k)}_{\text{escalar}} H_k d_k = y_k \\
(y_k^t d_k \alpha_k) y_k + [\beta_k (d_k H_k d_k) + 1] H_k d_k &= y_k \quad \Rightarrow \\
y_k^t d_k \alpha_k = 1 & \quad ; \quad \beta_k (d_k H_k d_k) + 1 = 0 \quad \Rightarrow \\
\alpha_k = \frac{1}{y_k^t d_k} & \quad ; \quad \beta_k = -\frac{1}{d_k^t H_k d_k}
\end{aligned}$$

de lo anterior se desprende que mientras se cumpla que  $y_k^t d_k \neq 0$ , entonces  $\alpha_k$  estará bien definida y que si  $H_k$  es positiva definida, entonces se cumplirá que  $d_k^t H_k d_k > 0$  y por lo tanto  $\beta_k$  estará bien definida.

Haciendo las sustituciones apropiadas, se llega a que la actualización BFGS viene dada por:

$$H_{k+1} = H_k + \left( \frac{y_k y_k^t}{y_k^t y_k} \right) - \left( \frac{H_k d_k d_k^t H_k}{d_k^t H_k d_k} \right) \quad (8.13)$$

### 8.6.2. Propiedades de la actualización BFGS.

PROPOSICIÓN 8.2. Si  $\nabla^2 f(x)$  es positivo definido  $\forall x \in R^n$ , entonces  $y_k^t d_k > 0 \quad \forall k \geq 1$ .

PRUEBA 8.2.

$$\begin{aligned}
y_k^t d_k &= \nabla f(x_{k+1})^t d_k - \nabla f(x_k)^t d_k = \left( \int_0^1 \nabla^2 f(x_k + t d_k) dt d_k \right)^t d_k = \\
&= \left( \int_0^1 d_k^t \nabla^2 f(x_k + t d_k) \right) d_k > 0 \quad \text{pues } \nabla^2 f(x) \text{ es PD } \square
\end{aligned}$$

PROPOSICIÓN 8.3. Si  $H_k$  es simétrica y positivo definida y además  $y_k^t d_k > 0$ , entonces  $H_{k+1}$  es simétrica y positivo definida.

PRUEBA 8.3. Si  $H_k$  es simétrica,  $H_{k+1}$  también lo será pues  $U_k$  es simétrica. En cuanto a la parte de ser definido positiva tenemos que:

$$\begin{aligned} x^t H_{k+1} x &= x^t H_k x + \frac{x^t y_k y_k^t x}{y_k^t d_k} - \frac{x^t H_k d_k d_k^t H x}{d_k^t H_k d_k} \\ x^t H_{k+1} x &= x^t H_k x + \frac{(x^t y_k)^2}{y_k^t d_k} - \frac{(x^t H_k d_k)^2}{d_k^t H_k d_k} \\ x^t H_{k+1} x &= x^t H_k x + \frac{(x^t y_k)^2}{y_k^t d_k} - \frac{\left( x^t H_k^{\frac{1}{2}} \left[ H_k^{\frac{1}{2}} \right]^t d_k \right)^2}{d_k^t H_k d_k} \quad \text{pues } H_k \text{ es PD} \end{aligned}$$

hasta acá sabemos que  $\frac{x^t y_k y_k^t x}{y_k^t d_k} \geq 0$ , de manera que si logramos demostrar que  $x^t H_k x - \frac{\left( x^t H_k^{\frac{1}{2}} \left[ H_k^{\frac{1}{2}} \right]^t d_k \right)^2}{d_k^t H_k d_k} \geq 0$  bastará con garantizar que ambas expresiones no pueden ser cero al mismo tiempo. Para facilitar esta parte de la demostración llamamos a la última expresión “a” y la reescribimos como sigue:

$$a = \frac{\left( d_k^t H_k^{\frac{1}{2}} \left[ H_k^{\frac{1}{2}} \right]^t d_k \right) \left( x^t H_k^{\frac{1}{2}} \left[ H_k^{\frac{1}{2}} \right]^t x \right) - \left( x^t H_k^{\frac{1}{2}} \left[ H_k^{\frac{1}{2}} \right]^t d_k \right)^2}{d_k^t H_k d_k} \quad (8.14)$$

y si ahora llamamos  $b = \left[ H_k^{\frac{1}{2}} \right]^t d_k$ ;  $c = \left[ H_k^{\frac{1}{2}} \right]^t x$ , podemos reescribir el numerador de la ecuación 8.14 como:

$$(b^t b) (c^t c) - (b^t c)^2 = \|b\|^2 \|c\|^2 - \|b^t c\|^2 \geq 0 \quad (8.15)$$

lo que nos lleva a concluir que  $a \geq 0$  pues  $d_k^t H_k d_k > 0$  ya que  $H_k$  es PD.

Veamos ahora si puede ocurrir que  $a = 0 = x^t y_k$ . Para ello asumamos que uno de ellos es cero y veamos que ocurre con el otro. Asumimos en principio que  $a = 0$ .

Si  $a = 0 \Rightarrow \left[ H_k^{\frac{1}{2}} \right]^t d_k = \alpha \left[ H_k^{\frac{1}{2}} \right]^t x \Rightarrow d_k = \alpha x$ , con  $\alpha \in R$ ; por lo tanto,  $x^t y_k = \frac{y_k^t d}{\alpha} \neq 0$ .

De igual manera, si asumimos inicialmente que  $x^t y_k = 0$ , entonces tenemos que  $d$  no puede ser paralelo a  $x$ , lo que equivale a decir que en la ecuación 8.15  $b$  no es paralelo a  $c$  lo que obliga a que se cumpla la desigualdad en forma estricta. Esto completa la demostración.  $\square$

PROPOSICIÓN 8.4. Si  $d_k = \alpha_k P_k$  con  $H_k P_k = -\nabla f(x_k)$ , tal que  $\alpha_k$  satisface las condiciones de Armijo y Goldstein, entonces  $d_k^t y_k > 0$ .

PRUEBA 8.4. De acuerdo a la condición de Goldstein tenemos:

$$\begin{aligned} \nabla f(x_k + \alpha_k P_k)^t \alpha_k P_k &\geq \beta \nabla f(x_k)^t \alpha_k P_k, & \beta < 1 \\ \text{Pero } y_k^t d_k &= (\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)) \alpha_k d_k \\ \text{Luego } y_k^t d_k &= \underbrace{(\beta - 1)}_{<0} \alpha_k \underbrace{\nabla f(x_k)^t P_k}_{<0} > 0 \quad \square \end{aligned}$$

CONCLUSIÓN 8.1. De las proposiciones anteriores se puede concluir:

1. Cuando  $f$  es convexa y  $H_k$  es PD, entonces  $H_{k+1}$  es PD.
2. Cuando se está cerca de un minimizador local  $x^*$  con  $\nabla^2 f(x^*)$  siendo PD tal que  $H_k$  es PD, entonces  $H_{k+1}$  es PD.
3. Cuando se está lejos de la solución y se toma  $x_{k+1} = x_k + \alpha_k P_k$  donde  $H_k P_k = -\nabla f(x_k)$  con  $H_k$  PD y  $\alpha_k$  cumpliendo las condiciones de Armijo y Goldstein, entonces  $H_{k+1}$  es PD.

