

**UNIVERSIDAD CENTROCCIDENTAL
"LISANDRO ALVARADO"**

Decanato de Ciencias y Tecnología
Licenciatura en Ciencias Matemáticas



**"UNA ESTRATEGIA PARA ACELERAR EL MÉTODO DEL
GRADIENTE PARA OPTIMIZACIÓN SIN
RESTRICCIONES."**

TRABAJO ESPECIAL DE GRADO PRESENTADO POR

DAYANA LEAL

COMO REQUISITO FINAL
PARA OBTENER EL TÍTULO DE LICENCIADO
EN CIENCIAS MATEMÁTICAS
ÁREA DE CONOCIMIENTO: **OPTIMIZACIÓN**
TUTOR: PROF. JOSÉ MEZA



Universidad Centroccidental
 "Lisandro Alvarado"
 Decanato de Ciencias y Tecnología
 Licenciatura en Ciencias Matemáticas



ACTA
 TRABAJO ESPECIAL DE GRADO

Los suscritos miembros del Jurado designados por el Jefe del Departamento de Matemáticas del Decanato de Ciencias y Tecnología de la Universidad Centroccidental "Lisandro Alvarado", para examinar y dictar el veredicto sobre el Trabajo Especial de Grado titulado:

"UNA ESTRATEGIA PARA ACELERAR EL MÉTODO DEL GRADIENTE PARA OPTIMIZACIÓN SIN RESTRICCIONES."

Presentado por el ciudadano DAYANA LEAL titular de la Cédula de Identidad N° 20666623. Con el propósito de cumplir con el requisito académico final para el otorgamiento del título de Licenciado en Ciencias Matemáticas.

Luego de realizada la Defensa y en los términos que imponen los Lineamientos para el Trabajo Especial de Grado de la Licenciatura en Ciencias Matemáticas, se procedió a discutirlo con el interesado habiéndose emitido el veredicto que a continuación se expresa:

1 _____

Con una calificación de _____ puntos.

En fe de lo expuesto firmamos la presente Acta en la Ciudad de Barquisimeto a los _____ días del mes de _____ de _____.

 TUTOR

 FIRMA

 JURADO

 FIRMA

 JURADO

 FIRMA

OBSERVACIONES:

¹ Aprobado ó Reprobado

Universidad Centroccidental

“Lisandro Alvarado”

**“UNA ESTRATEGIA PARA ACELERAR EL MÉTODO DEL
GRADIENTE PARA OPTIMIZACIÓN SIN
RESTRICCIONES.”**

Dayana Leal

Tutor: Prof. José Meza

RESUMEN

Siempre se ha señalado que el mal comportamiento en el método de Cauchy [2] se debe a la dirección del gradiente negativo, sin embargo con el pasar de los tiempos se han realizado muchos estudios con el fin de mejorar el método del gradiente, en los cuales se han determinado que el mal comportamiento del método no se debe a su dirección, sino en la forma como se escoge el tamaño de paso. Han ido desarrollándose diversos trabajos en los cuales en la mayoría se quiere mejorar la búsqueda lineal de Armijo. La motivación principal es acelerar el radio de convergencia relacionados con los métodos de descenso. En este trabajo se desarrolla el método presentado en [3], en el cual se introduce una aceleración al método del gradiente, modificando la longitud de paso mediante el producto de un parámetro positivo θ_k de tal manera que permita mejorar sustancialmente el método del gradiente.

AGRADECIMIENTOS

Primeramente agradezco a Dios todopoderoso por haberme dado la dicha de culminar mi trabajo de grado, lo cual me llena de gran alegría y satisfacción, por permitirme vivir y disfrutar de cada día.

Gracias a mi familia, Alicia Rodríguez y José Rafael Leal, mis padres, quienes me apoyaron en cada decisión y proyecto, por creer y confiar en mí, y quienes dieron desde un principio todo lo posible por continuar mis estudios universitario.

A mi hermana Karen Leal, por su apoyo y amor incondicional a largo de mi carrera.

A Maurizio Calderaro, mi novio y compañero de vida, quien formó parte de esta trayectoria dando su apoyo en cada momento difícil y supo dar palabras de alientos para continuar el camino.

A los que ya no están en este mundo físicamente, a mi abuela y prima, que en su momento estuvieron ahí dando su amor y apoyo.

A mi gran amiga Karelys Cáceres, quien desde el principio de la carrera estuvo en cada momento bueno y no tan bueno, de sacrificios juntas y dándome su apoyo incondicional, su amistad sincera y valiosa, te agradezco cada palabra de motivación. También a mis demás amigos y compañeros que formaron parte importante a lo largo de esta trayectoria, a ellos le agradezco su cariño y apoyo; a Víctor, Carlos López, Carlos Aular, Luis, Erianny, Ronny, Natasha, Mahikiel, Junior, a ustedes, gracias de corazón.

A mi tutor José Meza, le agradezco por aceptar realizar este trabajo de grado bajo su dirección, por su apoyo y confianza, por su paciencia y dedicación, su comprensión, sinceramente gracias. Y a todos los demás profesores que formaron parte fundamental en cada curso dado, a ellos le agradezco mi formación académica.

Finalmente, todos formaron parte esencial en mi camino y así poder lograr la culminación de este trabajo.

“Desde lo más profundo de mi alma, gracias...”

ÍNDICE

Agradecimientos	i
Introducción	1
Capítulo 1. Conceptos y Métodos Básicos	3
1.1. Conceptos y Teoremas Básicos	3
1.2. Métodos de direcciones de descensos	8
1.3. Métodos clásicos de descenso	11
1.3.1. Método del Gradiente	11
1.3.2. Método de Newton	13
1.3.3. Métodos Cuasi-Newton	15
Capítulo 2. Aceleración de un método de descenso	18
2.1. Búsqueda Lineal Inexacta	19
2.2. Método del Gradiente Acelerado	21
Capítulo 3. Pruebas Numéricas	28
Capítulo 4. Conclusiones	32
Referencias	33
Apéndice A. Funciones de prueba	36

INTRODUCCIÓN

Uno de los primeros y muy conocidos métodos para la optimización sin restricciones

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad (0.0.1)$$

donde $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ es una función convexa y diferenciable de forma continua, es el método de descenso gradiente, diseñado por Cauchy a principios de 1847. En este método, la dirección del gradiente negativo se utiliza para encontrar los minimizadores locales. El algoritmo comienza con un punto inicial $x_0 \in \text{Dom}(\mathbb{R}^n)$ y genera una sucesión de puntos de acuerdo con el siguiente procedimiento iterativo:

$$x_{k+1} = x_k + t_k d_k, \quad k = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (0.0.2)$$

donde t_k es el tamaño de paso y $d_k = -g_k = -\nabla f(x_k)$. La dirección de búsqueda d_k generalmente requiere satisfacer : $g_k^T d_k < 0$.

El método demostró ser eficaz para funciones muy bien acondicionadas, pero para funciones mal acondicionadas es excesivamente lento, por lo que no tiene valor práctico. Incluso para las funciones cuadráticas el método de descenso de gradiente con búsqueda lineal exacta se comportan cada vez peor cuando el número de condición de la matriz se deteriora. Los primeros intentos de aumentar el rendimiento del método han sido considerados por Humphrey [16], Forsythe [8] y Schinzinger [14]. Como sabemos, en el punto actual x_k la dirección del gradiente negativo es la mejor dirección de búsqueda de un minimizador de la función f , y esta es la dirección del método de descenso de gradiente. Sin embargo, tan pronto como nos movemos en esta dirección, cesa a ser el mejor y seguir deteriorandose hasta que se convierte ortogonal a $-\nabla f(x_k)$. Es decir, el método comienza a dar pequeños pasos sin avanzar mínimo. Este es el principal inconveniente del método de descenso de gradiente, los pasos que toma son demasiado largos, esto es, hay algunos otros puntos z_k en el segmento de línea que conectan x_k y x_{k+1} donde $-\nabla f(x_k)$ proporciona una mejor dirección de búsqueda $-\nabla f(x_{k+1})$.

El propósito de este trabajo es presentar una aceleración del método de descenso gradiente. La idea es modificar el tamaño de paso t_k (calculada por retroceso) por medio de un parámetro positivo θ_k de una manera multiplicativa de tal manera que mejore el comportamiento del algoritmo de gradiente clásico. Se demuestra que el algoritmo resultante es lineal convergente, pero la reducción en el valor de la función se mejora significativamente.

El resto de este trabajo se organiza de la siguiente manera:

Capítulo 1: Preliminares, en este capítulo se enuncian algunas definiciones básicas, teoremas y métodos fundamentales en la teoría de optimización, los cuales servirán de base a los posteriores capítulos. Capítulo 2: Se presenta la búsqueda lineal con retroceso y probar que la regla de Armijo en un esquema de retroceso genera tamaños de paso limitados lejanos a cero. En 2.2 se presenta el algoritmo acelerado de descenso gradiente acelerado. Se muestra que el algoritmo acelerado con retroceso reduce los valores de la función con un factor menor que el correspondiente del algoritmo clásico de descenso gradiente. Capítulo 3: Se muestran los resultados numéricos y comparaciones que se obtienen al implementar el algoritmo AGD y por último se presentan las conclusiones de los resultados obtenidos.