8.6.3. *Actualización DFP para la matriz  $U_k$ .* Se basa en aplicar una actualización BFGS a la inversa de la matriz  $H_k$ , es decir, utilizando  $d_k = H_{k+1}^{-1} y_k$  queda:

$$H_{k+1} = H_k + \frac{d_k d_k^t}{d_k^t y_k} - \frac{(H_k y_k)(H_k y_k)^t}{y_k^t H_k y_k} \quad (8.16)$$

La ecuación anterior también suele ser escrita como:

$$H_{k+1} = H_k + \frac{(y_k - H_k d_k) y_k^t + y_k (y_k - H_k d_k)^t}{y_k^t d_k} - \frac{(y_k - H_k d_k)^t d_k y_k y_k^t}{(y_k^t d_k)^2}$$

Que proviene de utilizar  $(A + uv^t)^{-1} = A^{-1} - \frac{1}{\sigma} A^{-1} uv^t A^{-1}$

con  $\sigma = 1 + v^t A^{-1} u$ ; si  $\exists A^{-1} y$   $\sigma \neq 0 \Rightarrow \exists (A + uv^t)^{-1}$

8.6.4. *Propiedades de la actualización DFP.* La actualización DFP posee las mismas propiedades que la actualización BFGS.

8.6.5. *Algoritmo de los métodos casi-Newton estudiados.* El algoritmo correspondiente a los métodos BFGS y DFP es como sigue:

**Paso 0:** Dados  $x_0 \in R^n$ ,  $H_0 \in R^{n \times n}$  simétrica y positiva definida

**Paso 1:** Para  $k = 1, 2, \dots$  hasta convergencia, HAGA

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k P_k, \quad \text{donde } H_k P_k = -\nabla f(x_k)$$

(Usualmente se utiliza  $\alpha_k = 1$  evitando así la búsqueda lineal inexacta)

$$y_k = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)$$

Hallar  $H_{k+1}$  utilizando la actualización que corresponda expresada en las ecuación 8.13 para el método BFGS y en la ecuación 8.16 para el método DFP.

8.6.6. *Convergencia de los métodos casi-Newton estudiados.* Como en el caso del método de Newton, en los métodos casi-Newton se habla de convergencia local; es decir, se considera que  $x_0$  está suficientemente cerca de la solución  $x^*$ .

TEOREMA 8.5. sea  $f : R^n \rightarrow R$  y supongamos que:

1. Existe  $x^*$  tal que  $\nabla f(x^*) = 0$ .
2.  $\nabla^2 f(x)$  es Lipschitz en un entorno de  $x^*$ .
3.  $\nabla^2 f(x)$  es positiva definida.

Entonces, existe  $\epsilon > 0$ ,  $\delta > 0$  tal que  $\|x^* - x_0\| \leq \epsilon$  y  $\|\nabla^2 f(x^*) - H_0\| \leq \delta$  implica que la sucesión  $\{x_k\}$  generada por el método BFGS está bien definida y converge en forma  $Q$ -superlineal a  $x^*$ .

TEOREMA 8.6. Teorema de "Denis- Moré"(bounded deterioration) : sean  $D \subseteq R^n$  abierto y convexo,  $F : R^n \rightarrow R^n$  y  $\{A_k\}$  una sucesión de matrices no singulares en  $R^{n \times n}$ , y supongamos:

1.  $J(x)$  es Lipschitz en  $D$  con constante  $\gamma$ .
2. Existe  $x^* \in D$  tal que  $J(x^*)$  es no singular.
3. La sucesión definida por  $x_{k+1} = x_k - A_k^{-1} F(x_k)$  permanece en  $D$  y satisface:
  - $x_k \neq x^*$  para algún  $k$
  - $\lim_{k \uparrow \infty} x_k = x^*$

Entonces,  $\{x_k\}$  converge en forma  $Q$ -superlineal a  $x^*$  y  $F(x^*) = 0$  **si y sólo si**

$$\lim_{k \uparrow \infty} \frac{\|A_k d_k - J(x^*) d_k\|}{\|d_k\|} = 0 \quad \text{con } d_k = x_{k+1} - x_k$$

En otras palabras, mientras más cerca esté de la dirección de Newton, mejor será la convergencia. A continuación veremos un ejemplo de la aplicación de un método casi-Newton.

EJEMPLO 8.5. *Realice una iteración del método BFGS resolviendo  $\min f(x)$  con  $f(x) = x_1^4 + (x_1 + x_2)^2 + (e^{x_2} - 1)^2$ ,  $x_k = (1, 1)^t$  y  $H_k = \nabla^2 f(x_k)$ .*

$$\text{SOLUCIÓN 8.5.} \quad \nabla f(x) = \begin{pmatrix} 4x_1^3 + 2(x_1 + x_2) \\ 2(x_1 + x_2) + 2e^{x_2}(e^{x_2} - 1) \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$\nabla f(1, 1) = \begin{pmatrix} 8,000 \\ 13,341 \end{pmatrix} = -H_0 d_0$$

$$\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} 12x_1^2 & 2 \\ 2 & 2 + 2(e^{x_2})^2 + (2e^{x_2} - 1)^2 + 1 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$\nabla^2 f(1, 1) = \begin{pmatrix} 14,000 & 2,000 \\ 2,000 & 22,683 \end{pmatrix} = H_k$$

$$\det(H_k) = 331,563 > 0 \quad ; \quad \text{sub det}(H_k) = 22,683 > 0 \quad \Rightarrow \quad H_k \text{ es PD}$$

$$d_k = -H_k^{-1} \nabla f(x_k) = \begin{pmatrix} 0,072 & -0,006 \\ -0,006 & 0,044 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 8,000 \\ 13,341 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0,493 \\ -0,544 \end{pmatrix}$$

$$x_{k+1} = x_k + d_k = \begin{pmatrix} 1,000 \\ 1,000 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -0,467 \\ -0,731 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,506 \\ 0,455 \end{pmatrix}$$

$$y_k = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k) = \begin{pmatrix} 2,442 \\ 3,772 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 8,000 \\ 13,341 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -5,557 \\ -9,599 \end{pmatrix}$$

$$\frac{y_k y_k^t}{y_k^t y_k} = \begin{pmatrix} 0,251 & 0,433 \\ 0,433 & 0,749 \end{pmatrix} \quad ; \quad \frac{H_k d_k d_k^t H_k}{d_k^t H_k d_k} = \begin{pmatrix} 5,706 & 9,516 \\ 9,516 & 15,870 \end{pmatrix}$$

$$H_{k+1} = H_k + \left( \frac{y_k y_k^t}{y_k^t y_k} \right) - \left( \frac{H_k d_k d_k^t H_k}{d_k^t H_k d_k} \right) = \begin{pmatrix} 8,544 & -7,083 \\ -7,083 & 7,561 \end{pmatrix}$$

## 9. TECNICAS DE GLOBALIZACION - (parte II)

En esta segunda parte se busca lograr la globalización de la solución encontrada modificando la dirección de búsqueda en lugar del tamaño del paso. Para ello nos valemos de la aproximación funcional de Taylor de segundo orden, también llamada aproximación cuadrática de la función.

**9.1. técnica de región de confianza.** En esta técnica se toma como dirección de búsqueda a aquella donde se minimice la aproximación cuadrática de la función, sujeto a una región donde confiamos en que la aproximación cuadrática es válida.

Dado  $\delta_c > 0$ , entonces el problema de región de confianza **PRC** se define como:

$$\min_S \left( \hat{f}(x_c + S) = f(x_c) + \nabla f(x_c)^t S + \frac{1}{2} S^t H_c S \right) \quad \text{su}j. \text{ a } \|S\|_2 \leq \delta_c \quad (9.1)$$

donde  $H_c$  es una matriz simétrica y positiva definida tal que  $H_c \approx \nabla^2 f(x_c)$ .

**TEOREMA 9.1.** *Sea  $f : R^n \rightarrow R$  con  $f \in C^2$ ,  $H_c$  positiva definida; entonces,  $S(\mu) = -(H_c + \mu I)^{-1} \nabla f(x_c)$  para el único  $\mu \geq 0$  que cumple  $\|S(\mu)\|_2 = \delta_c$ , es la solución del PRC. A menos que  $\|S(0)\|_2 < \delta_c$ , en cuyo caso la solución del PRC será  $S(0) = -H_c^{-1} \nabla f(x_c)$ .*

**COMENTARIO 9.1.** *Lo anterior indica que cuando  $\delta_c \rightarrow \infty$  ( $\mu \rightarrow 0$ ), entonces  $S(\mu)$  tiende a ser la dirección de Newton; y cuando  $\delta_c \rightarrow 0$  ( $\mu \rightarrow \infty$ ), entonces  $S(\mu)$  tiende a ser la dirección de Cauchy.*

**PRUEBA 9.1.** *Sabemos que la solución irrestricta del problema de minimización planteado viene dada por  $S = S(0) = -H_c^{-1} \nabla f(x_c)$ , de manera que si se cumple de  $\|S(0)\| \leq \delta_c$ , evidentemente esta será la solución del PRC.*

*Si por el contrario ocurre que  $\|S(0)\| > \delta_c$ , entonces debe cumplirse que para algún  $S^+$ ,  $\|S(\mu)\| = \delta_c$ , es decir, dado que existe una dirección de descenso dentro de la región definida por  $B_{\delta_c}(x_c)$  y que esa dirección conduce a un mínimo fuera de la región, entonces el valor mínimo de la función para esa región sólo puede estar en el borde de la misma, en otras palabras, donde la norma de  $S$  iguala al radio de la región.*

Entonces cualquier dirección de descenso  $d$  a partir del punto  $x_c + S^+$  sólo puede alejarnos de  $x_c$ , es decir,

$$\nabla \hat{f}(x_c + S^+)^t d < 0 \Rightarrow \left(-H_c^{-1} \nabla f(x_c)\right) d < 0 \quad (9.2)$$

$$\Rightarrow (S^+)^t d > 0 \quad (9.3)$$

De manera que para que  $S^+$  sea solución del PRC,  $d$  debe satisfacer 9.2 y 9.3 simultáneamente lo cuál es posible si y sólo si  $\nabla \hat{f}(x_c + S^+)^t$  apunta en la dirección de  $-S^+$ , pues sabemos que  $\nabla \hat{f}(x_c + S^+)^t \neq 0$  y que de otra forma existiría otro punto dentro de la región donde la función tendría un menor valor. Es decir,

$$\begin{aligned} \exists \mu > 0 : -\mu S^+ = \nabla \hat{f}(x_c + S^+)^t &\Rightarrow \exists \mu > 0 : -\mu S^+ = -H_c^{-1} \nabla f(x_c) \\ \Rightarrow (H_c + \mu I) S^+ = -\nabla f(x_c) &\Rightarrow S^+ = (H_c + \mu I)^{-1} \nabla f(x_c) \end{aligned}$$

lo que completa la prueba.  $\square$

Si bien el teorema 9.1 identifica la solución del problema, en la práctica resulta imposible el cálculo analítico de  $S(\mu)$  por lo que se utilizan diferentes estrategias para aproximarla. Estas son, la estrategia del paso de “Hook” (1973) (donde lo que se aproxima es el valor de  $\mu$ ), la estrategia de paso “Dogleg” (1970) y la estrategia de paso “Double Dogleg” (1979) (las dos últimas aproximan  $S(\mu)$  directamente).

*9.1.1. Paso Dogleg y paso Double Dogleg.* Si llamamos  $x_{cp}$  al punto que minimiza  $\hat{f}(x_c + S)$  en la dirección  $-\nabla \hat{f}(x_c)$ , entonces se cumple que

$$x_{cp} = x_c - \hat{\lambda} \nabla f(x_c) \quad \text{tal que} \quad S = -\hat{\lambda} \nabla f(x_c)$$

es el paso donde se alcanza el mínimo y se puede encontrar que

$$\hat{\lambda} = \frac{\nabla f(x_c)^t \nabla f(x_c)}{\nabla f(x_c)^t H_c \nabla f(x_c)}$$

Si resulta que  $\|x_{cp}\| \geq \delta_c$  entonces  $x^+ = x_c - \delta_c \frac{\nabla f(x_c)}{\|\nabla f(x_c)\|}$  con  $\|x^+ - x_c\| = \delta_c$ .

Si resulta que  $\|x_{cp}\| < \delta_c$  entonces  $x^+ = \lambda x_N + (1 - \lambda)x_{cp}$ , donde

$$\begin{aligned} x_{cp} &= x_c + S_{cp} \quad \text{con} \quad S_{cp} = -\hat{\lambda} \nabla f(x_c) \\ x_N &= x_c + \eta S_N \quad \text{con} \quad S_N = -H_0^{-1} \nabla f(x_c) \end{aligned}$$

La diferencia entre el paso Dogleg y el Double Dogleg viene dada por el valor que de  $\eta$  en la expresión de  $x_N$ , como se muestra en el cuadro 3.

Dogleg	Double Dogleg
$\eta = 1$	$\eta = 0,8\gamma + 0,2$
	$\gamma = \frac{\ \nabla f(x_c)\ ^2}{\nabla f(x_c)^t H \nabla f(x_c)}$

CUADRO 3. Valor de  $\eta$  para los pasos Dogleg y Double Dogleg

LEMA 9.1. Si  $\| -H_k^{-1} \nabla f(x_k) \| \leq \delta_k$  entonces  $d_k = -H_k \nabla f(x_k)$  y  $\nabla \hat{f}(x_k + d_k) = 0$

si  $\| -H_k^{-1} \nabla f(x_k) \| > \delta_k$  entonces  $\left\{ \begin{array}{l} S_k(\mu) = -(H_k + \mu_k I)^{-1} \nabla f(x_k) \\ \text{resuelve el PCR, con } \|S_k(\mu)\| = \delta_k \end{array} \right\}$

donde  $S_k(\mu)$  se hallaría mediante las estrategias mencionadas.

La gráfica 3 muestra un ejemplo donde aparece  $x^+$  para uno y otro paso.

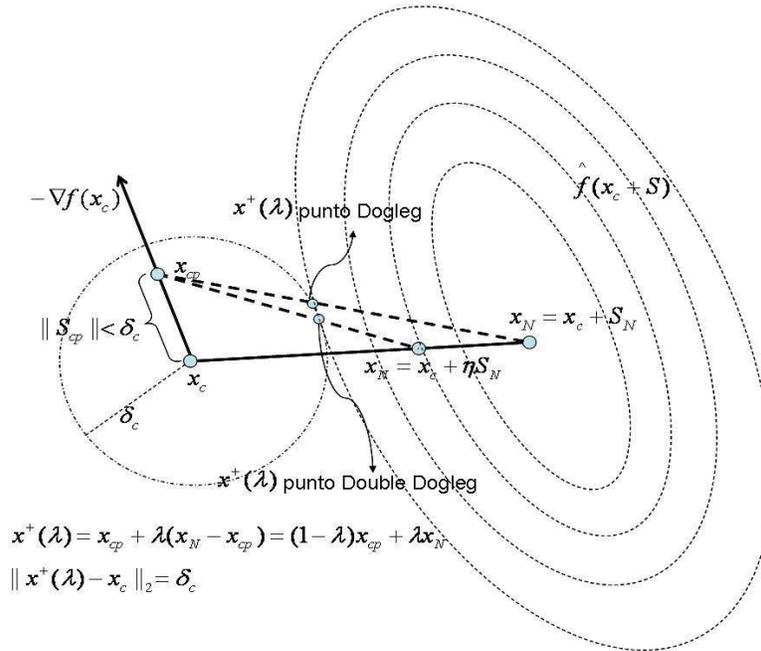


FIGURA 3. Pasos Dogleg y Double Dogleg

PROPOSICIÓN 9.1.