CAPÍTULO 1

CONCEPTOS Y MÉTODOS BÁSICOS

Dada la función $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ diferenciable, el problema que consideramos es

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \tag{1.0.1}$$

que denominamos minimización irrestricta.

Para comenzar nuestro estudio de la solución de problemas de minimización irrestricta, es necesario establecer las definiciones, teoremas y métodos básicos que permiten fundamentar las ideas que desarrollamos. Excelentes referencias para este material son los libros presentados por: J. Nocedal y S. J. Wright [18], E. Polak [11] y J. Dennis y R. Schnabel [6].

§1.1. CONCEPTOS Y TEOREMAS BÁSICOS

DEFINICIÓN 1.1.1. (Norma Euclidiana). La norma l_2 o Euclidiana de $x = (x_1, \dots, x_n)^t \in \mathbb{R}^n$ que se denota con $\|\cdot\|$, esta definida como:

$$\|x\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2}.$$

La norma Euclidiana de una matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ está definida como:

$$\|A\| = \sup_{x \in \mathbb{R}^n, x \neq 0} \left\{ \frac{\|Ax\|}{\|x\|} \right\}.$$

DEFINICIÓN 1.1.2 (Producto interno). Sean $v, w \in \mathbb{R}^n$; el producto interno de v y w está definido por

$$\langle v, w \rangle = v^t w = \sum_{i=1}^n v_i w_i = \|v\| \cdot \|w\| \cos(\theta)$$

donde θ es el ángulo entre v y w , si $v \neq 0$ y $w \neq 0$.

DEFINICIÓN 1.1.3. Una función continua $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ es continuamente diferenciable en $x \in \mathbb{R}^n$, si $(\partial f / \partial x_i)(x)$ existe y es continua, $i = 1, \dots, n$; entonces el gradiente de f en x esta definido como

$$\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(x), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(x) \right)^t.$$

La función f es continuamente diferenciable en un conjunto abierto $D \subset \mathbb{R}^n$, denotado por $f \in C^1(D)$, si ella es continuamente diferenciable en cada punto de D .

DEFINICIÓN 1.1.4. Sea $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ una función continuamente diferenciable y sea $x^* \in \mathbb{R}^n$.

- Diremos que x^* es un MÍNIMO LOCAL de f si existe una vecindad V_ϵ de x^* tal que:
 $f(x^*) \leq f(x)$, para todo $x \in V_\epsilon$.
- Diremos que x^* es un MÍNIMO LOCAL ESTRICTO de f si existe una vecindad V_ϵ de x^* tal que:
 $f(x^*) < f(x)$, para todo $x \in V_\epsilon$.
- Diremos que x^* es un MÍNIMO LOCAL AISLADO de f si existe una vecindad V_ϵ de x^* tal que x^* es el único mínimo local en V_ϵ .
- Diremos que x^* es un MÍNIMO GLOBAL de f si, y sólo si $f(x^*) \leq f(x)$, para todo $x \in \mathbb{R}^n$.

DEFINICIÓN 1.1.5. Sea $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ una función continuamente diferenciable y sea $x^* \in \mathbb{R}^n$.

- Diremos que x^* es un MÁXIMO LOCAL de f si, y sólo si x^* es un MÍNIMO LOCAL de $-f$.
- Diremos que x^* es un MÁXIMO GLOBAL de f si, y sólo si x^* es un MÍNIMO GLOBAL de $-f$.

DEFINICIÓN 1.1.6. Sea A una matriz simétrica de orden $n \times n$ entonces:

- Diremos que A es DEFINIDA POSITIVA si para todo $P \neq 0$, se cumple:

$$P^t A P > 0.$$

- Diremos que A es SEMIDEFINIDA POSITIVA si para todo $P \neq 0$, se cumple:

$$P^t A P \geq 0.$$

- Diremos que A es DEFINIDA NEGATIVA si para todo $P \neq 0$, se cumple:

$$P^t A P < 0.$$

- Diremos que A es SEMIDEFINIDA NEGATIVA si para todo $P \neq 0$, se cumple:

$$P^t A P \leq 0.$$

- Diremos que A es INDEFINIDA si no entra en ninguna de las clasificaciones anteriores.

DEFINICIÓN 1.1.7. (Hessiano) Sea $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ una función cuyas segundas derivadas parciales existen, se define la matriz Hessiana de f en x , como $H(x) = \nabla^2 f(x)$ una matriz $n \times n$ cuyo elemento i, j esta dado por

$$H(x)_{ij} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x), \quad 1 \leq i, j \leq n$$

DEFINICIÓN 1.1.8. (Conjunto Convexo). Sea C un subconjunto de \mathbb{R}^n , C se dice convexo si y sólo si $\forall x, y \in C$, se tiene que:

$$\alpha x + (1 - \alpha)y \in C, \quad \forall \alpha \in (0, 1).$$

Es decir, un conjunto es convexo, cuando el segmento de recta que une a cualquier par de puntos del conjunto está totalmente contenida en éste.

DEFINICIÓN 1.1.9. Una función f definida en un conjunto convexo $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ se llama convexa, si para todo $x, \tilde{x} \in \Omega$ y todo $\alpha, 0 \leq \alpha \leq 1$, se cumple:

$$f(\alpha x + (1 - \alpha)\tilde{x}) \leq \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(\tilde{x})$$

o equivalentemente,

$$f(\alpha x + (1 - \alpha)\tilde{x}) \leq f(\tilde{x}) + \alpha(f(x) - f(\tilde{x}))$$

Si, además para todo $\alpha, 0 < \alpha < 1$ y $x \neq \tilde{x}$, se cumple:

$$\begin{aligned} f(\alpha x + (1 - \alpha)\tilde{x}) &< \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(\tilde{x}) \\ &= f(\tilde{x}) + \alpha(f(x) - f(\tilde{x})) \end{aligned}$$

Entonces, se dice que f es estrictamente convexa.

TEOREMA 1.1.1. Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ un conjunto convexo y sea $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ de clase C^2 .

- Si la matriz hessiana $\nabla^2 f(x)$ es semidefinida (definida) positiva para todo $x \in \Omega$, entonces f es convexa (estrictamente).
- Si $\Omega = \mathbb{R}^n$ y f es convexa (estrictamente), entonces $\nabla^2 f(x)$ es semidefinida (definida) positiva.
- Si $f(x) = x^t Q x$, $Q \in \mathbb{M}_{n \times n}$, f es convexa si y sólo si Q es semidefinida positiva.

TEOREMA 1.1.2. Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ un conjunto convexo y $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ una función convexa.

- Cualquier mínimo local $x^* \in \Omega$, es un mínimo global de f . Además, si f es diferenciable, entonces todo punto estacionario x^* es un mínimo global de f .
- Si f es estrictamente convexa, existe a lo sumo un mínimo.

TEOREMA 1.1.3. Sea $f \in C^2$, $x^* \in \mathbb{R}^n$. Sea x^* un punto estacionario y $\nabla^2 f(x^*)$ es una matriz indefinida. Entonces, x^* es un punto silla.

TEOREMA 1.1.4 (Condición necesaria de optimalidad de primer orden). Sea $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ una función continuamente diferenciable en una vecindad $\Omega \subset \mathbb{R}^n$. Diremos que $x^* \in \Omega$ es un mínimo local de f entonces $\nabla f(x^*) = 0$.

Demostración:

Supongamos, por el absurdo, que $\nabla f(x^*) \neq 0$

Definamos el vector $p = -\nabla f(x^*)$, el cual satisface la definición de dirección de descenso. En efecto,

$$p^T \nabla f(x^*) = -\nabla f^T(x^*) \nabla f(x^*) = -\|\nabla f(x^*)\|^2 < 0$$

como f es continua, existe un escalar $s > 0$ tal que

$$p^T \nabla f(x^* + \alpha p) < 0, \quad \forall \alpha \in [0, s]$$

Haciendo $x = x^* + \bar{\alpha} p$, para cualquier $\bar{\alpha} \in (0, s]$ y algún $\alpha \in (0, \bar{\alpha})$, tenemos por Teorema de Taylor:

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x^* + \bar{\alpha} p) \\ &= f(x^*) + \bar{\alpha} p^T \nabla f(x^* + \alpha p) \end{aligned}$$

Por lo tanto,

$$f(x) < f(x^*), \forall \bar{\alpha} \in (0, s]$$

Esto contradice la hipótesis de que x^* es un mínimo local.

En conclusión,

$$\nabla f(x^*) = 0 \quad \square$$

TEOREMA 1.1.5 (Condición necesaria de optimalidad de segundo orden). Sea $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ de clase C^2 en una vecindad $\Omega \subset \mathbb{R}^n$. Diremos que $x^* \in \Omega$ es un mínimo local de f , entonces $\nabla f(x^*) = 0$ y $\nabla^2 f(x^*)$ es semidefinida positiva.

Demostración:

Como f es continuamente diferenciable en una vecindad del mínimo local x^* , por el teorema anterior se cumple que $\nabla f(x^*) = 0$.