$$\gamma \leq 1, \quad \eta \leq 1, \quad \|S_{cp}\| \leq \gamma \|S_N\| \quad 2 \quad (9.4)$$

$$\hat{f}(y) \quad \text{decrece a lo largo de las trayectorias Dogleg y Double Dogleg.} \quad (9.5)$$

PRUEBA 9.1. Para 9.4 tenemos que:

$$x_{cp} = x_c - \underbrace{\hat{\lambda} \nabla f(x_c)}_{S_{cp}} \quad \text{con} \quad \hat{\lambda} = \frac{\nabla f(x_c)^t \nabla f(x_c)}{\nabla f(x_c)^t H_c \nabla f(x_c)}$$

$$\Rightarrow \quad \|S_{cp}\| = |\hat{\lambda}| \|\nabla f(x_c)\| = \frac{\|\nabla f(x_c)\|^3}{\nabla f(x_c)^t H_c \nabla f(x_c)}$$

$$\text{por lo tanto} \quad \gamma = \frac{\|\nabla f(x_c)\|}{\nabla f(x_c)^t H_c \nabla f(x_c)} \|S_{cp}\|$$

$$\text{pero} \quad \frac{\|\nabla f(x_c)\|}{\nabla f(x_c)^t H_c \nabla f(x_c)} \|S_N\| = \frac{\|\nabla f(x_c)\| \|H_c^{-1} \nabla f(x_c)\|}{\nabla f(x_c)^t H_c \nabla f(x_c)} \geq 1$$

$$\text{luego} \quad \underbrace{\frac{\|\nabla f(x_c)\|^3}{\nabla f(x_c)^t H_c \nabla f(x_c)}}_{\|S_{cp}\|} \underbrace{\frac{\|\nabla f(x_c)\|}{\nabla f(x_c)^t H_c \nabla f(x_c)} \|S_N\|}_{\geq 1} \geq \|S_{cp}\|$$

Ahora falta probar que  $\gamma \leq 1$  y para ésto basta recordar que al estudiar el método de Cauchy dijimos que  $\gamma \leq 1 - \frac{a}{A}$  (con  $a, A$  corresponden al mínimo y máximo autovalor de  $H_c$ , respectivamente).

En cuanto a la parte 9.5 tenemos que:

$$\nabla \hat{f}(x^+(\lambda))^t (\eta S_N - S_{cp}) < 0 \quad \forall \lambda \in [0, 1]$$

donde  $(\eta S_N - S_{cp})$  es la dirección de la recta que une a  $x_{cp}$  con  $x_N$  y  $x^+(\lambda)$  es el segmento que une esos dos puntos, como se observa en el gráfico 3.

De manera que si llamamos  $N$  al valor de  $x_N$  cuando  $\eta = 1$ , el hecho de que estén alineados nos permite asegurar que se cumple que:

$$\hat{f}(x_{cp}) > \hat{f}(x^+(\lambda)) > \hat{f}(x_N) \geq \hat{f}(N)$$

Lo que completa a demostración.  $\square$

EJEMPLO 9.1. Sea  $f(x_1, x_2) = x_1^4 + x_1^2 + x_2^2$  con  $x_c = (1, 1)^t$   $\delta = \frac{1}{2}$  y se quiere saber si se requiere aproximar el paso y de ser así, hallar  $x^+(\lambda)$  utilizando Dogleg.

$$\text{SOLUCIÓN 9.1. } H_c = \nabla^2 f(x_c) = \begin{pmatrix} 14 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} ; \nabla f(x_c) = \begin{pmatrix} 6 \\ 2 \end{pmatrix}$$

$$\text{Entonces } S_N = -(\nabla^2 f(x_c))^{-1} \nabla f(x_c) = \left(-\frac{3}{7}, 1\right)^t$$

$$\|S_N\| = \sqrt{1 + \frac{9}{49}} > \frac{1}{2} \Rightarrow \text{si utilizaremos Dogleg para aproximar el siguiente punto.}$$

$$S_{cp} = -\hat{\lambda} \nabla f(x_c) \approx \begin{pmatrix} -0,469 \\ -0,156 \end{pmatrix} \Rightarrow \|S_{cp}\| \approx 0,494 < \delta$$

$$x_N = x_c + \eta S_N ; \gamma \approx 0,684 \Rightarrow \eta = 0,8\gamma + 0,2 \approx 0,747$$

$$\eta S_N \approx \begin{pmatrix} -0,320 \\ -0,747 \end{pmatrix} ; \|x^+(\lambda) - x_c\| = \|S_{cp}(1 - \lambda) + \lambda \eta S_N\| = \delta$$

$$\left\| \begin{pmatrix} -0,469 \\ -0,156 \end{pmatrix} (1 - \lambda) + \lambda \begin{pmatrix} -0,320 \\ -0,747 \end{pmatrix} \right\|^2 = \delta^2 = \frac{1}{4}$$

$$\text{y al despejar obtenemos que } \lambda \approx 0,867 \quad x^+(\lambda) \approx \begin{pmatrix} 0,660 \\ 0,331 \end{pmatrix}$$

## 10. METODOS CUANDO $f : R^n \rightarrow R$ (caso multidimensional - parte II)

**10.1. Método de la región de confianza.** El método de la región de confianza está basado en la utilización de la aproximación cuadrática de la función para encontrar el nuevo iterado de la sucesión. A continuación se describe el algoritmo del método.

*10.1.1. Algoritmo de la región de confianza.* Sea  $f : R^n \rightarrow R$ ,  $\delta_k > 0$ ,  $x_k \in R^n$ ,  $H_k \in R^{n \times n}$  PD,  $\alpha \in (0, \frac{1}{2})$ , y sea el PRC

$$\hat{f}(x_k + S) = f(x_k) + \nabla f(x_k)^t S + \frac{1}{2} S^t \nabla^2 f(x_k) S \quad ; \quad k = 1, 2, \dots$$

**Paso 1:** Aproximar el resultado del PRC para hallar  $S_k$

**Paso 2:** Calcular  $x_{k+1} = x_k + S_k$

**Paso 3:** ■ Si  $f(x_{k+1}) \leq f(x_k) + \alpha \nabla f(x_k)^t (x_{k+1} - x_k)$  IR AL PASO 4

■ Si  $f(x_{k+1}) \leq f(x_k) + \alpha \nabla f(x_k)^t (x_{k+1} - x_k)$  HACER  $\delta_k = \frac{\delta_k}{2}$  Y VOLVER AL PASO 1

**Paso 4: reducción verdadera:**  $\Delta f = f(x_{k+1}) - f(x_k)$

**reducción predicha:**  $\Delta f_p = \hat{f}(x_{k+1}) - \hat{f}(x_k)$

**Paso 5:** ■ Si  $\left| \frac{\Delta f}{\Delta f_p} \right| < 0,1$ , HACER  $\delta_{k+1} = \frac{\delta_k}{2}$  Y VOLVER AL PASO 1

■ Si  $\left| \frac{\Delta f}{\Delta f_p} \right| \in [0,1, 0,75]$ , HACER  $\delta_{k+1} = \delta_k$  Y VOLVER AL PASO 1

■ Si  $\left| \frac{\Delta f}{\Delta f_p} \right| > 0,75$ , HACER  $\delta_{k+1} = 2\delta_k$  Y VOLVER AL PASO 1

COMENTARIO 10.1. Para elegir  $\delta_0$  se utilizan dos criterios, el primero creado por Powell toma  $\delta_0 = \|S_{cp}\|$  y el segundo lo toma dependiendo de la aplicación.

*10.1.2. Convergencia del método de la región de confianza.*

**TEOREMA 10.1.** Sea  $f : R^n \rightarrow R$  con  $\nabla f(x)$  Lipschitz continua. Sea  $\{x_k\}$  generado por el método de región de confianza y  $\{H_k\}$  acotado tal que  $\|H_k\| \leq \beta$ . Entonces se va a cumplir una de las tres siguientes afirmaciones:

1.  $f(x)$  es no acotada.
2.  $f(x_k) = 0$  para algún  $k$ .
3.  $\lim_{k \uparrow \infty} \nabla f(x_k) = 0$ .

## 10.2. Método del gradiente conjugado.

### 10.2.1. Direcciones conjugadas y sus propiedades.

DEFINICIÓN 10.1. **Direcciones  $Q$ -ortogonales o  $Q$ -conjugadas:**  $d_1, d_2 \in R^n$  son  $Q$ -ortogonales, también llamadas direcciones  $Q$ -conjugadas, cuando  $d_1^t Q d_2 = 0$ .

PROPOSICIÓN 10.1. Si  $d_i, d_j$ ,  $i, j = 1, 2, \dots, n$  son  $Q$ -conjugadas entonces,  $d_i, d_j$  son linealmente independientes.

PRUEBA 10.1. Si los vectores son linealmente independientes significa que su combinación lineal sólo podrá ser cero si los coeficientes lo son, es decir,  $\alpha d_i + \beta d_j = 0$  únicamente si  $\alpha = \beta = 0$ . Veamos si eso ocurre:

$$\begin{array}{ll} \text{si} & \alpha d_i + \beta d_j = 0 \\ \text{entonces} & \alpha d_i^t Q d_i + \beta \underbrace{d_i^t Q d_j}_{=0} = 0 \Rightarrow \alpha = 0 \\ \text{igualmente} & \alpha \underbrace{d_j^t Q d_i}_{=0} + \beta d_j^t Q d_j = 0 \Rightarrow \beta = 0 \end{array}$$

luego los vectores son linealmente independientes.  $\square$

Considérese una función  $f : R^n \rightarrow R$ , donde  $n$  es grande y  $f(x) = \frac{1}{2}x^t Q x - b^t x$ , con  $Q$  simétrica y positiva definida.

PROPOSICIÓN 10.2. Sean  $\{d_0, d_1, \dots, d_{n-1}\}$  direcciones  $Q$ -conjugadas y sea  $\{x_k\}$  tal que  $x_{k+1} = x_k + \alpha d_k$  con  $\alpha_k = -\frac{\nabla f(x_k)^t d_k}{d_k^t Q d_k}$ , entonces  $x_k \rightarrow x^*$  con  $Qx^* = b$  en  $n$  pasos, es decir,  $x_n = x^*$ .

PRUEBA 10.2. Como  $\{d_0, \dots, d_{n-1}\}$  son linealmente independientes, constituyen una base en  $R^n$ . De manera que existen coeficientes  $\beta_k$  tal que:

$$x^* - x_0 = \sum_{k=0}^{n-1} \beta_k d_k \Rightarrow d_{k_0}^t Q (x^* - x_0) = \sum_{k=0}^{n-1} \beta_k d_{k_0}^t Q d_k$$

Para cualquier  $k_0 = 0, 1, \dots, n-1$

$$\text{y al despejar } \beta_k \text{ queda} \quad \beta_k = \frac{d_{k_0}^t (Qx^* - Qx_0)}{d_{k_0}^t Q d_k}$$

por otro lado tenemos que:

$$d_k^t Q(x^* - x_0) = d_k^t Q(x^* - x_k + x_k - x_0) = d_k^t Q(x^* - x_k) + d_k^t Q(x_k - x_0)$$

$$\text{pero} \quad x_k = x_0 + \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i d_i$$

$$\text{luego} \quad d_k^t Q(x_k - x_0) = \alpha_i \underbrace{d_k^t Q \sum_{i=0}^{k-1} d_i}_{Q\text{-conjugados}} = 0$$

$$\text{quedando} \quad d_k^t Q(x^* - x_0) = d_k^t Q(x^* - x_k) = -Q(x_k - b)^t d_k \quad \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \quad \alpha_k = -\frac{\nabla f(x_k)^t d_k}{d_k^t Q d_k} = -\frac{Q(x_k - b)^t d_k}{d_k^t Q d_k} = -\frac{d_k^t Q(x_0 - x^*)}{d_k^t Q d_k} = \beta_k$$

$$\text{por lo tanto} \quad x_n = x_0 + \sum_{i=0}^{n-1} \alpha_i d_i = x_0 + \sum_{i=0}^{n-1} \beta_i d_i = x^* \quad \square$$

PROPOSICIÓN 10.3. *Bajo las mismas asunciones expresadas en la proposición 10.2 para  $d_k$  y  $\{x_k\}$ , se cumple que  $\nabla f(x_k)^t d_i = 0 \quad \forall i < k$*

PRUEBA 10.3. *Aplicando inducción se tiene:*

$$\begin{aligned} \text{Para } k = 1: \quad \nabla f(x_1)^t d_0 &= (Qx_1 - b)^t d_0 = [Q(x_0 + \alpha_0 d_0) - b]^t d_0 \\ &= \left( Qx_0 - b - \frac{(Qx_0 - b)d_0^t}{d_0^t Q d_0} Qd_0 \right)^t d_0 = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Para } k = 2: \quad \nabla f(x_2)^t d_0 &= (Qx_2 - b)^t d_0 = [Q(x_1 + \alpha_1 d_1) - b]^t d_0 \\ &= \underbrace{(Qx_1 - b)^t d_0}_{\nabla f(x_1)^t d_0 = 0} + \alpha_1 \underbrace{d_1^t Q d_0}_0 = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \nabla f(x_2)^t d_1 &= (Qx_2 - b)^t d_1 = [Q(x_1 + \alpha_1 d_1) - b]^t d_1 \\ &= \left( Qx_1 - b - \frac{(Qx_1 - b)d_1^t}{d_1^t Q d_1} Qd_1 \right)^t d_1 = 0 \end{aligned}$$

hemos encontrado que hasta  $k = 2$  se cumple lo expresado en la proposición, de manera que bastará con asumir que se sigue cumpliendo hasta  $k = m$  y luego probar que también se cumple para  $k = m + 1$  para completar la prueba por inducción. Esta parte la dejamos como ejercicio para el lector.  $\square$

## 10.2.2. Método del gradiente conjugado para funciones cuadráticas.

**Paso 0:** Dados  $x_0 \in R^n$ ,  $d_0 = -\nabla f(x_0) = -Qx_0 - b$

**Paso 1:** Para  $k = 0, 1, 2, \dots$  hasta convergencia, HACER

$$\alpha_k = -\frac{\nabla f(x_k)^t d_k}{d_k^t Q d_k} \quad ; \quad x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$$

$$d_{k+1} = -\nabla f(x_{k+1}) + \beta_k d_k \quad \text{con} \quad \beta_k = \frac{\nabla f(x_{k+1})^t Q d_k}{d_k^t Q d_k}$$

PROPOSICIÓN 10.4. Las direcciones generadas por el método son  $Q$ -conjugadas.