Ahora, supongamos por absurdo, que $\nabla^2 f(x^*)$ no es semidefinida positiva

Así, podemos escoger un vector p tal que:

$$p^T \nabla^2 f(x^*) p < 0$$

Como f es continua en una vecindad de x^* , existe un escalar $T > 0$ tal que:

$$p^T \nabla^2 f(x^* + tp) p < 0, \forall t \in [0, T]$$

Haciendo la expansión de la serie de Taylor a x^* , para todo $\bar{t} \in (0, T]$ y algún $t \in (0, \bar{t})$ se tiene:

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

Por lo tanto,

$$f(x) < f(x^*) \quad (\text{Haciendo } x = x^* + \bar{t}p, \forall \bar{t} \in (0, T])$$

Esto contradice el hecho de que x^* sea el mínimo local.

Así que, $\nabla^2 f(x^*)$ es semidefinida positiva. \square

TEOREMA 1.1.6 (Condición suficiente de optimalidad de segundo orden). *Supongamos que $\nabla^2 f$ es continua en una vecindad de $x^* \in \mathbb{R}^n$, y que $\nabla f(x^*) = 0$ es definida positiva. Entonces, x^* es un mínimo local estricto de f .*

Demostración:

Ya que $\nabla^2 f(x)$ es continuo y definido positivo en x^* , podemos escoger un radio $r > 0$ tal que $\nabla^2 f(x)$ es definido positivo para todo x que pertenezca a la bola abierta $D(x^*, r) = \{z \in \mathbb{R}^n / \|z - x^*\| < r\}$.

Tomando cualquier vector p con $\|p\| < r$, se tiene que $x^* + p \in D$. En efecto,

$$\|x^* + p - x^*\| = \|p\| < r$$

Así, por expansión de Taylor y ya que $\nabla f(x^*) = 0$ tenemos:

$$\begin{aligned} f(x^* + p) &= f(x^*) + p^T \nabla f(x^*) + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(z) p \\ &= f(x^*) + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(z) p \end{aligned}$$

Donde $z = x^* + tp$ para algún $t \in (0, 1)$.

Dado que $z \in D$, se tiene que $p^T \nabla^2 f(z) p > 0$,

Por lo tanto,

$$f(x^* + p) > f(x^*)$$

En conclusión, x^* es un mínimo local estricto de f . \square

DEFINICIÓN 1.1.10 (Orden de Convergencia). Sea la sucesión $\{x_k\} \in \mathbb{R}^n$ convergente a x^* . Se define el orden de convergencia de dicha sucesión como el máximo de $p \in \mathbb{N}$ que satisfagan :

$$0 \leq \limsup_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|^p} < \infty$$

OBSERVACIÓN (Tipos de Convergencia). Si la sucesión $\{x_k\} \in \mathbb{R}^n$ converge a x^* de manera que:

- Se tiene que la sucesión converge Q–linealmente si existe una constante $r \in (0, 1)$ tal que $\frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|} \leq r$, para toda k suficientemente grande.
- La sucesión converge R–linealmente si existe una secuencia de escalares no–negativos tal que $\|x_k - x^*\| \leq V_k$ para toda k , y $\{V_k\}$ convergiendo Q–linealmente a cero.

- $\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|} = \beta < 1$, la sucesión converge linealmente a x^* con tasa de convergencia β .
- $\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|} = 0$, la sucesión converge superlinealmente.
- $\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|^2} = c < \infty$, la sucesión converge cuadráticamente.

DEFINICIÓN 1.1.11. Sea $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ una función diferenciable, $x^* \in \mathbb{R}^n$. Diremos que x^* es un punto estacionario de f si, y sólo si $\nabla f(x^*) = 0$.

DEFINICIÓN 1.1.12. Sea f una función diferenciable, $x^* \in \mathbb{R}^n$.

- Si x^* satisface $\nabla f(x^*) = 0$ y $\nabla^2 f(x^*)$ es definida positiva, entonces x^* es un mínimo local no singular.
- Si x^* satisface $\nabla f(x^*) = 0$ y $\nabla^2 f(x^*)$ es semidefinida positiva, entonces x^* es un mínimo local singular.

TEOREMA 1.1.7. *Todo mínimo local no singular es localmente único.*

DEFINICIÓN 1.1.13. Una ecuación como

$$a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_nx_n = b,$$

donde a_1, a_2, \dots, a_n, b son números dados en un cuerpo conmutativo \mathbb{K} , recibe el nombre de **ecuación lineal de n incógnitas** x_1, x_2, \dots, x_n . Los escalares a_1, a_2, \dots, a_n se nombran como **coeficientes de la ecuación** y el b como **término independiente**. Si $b = 0$, la ecuación se dice **homogénea**, mientras que si $b \neq 0$ se dice que es **completa**.

Una solución de la ecuación es un conjunto ordenados de números $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$, tales que al tomar $x_j = \xi_j$, la ecuación se convierte en una igualdad verdadera.

DEFINICIÓN 1.1.14. Sea $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ una función cualquiera se denomina sistema de ecuaciones no lineales a la ecuación

$$f(x) = 0$$

En otras palabras, consiste en encontrar al menos un punto x^* perteneciente a \mathbb{R}^n tal que $f(x^*) = 0$.

§1.2. MÉTODOS DE DIRECCIONES DE DESCENSOS

Consideremos el problema:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$$

donde f es una función diferenciable en todo $x \in \mathbb{R}^n$.

Este problema se puede resolver aplicando los métodos de descenso. Estos métodos generan una sucesión de puntos que van reduciendo el valor de la función objetivo, más formalmente generan una sucesión $\{x_k\}_{k \geq 1}$ que cumple $f(x_1) > f(x_2) > \dots > f(x_k) > \dots$. Dichos procedimientos terminan cuando se satisface algún criterio de parada.

La familia más importante de estos métodos son los llamados métodos de dirección de descenso, los cuales constan de dos pasos fundamentales. En el primero se selecciona una dirección de descenso y en el segundo se calcula el desplazamiento a lo largo de esa dirección. Estos métodos están definidos por el algoritmo iterativo:

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

Donde α_k es un escalar no-negativo que minimiza a $f(x_k + \alpha d_k)$, $\alpha \geq 0$, y d_k es una dirección de descenso.

DEFINICIÓN 1.2.1. Sea $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ y $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$. Diremos que $d \in \mathbb{R}^n$ es una dirección de descenso de f en \bar{x} si y sólo si existe $\bar{\alpha} > 0$ tal que $f(\bar{x} + \bar{\alpha}d) < f(\bar{x})$ para todo $\bar{\alpha} \in (0, \bar{\alpha})$.

TEOREMA 1.2.1 (Caracterización de direcciones de descenso mediante el vector gradiente).
Sea $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ de clase C^1 en $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$. Sea d un vector de \mathbb{R}^n . Diremos que d es una dirección de descenso de f en \bar{x} si y sólo si

$$\nabla f(\bar{x})^t d < 0.$$

Demostración:

Supongamos que d es dirección de descenso de f en \bar{x} .

Así, por definición, existe $\alpha > 0$ tal que $f(\bar{x} + \alpha d) < f(\bar{x})$.

Luego, utilizando expansión de Taylor de orden 1, tenemos

$$f(\bar{x} + \alpha d) = f(\bar{x}) + \alpha \nabla f(\bar{x})d + o(\alpha)$$

Entonces;

$$0 > f(\bar{x} + \alpha d) - f(\bar{x}) = \alpha(\nabla f(\bar{x})d + \frac{o(\alpha)}{\alpha}) \text{ esto implica que } \nabla f(\bar{x})d + \frac{o(\alpha)}{\alpha} < 0.$$

Pero, $\frac{o(\alpha)}{\alpha} \rightarrow 0$ cuando $\alpha \rightarrow 0$. Es decir, para un ϵ dado, existe un α tal que $\frac{o(\alpha)}{\alpha}$ puede hacerse muy pequeño.

Por tanto,

$$\nabla f(\bar{x})d < 0$$

Recíprocamente, supongamos que $\nabla f(\bar{x})d < 0$.

Igualmente por expansión de Taylor,

$$f(\bar{x} + \alpha d) - f(\bar{x}) = \alpha(\nabla f(\bar{x})d + \frac{o(\alpha)}{\alpha}).$$

Como $\nabla f(\bar{x})d < 0$ y por argumentación anterior $\frac{o(\alpha)}{\alpha}$ puede hacerse muy pequeño. Podemos decir que, existe α tal que $f(\bar{x} + \alpha d) < f(\bar{x})$
 Por tanto, d es dirección de descenso de f en \bar{x} . \square

Hay una estructura fundamental subyacente para casi todos los algoritmos de direcciones de descensos que se analizan. Se comienza en un punto inicial, se determina, de acuerdo a una regla fija, una dirección de movimiento y después se sigue esa dirección hacia un mínimo (relativo) de la función objetivo de esa recta. En el punto nuevo se determina una nueva dirección, y se repite el proceso. Las diferencias entre algoritmos radican en la regla mediante la cual se seleccionan las direcciones sucesivas del movimiento. Una vez que se ha hecho la selección, todos los algoritmos exigen movimiento hacia el punto mínimo de la recta correspondiente. Este proceso de determinar el punto mínimo de una recta dada se denomina **Búsqueda lineal** y al seleccionar el movimiento más corto en una dirección a lo largo de la recta se denomina **Búsqueda lineal exacta**.