PRUEBA 10.4. Usando los pasos del método podemos calcular:

$$\begin{aligned} d_{k+1} Q d_k &= (-\nabla f(x_{k+1}) + \beta_k d_k)^t Q d_k \\ &= -\nabla f(x_{k+1})^t Q d_k + \frac{\nabla f(x_{k+1})^t Q d_k}{d_k^t Q d_k} (d_k^t Q d_k) = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} d_2 Q d_0 &= -\nabla f(x_2)^t Q d_0 + \frac{\nabla f(x_2)^t Q d_1}{d_1^t Q d_1} \underbrace{(d_1^t Q d_0)}_0 \\ &= -\nabla f(x_2)^t Q d_0 = 0 \end{aligned}$$

donde  $\nabla f(x_2)^t Q d_0 = 0$  es cierto de acuerdo a la proposición 10.3. De manera que hasta aquí se ha demostrado que  $d_0, d_1, d_2$  son  $Q$ -conjugados. Asumiendo que esto se cumple hasta  $k = m$ , es decir, que  $\{d_0, \dots, d_m\}$  son  $Q$ -conjugados, entonces bastará con probar que  $d_{m+1}$  también lo es para completar la prueba.

$$d_k Q d_0 = \underbrace{-\nabla f(x_k)^t Q d_0}_0 + \frac{\nabla f(x_k)^t Q d_{k-1}}{d_{k-1}^t Q d_{k-1}} \underbrace{(d_{k-1}^t Q d_0)}_0$$

$$d_k Q d_1 = \underbrace{-\nabla f(x_k)^t Q d_1}_0 + \frac{\nabla f(x_k)^t Q d_{k-1}}{d_{k-1}^t Q d_{k-1}} \underbrace{(d_{k-1}^t Q d_1)}_0$$

.....

$$d_k Q d_{k-2} = \underbrace{-\nabla f(x_k)^t Q d_{k-2}}_0 + \frac{\nabla f(x_k)^t Q d_{k-1}}{d_{k-1}^t Q d_{k-1}} \underbrace{(d_{k-1}^t Q d_{k-2})}_0$$

y como ya demostramos que  $d_k Q d_{k-1} = 0$ , hemos completado la prueba.  $\square$

10.2.3. *Propiedades del método de gradiente conjugado para funciones cuadráticas.*

1. Posee convergencia global.
2. Debido al poco almacenamiento que requiere, se considera de bajo costo.
3. Cuando  $n$  es grande, puede tener problemas de eficiencia.
4. En la práctica, la ortogonalidad de las direcciones puede irse perdiendo a medida que avanza el método, afectando así la convergencia teórica en  $n$  pasos. Esta pérdida de ortogonalidad se relaciona con cuan bien o mal condicionada esté la matriz  $Q$ .

EJEMPLO 10.1. *Si es aplicable, realice un paso del método del gradiente conjugado para funciones cuadráticas, para resolver  $\min f(x_1, x_2)$  con*

$$f(x_1, x_2) = -12x_2 + 4x_1^2 + 4x_2^2 - 4x_1x_2.$$

$$\text{SOLUCIÓN 10.1. } \nabla f(x) = \begin{pmatrix} 8x_1 - 4x_2 \\ -12 + 8x_2 - 4x_1 \end{pmatrix} ; \quad \nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} 8 & -4 \\ -4 & 8 \end{pmatrix}$$

Como  $Q = \nabla^2 f(x)$  es simétrica y positiva definida, sabemos que el método debe funcionar. Sea  $x_0 = (0, 0)^t$ , entonces,

$$d_0 = -\nabla f(x_0) = (0, 12)^t ; \quad \alpha_0 = \frac{-\nabla f(x_0)^t d_0}{d_0^t Q d_0} = \frac{144}{1152} = \frac{1}{8}$$

$$x_1 = x_0 + \alpha_0 d_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{8} \begin{pmatrix} 0 \\ 12 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 3 \end{pmatrix} ; \quad \nabla f(x_1) = \begin{pmatrix} -6 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\beta_0 = \frac{\nabla f(x_1)^t Q d_0}{d_0^t Q d_0} = \frac{288}{1152} = \frac{1}{4} ; \quad d_1 = -\nabla f(x_1) + \beta_0 d_0 = \begin{pmatrix} 6 \\ 3 \end{pmatrix}$$

PROPOSICIÓN 10.5. *En el método del gradiente conjugado para funciones cuadráticas  $\alpha, \beta$  pueden ser reescritos como:*

$$\alpha_k = \frac{\nabla f(x_k)^t \nabla f(x_k)}{d_k^t Q d_k} ; \quad \beta_k = \frac{\nabla f(x_{k+1})^t \nabla f(x_{k+1})}{\nabla f(x_k)^t \nabla f(x_k)}$$

PRUEBA 10.5. *Como ambas expresiones de  $\alpha$  (la descrita en el algoritmo y la que contiene esta proposición) tienen el mismo denominador, bastará con demostrar que sus*

numeradores son iguales:

$$\begin{aligned}
 -\nabla f(x_k)^t d_k &= -\nabla f(x_k)^t (-\nabla f(x_k) + \beta_{k-1} d_{k-1}) \\
 &= \nabla f(x_k)^t \nabla f(x_k) - \beta_{k-1} \underbrace{\nabla f(x_k)^t d_{k-1}}_0 \\
 &= \nabla f(x_k)^t \nabla f(x_k)
 \end{aligned}$$

En cuanto a  $\beta$  tenemos que una consecuencia directa de la proposición 10.3 es que  $\nabla f(x_{k+1})^t \nabla f(x_k) = 0$  pues del algoritmo se sabe que  $\nabla f(x_k) = \beta_{k-1} d_{k-1} - d_k$ .

$$\begin{aligned}
 \nabla f(x_{k+1})^t - \nabla f(x_k) &= Qx_{k+1} - Qx_k = Q(x_k + \alpha_k d_k) - Qx_k = \alpha_k Qd_k \\
 (\nabla f(x_{k+1})^t - \nabla f(x_k))^t \nabla f(x_k) &= \nabla f(x_{k+1})^t \nabla f(x_k) = \alpha_k \nabla f(x_{k+1})^t Qd_k \\
 &= \frac{\nabla f(x_k)^t \nabla f(x_k)}{d_k^t Qd_k} \nabla f(x_{k+1})^t Qd_k \\
 \Rightarrow \frac{\nabla f(x_{k+1})^t \nabla f(x_{k+1})}{\nabla f(x_k)^t \nabla f(x_k)} &= \frac{\nabla f(x_{k+1})^t Qd_k}{d_k^t Qd_k} = \beta \square
 \end{aligned}$$

10.2.4. *Convergencia del método de gradiente conjugado para funciones cuadráticas.* Numéricamente la convergencia es Q-lineal con una constante fuertemente influenciada por los autovalores de  $Q$  y que en ningún caso es peor que la correspondiente al método de Cauchy.

TEOREMA 10.2. Sea  $E(x) = \frac{1}{2}(x - x^*)^t Q(x - x^*)$  con  $Q$  simétrica, positiva definida y con autovalores  $\lambda_i$ .

Si  $\{x_k\}$  es la sucesión generada por el método del gradiente conjugado, entonces:

$$E(x_{k+1}) \leq \max_{\lambda_i} (1 + \lambda_i P_k(\lambda_i))^2 E(x_0)$$

para cualquier polinomio  $P_k$  de grado  $k$ .

PROPOSICIÓN 10.6. Si  $Q$  tiene sólo  $r$  autovalores distintos, entonces  $x_r = x^*$ .

PRUEBA 10.6. Supongamos que los autovalores de  $Q$  son  $\tau_1, \dots, \tau_r$  y definamos  $Q_r(\lambda) = \frac{(-1)^r}{\tau_1 \tau_2 \dots \tau_r} (\lambda - \tau_1) \dots (\lambda - \tau_r)$ , de manera que  $Q(0) = Q(\tau_i) = 0$ .