En la práctica es difícil obtener el punto mínimo en un algoritmo de búsqueda lineal exacta. De hecho, a veces es conveniente sacrificar la precisión en la rutina de búsqueda lineal en favor del tiempo total de computación. En general, la imprecisión se introduce en un algoritmo de búsqueda lineal simplemente con terminar el procedimiento de búsqueda antes de que converja. La naturaleza exacta de la imprecisión introducida puede, entonces, depender de la técnica de búsqueda especial empleada y del criterio utilizado para terminar la búsqueda. A este proceso inexacto de determinar el punto mínimo se le denomina **búsqueda lineal imprecisa**.

Hay varias alternativas de reglas de búsqueda lineal para elegir α_k a lo largo de la recta $S = x_k + \alpha d_k, \alpha > 0$. A saber:

(A) Regla de Minimización. En cada iteración, α_k se selecciona de manera que

$$\alpha_k = \arg \min_{\alpha > 0} f(x_k + \alpha d_k) \tag{1.2.1}$$

(B) la regla de minimización aproximada. En cada iteración, una k se selecciona de manera que

$$\alpha_k = \min\{\alpha | g(x_k + \alpha d_k)^T d_k = 0, \alpha > 0\} \tag{1.2.2}$$

(C) la regla de Armijo. Sean los escalares s_k, γ, L y σ con $s_k = -\frac{g_k^T d_k}{L \|d_k\|^2}, \gamma \in (0,1), L > 0$ y $\sigma \in (0, \frac{1}{2})$. Sea α_k el más grande α en $\{s_k, \gamma s_k, \gamma^2 s_k, \dots\}$ de tal manera que

$$f_k - f(x_k + \alpha d_k) \geq -\sigma \alpha g_k^T d_k. \tag{1.2.3}$$

(D) Regla de Minimización limitada. Sea $s_k = -\frac{g_k^T d_k}{L\|d_k\|^2}$ donde α_k es definido por

$$\alpha_k = \arg \min_{\alpha \in [0, s_k]} f(x_k + \alpha d_k) \quad (1.2.4)$$

y $L > 0$ es una constante dada.

(E) Regla de Goldstein. Un escalar fijo $\sigma \in (0, \frac{1}{2})$ es seleccionado, y α_k se elige con el fin de satisfacer

$$\sigma \leq \frac{f(x_k + \alpha_k d_k) - f_k}{\alpha_k g_k^T d_k} \leq 1 - \sigma \quad (1.2.5)$$

(F) Regla Fuerte Wolfe. En la k -ésima iteración, α_k satisface al mismo tiempo

$$f_k - f(x_k + \alpha_k d_k) \geq -\sigma \alpha_k g_k^T d_k \quad (1.2.6)$$

y

$$|g(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k| \leq -\beta g_k^T d_k, \quad (1.2.7)$$

donde $\sigma \in (0, \frac{1}{2})$ y $\beta \in (\sigma, 1)$

(G) Regla de Wolfe. En la k -ésima iteración, α_k satisface (12) y

$$g(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k \geq \beta g_k^T d_k \quad (1.2.8)$$

§1.3. MÉTODOS CLÁSICOS DE DESCENSO

§1.3.1. Método del Gradiente

El conjunto de direcciones de descenso a partir de un punto x tal que $\nabla f(x) \neq 0$ es siempre no vacío, ya que al menos podemos definir la dirección $d = -\nabla f(x)$, esta dirección cumple con la condición, $\nabla f(x)^T d = -\nabla f(x)^T \nabla f(x) = -\|\nabla f(x)\|^2 < 0$, es de descenso. Esta dirección es conocida como la dirección de gradiente negativo, es la que garantiza más rápido descenso local de la función f y es de vital importancia en optimización. Además, fue la dirección usada por Cauchy [2], en lo que pareciera ser el primer método computacional propuesto en el caso multivariable. Este método es conocido como el método de Cauchy, también conocido como el método clásico del gradiente o como el método de máximo descenso. El algoritmo se puede describir de la siguiente manera,

Algoritmo 1 Método de Cauchy

Entrada: Dado $x_0 \in \mathbb{R}^n$. Sea $k = 0$

Salida: x_k

- 1: **mientras** $\|\nabla f(x_k)\| \neq 0$ **hacer**
- 2: Calcular $d_k = -\nabla f(x_k)$
- 3: Determinar (Búsqueda lineal exacta)
- 4: $\alpha_k = \arg \min_{\alpha \geq 0} f(x_k + \alpha d_k)$
- 5: $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$, $k = k + 1$
- 6: **fin mientras**

Para estudiar el radio de convergencia de este método, consideremos el caso ideal en el que la función objetivo es cuadrática.

Consideremos la función cuadrática dada por,

$$f(x) = \frac{1}{2}x^t Ax - x^t b + c \quad (1.3.1)$$

donde $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ es una matriz simétrica definida positiva, $x, b \in \mathbb{R}^n$ y $c \in \mathbb{R}$.

El gradiente de f esta dado explícitamente por, $g(x) = \nabla f(x) = Ax - b$. Para determinar la búsqueda lineal exacta en el algoritmo 6, definamos $g_k = \nabla f(x_k)$ entonces al evaluar $x_k - \alpha g_k$ en (1.3.1), se tiene:

$$f(x_k - \alpha g_k) = \frac{1}{2}(x_k - \alpha g_k)^t A(x_k - \alpha g_k) - (x_k - \alpha g_k)^t b + c.$$

Derivando f con respecto a α , resulta:

$$\frac{d}{d\alpha} f(x_k - \alpha g_k) = -g_k^t A x_k + \alpha g_k^t A g_k + g_k^t b,$$

Igualando a cero y despejando α , nos queda:

$$\frac{d}{d\alpha} f(x_k - \alpha g_k) = 0 \iff \alpha = \frac{g_k^t g_k}{g_k^t A g_k}.$$

Así, el método del Gradiente toma la forma explícita:

$$x_{k+1} = x_k - \left(\frac{g_k^t g_k}{g_k^t A g_k} \right) g_k, \quad \forall k \geq 0$$

donde $g_k = Ax_k - b$

Supongamos que f , alcanza su mínimo en x^* , para establecer la convergencia del método con la escogencia de este α_k , definimos la norma ponderada $\|x\|_A = x^T A x$ y como $\nabla f(x^*) = 0$, entonces tenemos que $Ax^* = b$. Así obtenemos que:

$$f(x) - f(x^*) = \frac{1}{2} \|x - x^*\|_A^2.$$

Por simplicidad introduzcamos la siguiente notación, $E(x) = \frac{1}{2} \|x - x^*\|_A^2$

Lema 1.3.1 (Desigualdad de Kantorovich). Sea $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ es una matriz simétrica definida positiva. Entonces $\forall x \neq 0$,

$$\frac{(x^T x)^2}{(x^T A x)(x^T A^{-1} x)} \geq \frac{4\lambda_{\min}\lambda_{\max}}{(\lambda_{\min} + \lambda_{\max})^2},$$

donde λ_{\min} y λ_{\max} representan el menor y mayor autovalor de A respectivamente.

Lema 1.3.2. En el método de Cauchy aplicado a cuadráticas estrictamente convexas se cumple,

$$E(x_{k+1}) = \left(1 - \frac{(g_k^T g_k)^2}{(g_k^T A g_k)(g_k^T A^{-1} g_k)} \right) E(x_k)$$

TEOREMA 1.3.1. Sea $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ es una matriz simétrica definida positiva. Entonces la sucesión $\{x_k\}_{k \geq 0}$ generada por el método de Cauchy aplicado a $f(x)$ converge a x_* desde cualquier $x_0 \in \mathbb{R}$ y además cumple,

$$E(x_{k+1}) \leq \left(\frac{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}}{\lambda_{\max} + \lambda_{\min}} \right)^2 E(x_k).$$

La conclusión de este teorema se puede ver de la siguiente manera,

$$\|x_k - x^*\|_A \leq \left(\frac{K_2(A) - 1}{K_2(A) + 1} \right) \|x_{k-1} - x^*\|_A,$$

donde $K_2(A) = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}$. Nótese que a menos que λ_{\min} esté muy cercano a λ_{\max} , la velocidad predicha por este resultado puede ser muy lenta.

Si la función objetivo es cualquier función no lineal, la convergencia del método de máximo descenso depende fuertemente de las características de la función. En caso de que haya convergencia, ésta será lineal y la rapidez de convergencia se puede estimar a partir de los valores propios del Hessiano de la función objetivo, evaluados en el mínimo x^* .

§1.3.2. Método de Newton

Supongamos que la función $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ de clase C^2 , en una vecindad $V_{x^*} \subseteq \mathbb{R}^n$ que contiene el mínimo x^* de $f(x)$. Denotaremos por $f_k = f(x_k)$, $g_k = \nabla f(x_k)$ y $H_{f_k} = \nabla^2 f(x_k)$

Como vimos en la sección anterior, el método de máximo descenso es muy fácil de implementar computacionalmente pero, desgraciadamente, converge muy lentamente debido a que su orden de convergencia es lineal.

A continuación se estudiará el método de Newton que tiene convergencia cuadrática cerca del mínimo y esta diseñado para converger en una sola iteración cuando la función a minimizar es cuadrática. El método consiste en minimizar en cada iteración k una función cuadrática $G_k(x)$ que se obtiene al expandir en serie de Taylor a $f(x)$ alrededor de x_k hasta el segundo término. Es decir, $G_k(x)$ es igual a

$$G_k(x) = f_k + (x - x_k)^t g_k + \frac{1}{2} (x - x_k)^t H_{f_k} (x - x_k)$$

Para obtener el mínimo de $G_k(x)$, buscamos un punto crítico esto es

$$\nabla G_k(x) = g_k + H_{f_k}(x - x_k) = 0,$$

entonces el mínimo se alcanza es $x = x_k - (H_{f_k})^{-1}g_k$, siempre que el Hessiano de $f(x)$ en x_k sea positivo definido. Así, el método de Newton se define en cada iteración como el mínimo de la función $G_k(x)$, es decir

$$x_{k+1} = x_k - (H_{f_k})^{-1}g_k.$$

Algoritmo 2 Método de Newton

Entrada: Dado $x_0 \in V_{x^*}$. Sea $k = 0$

Salida: x_k

- 1: **mientras** $\|\nabla f(x_k)\| \neq 0$ **hacer**
 - 2: resolver el sistema $H_{f_k}d_k = -\nabla f(x_k)$
 - 3: $x_{k+1} = x_k + d_k$, $k = k + 1$
 - 4: **fin mientras**
-

Observamos que en cada iteración se escoge como dirección a $d_k = -(H_{f_k})^{-1}g_k$, ésta sería una dirección de descenso cuando la matriz H_{f_k} sea definida positiva. En efecto,

$$\nabla f(x_k)^t d_k = -\nabla f(x_k)^t (H_{f_k})^{-1} \nabla f(x_k) < 0,$$

por tanto, d_k es una dirección de descenso de $f(x)$ en x_k . Además, el método convergerá siempre que la vecindad V_{x^*} que contiene el mínimo de $f(x)$ sea suficientemente pequeña como para poder garantizar que el Hessiano, evaluado en cualquier punto de la vecindad, sea definido positiva.

Como el cálculo de la dirección de Newton requiere conocer el Hessiano, por lo que se clasifica a este, como un método tipo Hessiano en contraste con el método de Cauchy que es un método de gradiente, pues solo requiere esta información para calcular la dirección. La convergencia del método de Newton cuando la función $f(x)$ es no lineal se enuncia a continuación en el siguiente teorema.

TEOREMA 1.3.2. *Sea x^* un mínimo local de la función $f(x)$. Supongamos que*

1. *f es de clase C^2 en una vecindad $V_{x^*} \ni x^*$.*
2. *El Hessiano de f , en x^* , H_{f^*} , es definido positiva.*
3. *El punto inicial $x_0 \in V_{x^*}^\rho \subseteq V_{x^*}$, tal que $V_{x^*}^\rho \ni x^*$.*

Entonces la sucesión $\{x_k\}_{k \geq 0}$, definida por

$$x_{k+1} = x_k - (H_{f_k})^{-1}g_k,$$

converge a x^ y el orden de convergencia es dos.*

El teorema permite garantizar convergencia cuadrática siempre que el Hessiano de $f(x)$ sea positiva definida en alguna vecindad que contenga a x^* . Por ello, la convergencia en el caso general es local pues depende fuertemente de la vecindad que contenga a x^* que se seleccione. Es por esto que es difícil aplicar este método garantizando las hipótesis del teorema anterior. Más adelante estudiaremos como se puede globalizar este método, de forma que se pueda obtener convergencia a partir de cualquier valor inicial.

§1.3.3. Métodos Cuasi-Newton

Los métodos Cuasi-Newton, son algunos de los métodos más utilizados para la optimización no lineal. Se incorporan en muchas bibliotecas de software y son eficaces en la solución de una amplia variedad de pequeño a problemas de tamaño medio, en particular cuando el Hessiano es difícil de calcular. En los casos cuando el número de variables es grande, pueden preferirse otros métodos, sin embargo también son eficaces para resolver grandes problemas.

Hay muchos métodos Cuasi-Newton, pero todos ellos se basan en la aproximación del Hessiano $\nabla^2 f(x_k)$ por una matriz B_k que está disponible a un costo menor, es por ello que estos métodos son tipo Newton ya que generan una dirección de descenso tipo Newton, esta se obtiene resolviendo:

$$B_k d_k = -\nabla f(x_k)$$

es decir, de las ecuaciones de Newton se sustituye el Hessiano por B_k . Si la matriz B_k es definida positiva, entonces esto es equivalente a minimizar el modelo cuadrático

$$\min q(d) = f(x_k) + \nabla f(x_k)^T d + \frac{1}{2} d B_k d \quad (1.3.2)$$

Los diversos métodos Cuasi-Newton difieren en la elección de B_k .

Obsérvese, que hay varias ventajas de este enfoque. En primer lugar, una aproximación B_k se puede encontrar usando sólo información la primera derivada. En segundo lugar, la dirección de búsqueda se puede calcular utilizando sólo $O(n^2)$ operaciones (frente a $O(n^3)$ por el método de Newton). Hay también desventajas, pero son de menor importancia. Los métodos no convergen cuadráticamente, pero pueden converger superlinealmente. En la precisión de la aritmética computacional, no hay mucha diferencia práctica entre estas dos tasas de convergencia. Además, los métodos Cuasi-Newton todavía requieren el almacenamiento de la matriz, por lo que no se utilizan normalmente para resolver grandes problemas. Los Métodos cuasi-Newton son generalizaciones de un método para problemas unidimensionales llamados el método de la secante, este método utiliza la aproximación

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

en la formula del método de Newton $x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}$. Esta fórmula no se puede utilizar en el caso multidimensional porque implicaría la división por un vector, una operación definida. Esta condición

se redescrive en la forma

$$\nabla^2 f(x_k)(x_k - x_{k-1}) = \nabla f(x_k) - \nabla f(x_{k-1})$$

A partir de esta se obtiene la condición utilizada para definir la aproximaciones B_k :

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

Esta condición es llamada la ecuación secante.

Así, los métodos Cuasi-Newton generan una sucesión de iterados cuyo término general es:

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

La matriz B_k puede ser una aproximación de la hessiana de f vias diferencias finitas, o bien una actualización de la ecuación de la secante:

$$B_{k+1}s_k = y_k$$

donde, $s_k = x_{k+1} - x_k$ y $y_k = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)$.

Algoritmo 3 Método de Cuasi-Newton

Entrada: Dado $x_0 \in V_{x^*}$ y B_0 . Sea $k = 0$

Salida: x_k

- 1: **mientras** $\|\nabla f(x_k)\| \neq 0$ **hacer**
 - 2: resolver el sistema $B_k d_k = -\nabla f(x_k)$
 - 3: $x_{k+1} = x_k + d_k$,
 - 4: Calcular $s_k = x_{k+1} - x_k$ $y_k = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)$
 - 5: resolver el sistema $B_{k+1}s_k = y_k$, $k = k + 1$
 - 6: **fin mientras**
-

TEOREMA 1.3.3 (ver [18]). *Supongamos que f es de clase C^3 y que la sucesión generado por el algoritmo anterior, converge a un punto x^* tal que $\nabla f(x^*) = 0$ y $\nabla^2 f(x^*)$, es positivo definido. Entonces la sucesión x_k converge superlinealmente si sólo si se cumple que*

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|B_k - \nabla^2 f(x^*)d_k\|}{\|d_k\|} = 0$$

El teorema permite garantizar convergencia superlineal siempre que el Hessiano de $f(x)$ sea definida positiva en alguna vecindad que contenga a x^* . Por ello al igual que ocurre con el método de Newton, la convergencia en el caso general es local pues también depende fuertemente de la vecindad que contenga a x^* que se seleccione. Es por esto que es difícil aplicar este método garantizando las hipótesis del teorema anterior. Más adelante estudiaremos como se puede globalizar estos tipos de métodos, de forma que se pueda obtener convergencia a partir de cualquier valor inicial.

A continuación tres de las fórmulas más populares para la actualización de la aproximación del hessiano B_{k+1} :

- Fórmula de Powell simétrica Broyden (PSB)

$$B_{k+1} = B_k + (y_k - B_k s_k) s_k^T + \frac{s_k (y_k - B_k s_k)^T}{s_k^T s_k} - \frac{s_k^T (y_k - B_k s_k)}{(s_k^T s_k)^2} s_k s_k^T$$

- Fórmula de Davidon–Fletcher–Powell (DFP)

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(y_k - B_k s_k) y_k^T + y_k (y_k - B_k s_k)^T}{s_k^T y_k} - \frac{s_k^T (y_k - B_k s_k)}{(s_k^T y_k)} y_k y_k^T$$

- Fórmula de Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno (BFGS)

$$B_{k+1} = B_k + \frac{y_k y_k^T}{s_k^T y_k} - \frac{B_k s_k s_k^T B_k}{s_k^T B_k s_k}$$

CAPÍTULO 2

ACELERACIÓN DE UN MÉTODO DE DESCENSO

Consideremos el Problema

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad (2.0.1)$$

donde $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ es convexa y continuamente diferenciable, $g(x) = \nabla f(x)$, $G(x) = \nabla^2 f(x)$, $g_k = \nabla f(x_k)$, $f_k = f(x_k)$ y $G_k = \nabla^2 f(x_k)$.