Entonces,  $P_{r-1}(\lambda) = \frac{Q_r(\lambda)-1}{\lambda}$  es un polinomio de grado  $r-1$  y se cumple que:

$$\max_{\lambda_i} (1 + \lambda_i P_{r-1}(\lambda_i)) = \max_{\lambda_i} Q_r(\lambda_i) = 0 \Rightarrow E(x_r) \leq 0.E(x_0)$$

$$\text{es decir que : } \frac{1}{2}(x_r - x^*)^t Q(x_r - x^*) = 0 \Rightarrow x_r = x^* \square$$

PROPOSICIÓN 10.7. Si  $Q$  tiene autovalores  $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ , entonces,

$$E(x_{k+1}) \leq \left( \frac{\lambda_{n-k} - \lambda_1}{\lambda_{n-k} + \lambda_1} \right)^2 E(x_0)$$

Es decir que el método tiene mejor comportamiento cuanto mas cercanos estén los autovalores a 1 y entre ellos mismos.

PRUEBA 10.7. La prueba que no fue incluida en este texto, se basa en una escogencia adecuada de los polinomios  $P_k$  y su manipulación algebraica. De necesitarla, el lector puede encontrarla en muchos de los libros especializados en el área.

De manera que si podemos modificar la matriz para que los autovalores se acerquen a lo deseado, se podría acelerar la rapidez de convergencia del método. A estas modificaciones se les llama **precondicionamiento**.

10.2.5. *Precondicionamiento.* El precondicionamiento trata de conseguir una matriz “precondicionadora”  $M$  sencilla, tal que  $M^{-1}Q \approx I$ . Donde sencilla significa que la resolución de sistemas del tipo  $M\omega = p$  no resulta costosa.

La idea básica es modificar un poco el método a fin de buscar la solución al sistema  $M^{-1}Qx = M^{-1}b$ . De manera que en cada iteración el método de gradiente conjugado precondicionado resolverá sistemas del tipo mencionado.

EJEMPLO 10.2. Sea  $Q \in R^{15 \times 15}$  definida como  $Q_{ij} = i$ , y sea  $b \in R^{15}$  definido como  $b_1 = 1$ ,  $b_{i \neq 1} = 0$ . Definir una matriz precondicionadora que permita acelerar el uso del método de gradiente conjugado.

**Nota:** la matriz  $Q$  no es PD ni simétrica, sin embargo, dado que el método funciona apropiadamente, es utiliza acá para ilustrar las mejoras que se obtienen mediante precondicionamiento.

SOLUCIÓN 10.2. Utilizando el método del gradiente conjugado, se obtiene una solución en 15 iteraciones, pero si se utiliza una matriz diagonal  $M$  definida como:

$M \in R^{15 \times 15}$  :  $M_{ij} = 0 \forall i \neq j$ ;  $M_{ij} = i \forall i = j \leq 7$ ;  $M_{ij} = 1$  en cualquier otro caso.

y se utiliza el método para resolver  $M^{-1}Qx = M^{-1}b$ , entonces la solución se obtiene en sólo 9 iteraciones.

### 10.3. Ejercicios propuestos - IV.

PROBLEMA 10.1. Demuestre que cuando se utiliza el algoritmo de gradiente conjugado para funciones cuadráticas,  $Qd_0$  está en el subespacio generado por  $\{d_0, d_1\}$ .

PROBLEMA 10.2. Resuelva el problema del ejemplo 10.2 tomando como matriz de preconditionamiento a  $M$  definida como  $M_{ij} = i \forall i = j$ ;  $M_{ij} = 0 \forall i \neq j$ .

PROBLEMA 10.3. Implemente el método de gradiente conjugado para funciones cuadráticas estrictamente convexas y pruebe su código respondiendo las siguientes preguntas:

**a:** Aplicarlo al ejemplo anterior para  $Q$  y para  $M^{-1}Q$ , y explicar los resultados

**b:** Aplicarlo a  $A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}$ ;  $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

¿Cuál es la rapidez de convergencia?, ¿que pasa con número de iteraciones?, ¿coinciden los anteriores con la teoría?

**c:** En el ejercicio de la parte (b) verifique que las direcciones son  $Q$ -conjugadas y que  $\nabla f(x_{k+1})^t \nabla f(x_k) = 0$ .

**10.4. Método del gradiente conjugado para funciones no lineales en general.** Para resolver el problema de optimización no lineal 3.1 mediante el método del gradiente conjugado, se redefinen  $\alpha_k$  y  $\beta_k$  como sigue:

**Paso 0:** Dados  $x_0 \in R^n$ ,  $d_0 = -\nabla f(x_0)$

**Paso 1:** Para  $k = 0, 1, 2, \dots$  hasta convergencia, **CALCULAR**

$\alpha_k$  usando búsqueda lineal inexacta (cumpliendo Armijo y Goldstein) o bien mediante búsqueda lineal exacta como  $\alpha_k = \arg \min_{\alpha > 0} f(x_k + \alpha d_k)$

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$$

$$d_{k+1} = -\nabla f(x_{k+1}) + \beta_k d_k \quad \text{con}$$

$\beta_k$  utilizando una de las dos fórmulas siguientes:

$$\text{Hestenes - Reeves (HR): } \beta_k = \frac{\nabla f(x_{k+1})^t \nabla f(x_{k+1})}{\nabla f(x_k)^t \nabla f(x_k)}$$

$$\text{Polak - Ribiere (PR): } \beta_k = \frac{\nabla f(x_{k+1})^t (\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k))}{\nabla f(x_k)^t \nabla f(x_k)}$$

COMENTARIO 10.2. *En la práctica la actualización PR parece tener mejor comportamiento que la HR. Cuando  $\cos(\theta) \approx 0$  en la actualización HR ocurre que  $\beta_k \approx 1 \Rightarrow d_{k+1} \approx d_k$ , por lo que tiende a haber poco avance, mientras que en la actualización PR ocurre  $\beta_k \approx 0 \Rightarrow d_{k+1} \approx -\nabla f(x_{k+1})$  lo que tiende a mejorar el avance.*

#### 10.4.1. Convergencia global del método de gradiente conjugado.

TEOREMA 10.3. *Sea  $f : R^n \rightarrow R$  y se quiere resolver  $\min_{x \in \Omega_0 \subseteq R^n} f(x)$  cumpliéndose las siguientes condiciones:*

1.  $\Omega_0 = \{x : f(x) \leq f(x_0)\}$  es acotada.
2.  $f$  es Lipschitz continua en un entorno  $\Omega$  de  $\Omega_0$ .
3.  $\alpha_k$  satisface Armijo / Goldstein con  $0 < \beta < \alpha < \frac{1}{2}$ .

Entonces  $\lim \|f(x_k)\| = 0$  con  $\{x_k\}$  por el método de gradiente conjugado utilizando la actualización HR.

**Nota:** la actualización de Goldstein y el  $\beta$  arriba mencionado viene dado por la ecuación  $|\nabla f(x_{k+1})^t d_k| \leq \beta |\nabla f(x_k)^t d_k|$ , también conocida como condición fuerte de Wolfe.

COMENTARIO 10.3. Cuando se utiliza la actualización de PR, el método no tiene prueba de convergencia global; sin embargo, cuando se utiliza  $\beta_k = \max\{\beta_k^{PR}, 0\}$  se ha llegado a probar la convergencia.

En cuanto a la rapidez de convergencia, si se considera el método del gradiente conjugado con  $d_k = -\nabla f(x_k)$ ;  $k = n, 2n, 3n, \dots$  y se cumple que  $f \in C^2$  y  $\exists x^* : \nabla f(x^*) = 0$ ,  $\nabla^2 f(x)$  es positiva definida, entonces la rapidez de convergencia tiende a ser Q-superlineal, es decir,

$$\lim_{k \uparrow \infty} \frac{\|x_{k+n} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|} = 0$$

además, si

$$\|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(y)\| \leq k \|x - y\| \quad \forall x, y \in B_{x^*}(\delta) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \lim_{k \uparrow \infty} \frac{\|x_{k+n} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|^2} < \infty$$

lo que indica que se aproxima a una rapidez de convergencia Q-cuadrática.