El esquema iterativo o modelo de algoritmo general basado en direcciones de descenso para resolver el problema (2.0.1) consiste en los siguientes pasos

Algoritmo 4 Método general de búsqueda lineal monótona

Entrada: Dado $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $\epsilon \in (0, 1)$. Sea $k = 0$

Salida: x_k

- 1: **mientras** $\|\nabla f(x_k)\| \geq \epsilon$ **hacer**
 - 2: Definir una dirección d_k tal que $\nabla f(x_k)^t d_k < 0$
 - 3: **mientras** $f(x_k + t_k d_k) > f_k$ **hacer**
 - 4: Calcular t_k
 - 5: **fin mientras**
 - 6: $x_{k+1} = x_k + t_k d_k$, $k = k + 1$
 - 7: **fin mientras**
-

Uno de los métodos más conocido para resolver el problema 2.0.1, es el método de Cauchy [2]. El algoritmo comienza con un punto inicial $x_0 \in \text{Dom}(\mathbb{R}^n)$, la dirección de descenso es $d_k = -\nabla f(x)$ y genera una sucesión de puntos de acuerdo con el siguiente procedimiento iterativo:

Algoritmo 5 Método de Cauchy**Entrada:** Dado $x_0 \in \mathbb{R}^n$. Sea $k = 0$ **Salida:** x_k

- 1: **mientras** $\|\nabla f(x_k)\| \neq 0$ **hacer**
- 2: Calcular $d_k = -\nabla f(x_k)$
- 3: Determinar (Búsqueda lineal exacta)
- 4: $t_k = \arg \min_{t \geq 0} f(x_k + td_k)$
- 5: $x_{k+1} = x_k + t_k d_k$, $k = k + 1$
- 6: **fin mientras**

§2.1. BÚSQUEDA LINEAL INEXACTA

En algunos casos especiales (por ejemplo, problemas cuadráticos) es posible calcular el paso t_k analíticamente, pero en la mayoría de los casos se calculan para minimizar aproximadamente f a lo largo del rayo $\{x_k + t_k d_k : t \geq 0\}$ o al menos reducir suficientemente f . En la práctica, el más utilizado son los procedimientos inexactos. Muchos métodos de búsqueda lineal inexactas han sido propuestos por: Goldstein [1], Armijo [5], Wolfe [17], Powell [13], Dennis y Schnabel [6], Fletcher [7], Potra y Shi [12], Lemaréchal [9], Moré y Thunent [10] y otros. En particular, uno de los procedimientos de búsqueda lineal muy simple y eficiente es la búsqueda lineal de retroceso. Toma las siguientes medidas basadas en la regla de Armijo:

Algoritmo 6 Método de búsqueda lineal monótona**Entrada:** Dado $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $0 < \alpha < 0,5$, $0 < \beta < 1$. Sea $k = 0$ **Salida:** x_k

- 1: **mientras** $\|\nabla f(x_k)\| \neq 0$ **hacer**
- 2: Calcular $d_k = -\nabla f(x_k)$ y $t_k = -g_k^T d_k / \|d_k\|^2$
- 3: (Búsqueda lineal de Armijo)
- 4: **mientras** $f(x_k + t_k d_k) > f_k + \alpha t_k \nabla f(x_k)^T d_k$ **hacer**
- 5: $t_k = t_k \beta$
- 6: **fin mientras**
- 7: $x_{k+1} = x_k + t_k d_k$, $k = k + 1$
- 8: **fin mientras**

Típicamente, $\alpha = 0,0001$ y $\beta = 0,8$, lo que significa que aceptamos una pequeña porción de la disminución predicha por aproximación lineal de f en el punto actual. Observe que, si $d_k = -g_k$, entonces $s_k = 1$.

TEOREMA 2.1.1. *Supongamos que d_k es una dirección de descenso y $\nabla f(x)$ satisface la condición de Lipschitz*

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \leq L\|x - y\| \quad \forall x, y \in \{x : f(x) \leq f(x_0)\}$$

donde L es una constante positiva. Si la búsqueda lineal satisface la condición de Armijo, entonces

$$t_k \geq \min \left\{ 1, \frac{\beta(1-\alpha) - g_k^T d_k}{L \|d_k\|^2} \right\}. \quad (2.1.1)$$

Demostración:

Sean $K_1 = \{k : t_k = s_k\}$ y $K_2 = \{k : t_k < s_k\}$. Entonces para cualquier $k \in K_1$ tenemos

$$\begin{aligned} f_{k+1} &\leq f_k + \alpha s_k g_k^T d_k \\ f_{k+1} - f_k &\leq \alpha s_k g_k^T d_k \end{aligned}$$

luego,

$$f_k - f_{k+1} \geq -\alpha s_k g_k^T d_k$$

y para cualquier $k \in K_2$:

$$f_k - f_{k+1} \geq -\alpha t_k g_k^T d_k.$$

Por la regla de Armijo tomando $\frac{t_k}{\beta} \leq s_k$ para todo $k \in K_2$, tenemos

$$f_k - f\left(x_k + \frac{t_k}{\beta} d_k\right) < -\alpha \frac{t_k}{\beta} g_k^T d_k, \forall k \in K_2. \quad (2.1.2)$$

Ahora, usando el teorema del valor medio, obtenemos que existe $\xi_k \in [0, 1]$ tal que:

$$\begin{aligned} f\left(x_k + \frac{t_k}{\beta} d_k\right) - f_k &= \nabla f\left(x_k + \xi_k \left(x_k + \frac{t_k}{\beta} d_k - x_k\right)\right)^T \left(x_k + \frac{t_k}{\beta} d_k - x_k\right) \\ f\left(x_k + \frac{t_k}{\beta} d_k\right) - f_k &= \nabla f\left(x_k + \frac{t_k}{\beta} \xi_k d_k\right)^T \frac{t_k}{\beta} d_k \end{aligned}$$

$$f_k - f\left(x_k + \frac{t_k}{\beta} d_k\right) = -g\left(x_k + \frac{t_k}{\beta} \xi_k d_k\right)^T \frac{t_k}{\beta} d_k, \quad (2.1.3)$$

Sustituyendo (2.1.3) en (2.1.2), tenemos:

$$-g\left(x_k + \frac{t_k}{\beta} \xi_k d_k\right)^T \frac{t_k}{\beta} d_k < -\alpha \frac{t_k}{\beta} g_k^T d_k$$

$$g\left(x_k + \frac{t_k}{\beta} \xi_k d_k\right)^T d_k > \alpha g_k^T d_k, \text{ para todo } k \in K_2.$$

Teniendo en cuenta la condición de Lipschitz, para cualquier $k \in K_2$, tenemos:

$$\begin{aligned}
 \|g\left(x_k + \frac{t_k}{\beta} \zeta_k d_k\right) - g(x_k)\| &\leq L\|x_k + \frac{t_k}{\beta} \zeta_k d_k - x_k\| \\
 \|g\left(x_k + \frac{t_k}{\beta} \zeta_k d_k\right) - g(x_k)\| &\leq L\left\|\frac{t_k}{\beta} \zeta_k d_k\right\| \\
 \|g\left(x_k + \frac{t_k}{\beta} \zeta_k d_k\right) - g(x_k)\| &\leq L\frac{t_k}{\beta} \zeta_k \|d_k\| \\
 \|g\left(x_k + \frac{t_k}{\beta} \zeta_k d_k\right) - g(x_k)\| \|d_k\| &\leq L\frac{t_k}{\beta} \zeta_k \|d_k\|^2 \\
 \|g\left(x_k + \frac{t_k}{\beta} \zeta_k d_k\right) - g(x_k)\| \|d_k\| &\leq L\frac{t_k}{\beta} \|d_k\|^2, \text{ ya que } \zeta_k \in [0, 1]
 \end{aligned}$$

Por lo que

$$\begin{aligned}
 \frac{t_k}{\beta} L \|d_k\|^2 &\geq \|g\left(x_k + \frac{t_k}{\beta} \zeta_k d_k\right) - g(x_k)\| \|d_k\| \\
 &\geq \left(g\left(x_k + \frac{t_k}{\beta} \zeta_k d_k\right) - g(x_k)\right)^T d_k \\
 &\geq \alpha g_k^T d_k - g_k^T d_k \\
 &= -(1 - \alpha) g_k^T d_k
 \end{aligned}$$

Así,

$$t_k \geq \frac{\beta(1 - \alpha) - g_k^T d_k}{L \|d_k\|^2}, \text{ para cualquier } k \in K_2. \quad (2.1.4)$$

Usando la desigualdad (2.1.4) y combinando con la desigualdad correspondiente para $k \in K_1$ obtenemos la desigualdad deseada. (Ver también [15].) \square

§2.2. MÉTODO DEL GRADIENTE ACELERADO

En esta sección presentamos un algoritmo acelerado del descenso de gradiente para resolver un problema de optimización sin restricciones (2.0.1). Considerando el punto inicial x_0 podemos calcular $f_0 = f(x_0)$, $g_0 = \nabla f(x_0)$ y por el procedimiento con retroceso (vease la Sección 2) determinar t_0 . Con estos, la siguiente iteración es calculada como $x_1 = x_0 - t_0 g_0$ donde f_1 y g_1 pueden ser calculada inmediatamente. Ahora, en la iteración $k = 1, 2, \dots$ sabemos x_k, f_k y g_k . Utilizando el procedimiento de retroceso, se puede determinar el tamaño de paso t_k con el que se calcula el siguiente punto $z = x_k - t_k g_k$. Mediante el procedimiento de retroceso obtenemos un $t_k \in (0, 1]$ tal que:

$$f(z) = f(x_k - t_k g_k) \leq f(x_k) - \alpha t_k g_k^T g_k.$$

Con esto, introducimos el algoritmo acelerado de descenso de gradiente por medio de el siguiente esquema iterativo:

$$x_{k+1} = x_k - \theta_k t_k g_k, \quad (2.2.1)$$

donde $\theta_k > 0$ es un parámetro que sigue a determinarse de tal manera que mejore el comportamiento del algoritmo de descenso de gradiente.