**10.5. Método del gradiente espectral.** El método del gradiente conjugado es otro método iterativo que resuelve el problema 3.1 utilizando la dirección de búsqueda  $d_k$  de los métodos casi-Newton, pero generando la matriz  $H_k$  de forma diferente.

La condición que se va exigir es que  $H_k = \alpha_k I$  y  $H_{k+1} = \alpha_{k+1} I$ , de manera que si  $d_k$  satisface la ecuación de la secante  $H_{k+1} d_k = y_k$ , entonces  $\alpha_{k+1}$  se puede expresar como:

$$\alpha_{k+1} = \min_{\alpha > 0} g(\alpha) = \min_{\alpha > 0} \|y_k - \alpha I d_k\|_2^2 \quad ; \quad g : R \rightarrow R$$

$$g(\alpha) = (y_k - \alpha d_k)^t (y_k - \alpha d_k) \quad ; \quad g'(\alpha) = 2\alpha (d_k^t d_k) - 2(d_k^t y_k)$$

$$g'(\alpha) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \alpha = \frac{d_k^t y_k}{d_k^t d_k}$$

**Ejercicio:** demostrar que  $\alpha$  así calculado es un mínimo positivo de  $g(\alpha)$ .

El algoritmo quedaría como sigue:

**Paso 0:** Dados  $x_0 \in R^n$ ,  $\alpha_0 > 0$

**Paso 1:** Para  $k = 1, 2, \dots$  hasta convergencia, HACER

$$d_k = -\frac{\nabla f(x_k)}{\alpha_k} \quad ; \quad x_{k+1} = x_k + d_k$$

$$y_k = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k) \quad ; \quad \alpha_{k+1} = \frac{d_k^t y_k}{d_k^t d_k}$$

### 10.5.1. Propiedades del método de gradiente espectral.

1. No se requiere resolver sistemas lineales .
2. Es económico en lo que a almacenamiento se refiere.

COMENTARIO 10.4. Si  $f(x) = \frac{1}{2}x^t Q x - b^t x$  con  $Q$  simétrica y positiva definida, entonces  $\nabla f(x) = Qx - b$ ,  $\nabla^2 f(x) = Q$  es positiva definida y  $y_k = (Qx_{k+1} - b) - (Qx_k - b) = Qd_k$ , por lo que  $\alpha_{k+1} = \frac{d_k^t Q d_k}{d_k^t d_k}$ ; de manera que  $\frac{1}{\alpha_{k+1}}$  es la longitud correspondiente al método de Cauchy en la iteración  $k$ .

En la práctica, aunque parecido, el comportamiento del método de gradiente espectral bajo estas condiciones suele ser bastante superior al de Cauchy.

### 10.5.2. Convergencia del método de gradiente espectral.

TEOREMA 10.4. Sea  $f$  cuadrática y estrictamente convexa, sea  $\{x_k\}$  generada por el método de gradiente espectral y sea  $x^*$  el único minimizador de  $f$ . Entonces o bien  $x_j = x^*$  para algún  $j$ ; o  $\{x_k\} \rightarrow x^*$ .

COMENTARIO 10.5. No se conoce la rapidez de convergencia del método, pero las experiencias prácticas parecen indicar convergencia  $Q$ -lineal o  $Q$ -superlineal.

10.5.3. Globalización del método de gradiente espectral. La sucesión generada por el método de gradiente espectral no es monótona decreciente, de manera que paraglobalizarlo en principio se requeriría modificar el método para incluir las condiciones de Armijo y Goldstein que asegurarían un descenso funcional suficiente en cada iteración. Sin embargo, Lamparielo, Lucide y Grippo desarrollaron una condición para métodos iterativos no

monótonos que permite la globalización sin obligar a la monotonocidad de la sucesión generada por el método.

La condición de Lamparielo, Lucide y Grippo es como sigue:

$$f(x_{k+1}) \leq \max_{0 \leq j \leq M} f(x_{k-j}) - \eta \nabla f(x_k)^t d_k \alpha_k ; M > 0$$

El método globalizado utilizando esta condición, también conocida como **búsqueda lineal no monótona**, queda como sigue:

**Paso 0:** Dados  $x_0 \in R^n$ ,  $\alpha > 0$ ,  $\gamma \in (0, 1)$ ,  $\delta > 0$ ,  $0 < \gamma_1 < \gamma_2 < 1$ ,  $0 < \epsilon < 1$

**Paso 1:** SI  $\|\nabla f(x_k)\| = 0$  PARE

**Paso 2:** SI  $\alpha_k < \epsilon$  o  $\alpha_k \geq \frac{1}{\epsilon}$  ENTONCES  $\alpha_k = \delta$

**Paso 3:**  $\lambda = \frac{1}{\alpha_k}$

**Paso 4:** Búsqueda lineal no monótona:

SI  $f(x_k - \lambda \nabla f(x_k)) \leq \max_{0 \leq j \leq \min(k, M)} f(x_{k-j}) - \gamma \lambda \nabla f(x_k)^t \nabla f(x_k)$  ENTONCES  
 $\lambda_k = \lambda$ ; IR al Paso 5

SI  $f(x_k - \lambda \nabla f(x_k)) > \max_{0 \leq j \leq \min(k, M)} f(x_{k-j}) - \gamma \lambda \nabla f(x_k)^t \nabla f(x_k)$  ENTONCES  
 $\gamma \in [\gamma_1, \gamma_2]$ ,  $\lambda_k = \gamma \lambda$ ; IR al Paso 4

**Paso 5:**  $\alpha_{k+1} = \frac{-\nabla f(x_k)^t y_k}{\lambda_k \nabla f(x_k)^t \nabla f(x_k)}$ ;  $k = k + 1$ ; IR al Paso 1

#### 10.5.4. Convergencia del método de gradiente espectral globalizado.

TEOREMA 10.5. Sea  $f : R^n \rightarrow R$  y se quiere resolver  $\min_{x \in \Omega_0 \subseteq R^n} f(x)$  cumpliéndose que  $\Omega_0 = \{x : f(x) \leq f(x_0)\}$  es acotada, y el número de puntos estacionarios en  $\Omega_0$  es finito.

Entonces se cumple que si  $\{x_k\}$  es la sucesión generada por el método de gradiente espectral globalizado, ocurrirá una de las tres situaciones siguientes:

1.  $\nabla f(x_j) = 0$  para algún  $j$ .
2.  $\lim_{k \uparrow \infty} \|\nabla f(x_k)\| = 0$ .
3. Ningún punto límite de  $\{x_k\}$  es un mínimo local de  $f$ .

## Bibliografia

- [1] M. BAZARAA, H. SHERALI and C. SHETTY, *Nonlinear Programming, Theory and Applications*, John Wiley & Sons, New York, second ed., 1993. T57.8 B39.
- [2] D. P. BERTSEKAS, *Nonlinear Programming*, Athena Scientific, Belmont, Mass, 1995. T57.8 B47.
- [3] J. E. DENNIS and R. B. SCHNABEL, *Numerical Methods for Unconstrained Optimization*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, Nj, 1983. Reprinted by SIAM Publications, 1993. QA402.5 D44.
- [4] R. FLETCHER, *Practical Methods of Optimization*, John Wiley & Sons, New York, second ed., 1987. QA402.5 F57
- [5] D. LUENBERGER, *Introduction to Linear and Nonlinear Programming*, Addison Wesley, second ed., 1984. T57.7 B47.
- [6] J. NOCEDAL and S. J. WRIGHT, *Numerical Optimization*, Springer Series in Operations Research, 1999. QA 402.5 N62