Ahora, tenemos:

$$f(x_k - t_k g_k) = f(x_k) - t_k g_k^T g_k + \frac{1}{2} t_k^2 g_k^T \nabla^2 f(x_k) g_k + o(\|t_k g_k\|^2).$$

Por otro lado, para $\theta > 0$ tenemos:

$$f(x_k - \theta t_k g_k) = f(x_k) - \theta t_k g_k^T g_k + \frac{1}{2} \theta^2 t_k^2 g_k^T \nabla^2 f(x_k) g_k + o(\|\theta t_k g_k\|^2).$$

Podemos escribir:

$$f(x_k - \theta t_k g_k) = f(x_k - t_k g_k) + \Psi_k(\theta), \quad (2.2.2)$$

donde

$$\Psi_k(\theta) = (1 - \theta) t_k g_k^T g_k - \frac{1}{2} (1 - \theta^2) t_k^2 g_k^T \nabla^2 f(x_k) g_k + \theta^2 t_k o(t_k \|g_k\|^2) - t_k o(t_k \|g_k\|^2). \quad (2.2.3)$$

Denotemos:

$$\begin{aligned} a_k &= t_k g_k^T g_k \geq 0, \\ b_k &= t_k^2 g_k^T \nabla^2 f(x_k) g_k, \\ \varepsilon &= o(t_k \|g_k\|^2). \end{aligned}$$

Observe que para funciones convexas $b_k \geq 0$. Por lo tanto,

$$\Psi_k(\theta) = (1 - \theta) a_k - \frac{1}{2} (1 - \theta^2) b_k + \theta^2 t_k \varepsilon - t_k \varepsilon. \quad (2.2.4)$$

Ahora, vemos que $\Psi_k'(\theta) = (b_k + 2t_k \varepsilon)\theta - a_k$ y $\Psi_k'(\theta_m) = 0$ donde $\theta_m = \frac{a_k}{b_k + 2t_k \varepsilon}$.

Observe que, $\Psi_k'(0) = -a_k < 0$. Por lo tanto, $\Psi_k(\theta)$ es una función cuadrática convexa con valor mínimo en el punto θ_m y

$$\Psi_k(\theta_m) = -\frac{(a_k - (b_k + 2t_k\varepsilon))^2}{2(b_k + 2t_k\varepsilon)} \leq 0.$$

Considerando $\theta = \theta_m$ en (2.1.3), y $b_k \geq 0$ vemos que para cada k

$$\begin{aligned} f(x_k - \theta_m t_k g_k) &= f(x_k - t_k g_k) - \frac{(a_k - (b_k + 2t_k\varepsilon))^2}{2(b_k + 2t_k\varepsilon)} \\ &\leq f(x_k - t_k g_k), \end{aligned}$$

que es una posible mejora en los valores de la función f , (cuando $a_k - (b_k + 2t_k\varepsilon) \neq 0$).

Por lo tanto, el uso de esta simple modificación multiplicativo del tamaño de paso t_k como $\theta_k t_k$ donde $\theta_k = \theta_m = a_k / (b_k + 2t_k\varepsilon)$ obtenemos

$$f(x_{k+1}) = f(x_k - \theta_k t_k g_k) \tag{2.2.5}$$

$$\leq f(x_k) - \alpha t_k g_k^T g_k - \frac{(a_k - (b_k + 2t_k\varepsilon))^2}{2(b_k + 2t_k\varepsilon)} \tag{2.2.6}$$

$$= f(x_k) - \left[\alpha a_k + \frac{(a_k - (b_k + 2t_k\varepsilon))^2}{2(b_k + 2t_k\varepsilon)} \right] \tag{2.2.7}$$

$$\leq f(x_k), \tag{2.2.8}$$

ya que

$$\alpha a_k + \frac{(a_k - (b_k + 2t_k\varepsilon))^2}{2(b_k + 2t_k\varepsilon)} \geq 0.$$

Observe que, si $a_k < b_k$ entonces

$$\frac{(a_k - (b_k + 2t_k\varepsilon))^2}{2(b_k + 2t_k\varepsilon)} > \frac{(a_k - b_k)^2}{2b_k}$$

y de (2.2.8) obtenemos:

$$\begin{aligned} f(x_{k+1}) &\leq f(x_k) - \left[\alpha a_k + \frac{(a_k - (b_k + 2t_k\varepsilon))^2}{2(b_k + 2t_k\varepsilon)} \right] \\ &< f(x_k) - \left[\alpha a_k + \frac{(a_k - b_k)^2}{2(b_k)} \right] \\ &\leq f(x_k). \end{aligned}$$

Por lo tanto, en este caso, descuidando la contribución de ε , seguimos obteniendo un mejoramiento de los valores de la función. Ahora, con el fin de establecer el algoritmo debemos determinar una forma de calcular b_k . Para ello, en el punto $z = x_k - t_k g_k$ tenemos:

$$f(z) = f(x_k - t_k g_k) = f(x_k) - t_k g_k^T g_k + \frac{1}{2} t_k^2 g_k^T \nabla^2 f(\tilde{x}_k) g_k,$$

donde \tilde{x}_k es un punto en el segmento de línea que une x_k y z . Por otro lado, en el punto $x_k = z + t_k g_k$ tenemos:

$$f(x_k) = f(z + t_k g_k) = f(z) + t_k g_z^T g_k + \frac{1}{2} t_k^2 g_k^T \nabla^2 f(\tilde{x}_k) g_k,$$

donde $g(z) = \nabla f(z)$ y \tilde{x}_k es un punto en el segmento de línea que une x_k y z .

Teniendo en cuenta el carácter local de la búsqueda y que la distancia entre x_k y z es lo suficientemente pequeño, podemos considerar $\tilde{x}_k = x_k$. Con esto, agregando la anterior igualdad obtenemos:

$$b_k = t_k^2 g_k^T \nabla^2 f(x_k) g_k = -t_k y_k^T g_k, \quad (2.2.9)$$

donde $y_k = g_z - g_k$.

Como dijimos anteriormente, puesto que a lo largo de las iteraciones del algoritmo del descenso de gradiente $g_k \rightarrow 0$ podemos despreciar la contribución de ε y considera $\theta_k = \theta_m = a_k/b_k$. Se presenta el Algoritmo del Gradiente Acelerado monótono (AGD).

Algoritmo 7 Método del Gradiente Acelerado monótono (AGD)

Entrada: $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $t_0 > 0$, $\beta \in (0, 1)$, $\sigma \in (0, \frac{1}{2})$. Sea $k = 0$ y $d_k = -g_k$.

- 1: **mientras** $\|g_k\| \neq 0$ **hacer**
 - 2: $t_k = -\frac{g_k^T d_k}{d_k^T d_k}$
 - 3: **mientras** $f(x_k + t_k d_k) > f_k + \sigma t_k g_k^T d_k$ **hacer**
 - 4: $t_k = \beta * t_k$
 - 5: **fin mientras**
 - 6: Sea $z = x_k + t_k d_k$, $g_z = g(z)$ y $y_z = g_z - g_k$
 - 7: Calcular $a_k = t_k g_k^T g_k$, $b_k = -t_k y_z^T g_k$ y $\theta_k = \frac{a_k}{b_k}$
 - 8: $x_{k+1} = x_k + \theta_k t_k d_k$. Hacer $k = k + 1$, $d_k = -g_k$
 - 9: **fin mientras**
-

El algoritmo de descenso gradiente (GD) puede ser inmediatamente particularizado a partir de AGD omitiendo los pasos 3 y 4 y considerando $\theta = 1$ en el paso 5 donde se actualizan las variables.

Observe que si $a_k > b_k$, entonces $\theta_k > 1$. En este caso $\theta_k t_k > t_k$ y es posible que $\theta_k t_k \leq 1$ o $\theta_k t_k > 1$, es decir, es posible que la longitud de paso $\theta_k t_k$ mayor que 1. Por otra parte, si $a_k \leq b_k$, $\theta_k \leq 1$. En este caso $\theta_k t_k \leq t_k \leq 1$ es decir la longitud de paso $\theta_k t_k$ es reducido. Por lo tanto, si $a_k \neq b_k$ entonces $\theta_k \neq 1$ y la longitud de paso t_k calculada por retroceso se modificará, por su aumento o reducción a través del factor θ_k , evitando así que el algoritmo tome pasos ortogonales a lo largo de las iteraciones.

Despreciando ε , a partir de (2.2.1), vemos que si $a_k \leq b_k/2$ entonces $\Psi_k(0) = a_k - b_k/2 \leq 0$ y $\theta_k < 1$. Para cualquier $\theta \in [0, 1]$, $\Psi_k(\theta) \leq 0$. Como consecuencia de cualquier $\theta \in (0, 1)$, $f(x_k -$

$\theta t_k g_k) < f(x_k)$. En este caso, para cualquier $\theta \in [0, 1]$, $\theta_k t_k \leq t_k$. Sin embargo, en el algoritmo hemos seleccionado $\theta_k = \theta_m$ como el punto de alcanzar el valor mínimo de $\Psi_k(\theta)$.

PROPOSICIÓN 2.2.1. *Supongamos que f es una función fuertemente convexa en el conjunto de nivel $S = \{x : f(x) \leq f(x_0)\}$. Entonces, la sucesión de x_k generada por AGD converge linealmente a x^* .*

Demostración:

A partir de (2.2.8) tenemos que $f(x_{k+1}) \leq f(x_k)$ para todo k . Puesto que f esta acotada inferiormente, se sigue que

$$\lim(f(x_k) - f(x_{k+1})) = 0.$$

Puesto que f es fuertemente convexa existen constantes positivas m y M tal que $mI \leq \nabla^2 f(x_k) \leq MI$ en el conjunto de nivel S . Supongamos que $x_k - t g_k \in S$ y $x_k - \theta_m t g_k \in S$, para $0 < t \leq 1$. Suponiendo que $a_k < b_k$ tenemos

$$f(x_k - \theta_m t g_k) \leq f(x_k - t g_k) - \frac{(a_k - b_k)^2}{2b_k}.$$

Pero, a partir de la convexidad fuerte, tenemos el siguiente límite cuadrático superior $f(x_k - t g_k)$:

$$f(x_k - t g_k) \leq f(x_k) - t \|g_k\|_2^2 + \frac{Mt^2}{2} \|g_k\|_2^2.$$

Observe que para $0 \leq t \leq 1/M$, $-t + Mt^2/2 \leq -t/2$, que se deriva de la convexidad de $-t + Mt^2/2$ usando éste resultado obtenemos:

$$\begin{aligned} f(x_k - t g_k) &\leq f(x_k) - t \|g_k\|_2^2 + \frac{Mt^2}{2} \|g_k\|_2^2 \\ &\leq f(x_k) - \frac{t}{2} \|g_k\|_2^2 \\ &\leq f(x_k) - \alpha t \|g_k\|_2^2, \end{aligned}$$

ya que $\alpha \leq 1/2$.

El retroceso termina ya sea con $t = 1$ o con un valor $t \geq \beta/M$. Esto proporciona un límite inferior en la disminución de la función f .

Para $t = 1$, tenemos:

$$f(x_k - t g_k) \leq f(x_k) - \alpha \|g_k\|_2^2$$

y para $t \geq \beta/M$

$$f(x_k - t g_k) \leq f(x_k) - \frac{\alpha\beta}{M} \|g_k\|_2^2.$$

Por lo tanto, para $0 \leq t \leq 1/M$ siempre tenemos:

$$f(x_k - t g_k) \leq f(x_k) - \min \left\{ \alpha, \frac{\alpha \beta}{M} \right\} \|g_k\|_2^2. \quad (2.2.10)$$

Por otra parte,

$$\begin{aligned} \frac{(a_k - b_k)^2}{2b_k} &\geq \frac{(t\|g_k\|_2^2 - t^2 M \|g_k\|_2^2)^2}{2t^2 M \|g_k\|_2^2} \\ &= \frac{(1 - tM)^2}{2M} \|g_k\|_2^2. \end{aligned}$$

Ahora, como arriba, para $t = 1$

$$\frac{(a_k - b_k)^2}{2b_k} \geq \frac{(1 - M)^2}{2M} \|g_k\|_2^2.$$

Para $t \geq \frac{\beta}{M}$

$$\frac{(a_k - b_k)^2}{2b_k} \geq \frac{(1 - \beta)^2}{2M} \|g_k\|_2^2.$$

Por lo tanto,

$$\frac{(a_k - b_k)^2}{2b_k} \geq \min \left\{ \frac{(1 - M)^2}{2M}, \frac{(1 - \beta)^2}{2M} \right\} \|g_k\|_2^2 \quad (2.2.11)$$

Considerando (2.2.10) junto con (2.2.11) obtenemos:

$$f(x_k - \theta_m t g_k) \leq f(x_k) - \min \left\{ \alpha, \frac{\alpha \beta}{M} \right\} \|g_k\|_2^2 - \min \left\{ \frac{(1 - M)^2}{2M}, \frac{(1 - \beta)^2}{2M} \right\} \|g_k\|_2^2. \quad (2.2.12)$$

Por lo tanto

$$f(x_k) - f(x_{k+1}) \geq \left[\min \left\{ \alpha, \frac{\alpha \beta}{M} \right\} + \min \left\{ \frac{(1 - M)^2}{2M}, \frac{(1 - \beta)^2}{2M} \right\} \right] \|g_k\|_2^2.$$

Pero, $f(x_k) - f(x_{k+1}) \rightarrow 0$ y, como consecuencia g_k llega a cero, es decir, x_k converge a x^* . Teniendo en cuenta que $f(x_k)$ es una sucesión no creciente, se deduce que $f(x_k)$ converge a $f(x^*)$.

De (2.2.12) vemos que

$$f(x_{k+1}) \leq f(x_k) - \left[\min \left\{ \alpha, \frac{\alpha \beta}{M} \right\} + \min \left\{ \frac{(1 - M)^2}{2M}, \frac{(1 - \beta)^2}{2M} \right\} \right] \|g_k\|_2^2.$$

Combinando esto con

$$\|g_k\|_2^2 \geq 2m(f(x_k) - f^*)$$

y restar f^* a partir de ambos lados de la desigualdad anterior se concluye:

$$f(x_{k+1}) - f^* \leq c(f(x_k) - f^*), \quad (2.2.13)$$

donde

$$c = 1 - \min \left\{ 2m\alpha, \frac{2m\alpha\beta}{M} \right\} - \min \left\{ \frac{(1-M)^2m}{M}, \frac{(1-\beta)^2m}{M} \right\} < 1. \quad (2.2.14)$$

Por lo tanto, $f(x_k)$ converge a f^* al menos tan rápido como una serie geométrica con un factor que depende de los parámetros de retroceso y el número de condición límite M/m .

Por lo tanto, la convergencia es al menos lineal.

En cada iteración k , seleccionando $\theta_k = \theta_m$ en (2.1.2), el algoritmo AGD reduce los valores de función de acuerdo con (2.2.13) donde c es dada por (2.2.14). Dado que el algoritmo GD logra (2.2.13) con

$$c = 1 - \min \left\{ 2m\alpha, \frac{2m\alpha\beta}{M} \right\} < 1, \quad (16) \quad (2.2.15)$$

se deduce que, si $\theta_m \neq 1$, el algoritmo AGD es una mejora, es decir, una aceleración de GD. \square

CAPÍTULO 3

PRUEBAS NUMÉRICAS

En este capítulo presentamos los resultados numéricos para comparar el Método del Gradiente de Descenso (AGD) presentado en [3] con el Método del Gradiente con búsqueda lineal de Armijo (GD).

La implementación de los algoritmos se realizaron en el paquete Matlab version 7.6.0.324 (R2008a), se ejecutaron en un ordenador portátil con Procesador Intel(R) Celeron(R) CPU 847 @1.10 GHz de 2,00 GB.

Los problemas que se utilizan para las pruebas numéricas, se describen en el apéndice A en donde se enumeran las funciones objetivo, sus gradientes y el valor inicial utilizado, estas se obtienen del artículo [4].

De los resultados se reportan las funciones de prueba (fp) utilizadas, número de iteraciones (NroIter.) con las que se obtienen las soluciones, número de evaluaciones de la función objetivo (Evalf.) hasta obtener la solución, el tiempo de CPU en minutos (T.CPU) necesario para obtener la solución y número de veces en que se activa la búsqueda lineal (N.Backtracking) para obtener la solución.

Para todos los cálculos que se muestran a continuación se fijo, el número máximo de iteraciones en 10000000 y el criterio de parada utilizado es de 10^{-4} .

En la tabla 3.0.1 se muestran los resultados obtenidos usando: dimensión $n = 50$, $\alpha = 0,0001$, $\beta = 0,8$.

TABLA 3.0.1: Comparación de los Algoritmos GD y AGD

fp	Nrolter.		Evalf.		T.CPU		N.Backtracking	
	GD	AGD	GD	AGD	GD	AGD	GD	AGD
f1	91	16	1723	269	0.0025	0.0014	1540	220
f2	252	229	4946	4131	0.0245	0.0216	4441	3443
f3	199	101	1234	508	0.0025	0.0016	835	204
f4	5	3	11	10	$1.1787e^{-4}$	$3.4239e^{-4}$	0	0
f5	158	77	2614	1055	0.0057	0.0026	2297	823
f6	1091	66	21339	1041	0.0423	0.0031	19156	842
f7	257	231	4244	3472	0.0163	0.0061	3729	2778
f8	107	8	2450	160	0.0027	$5.8713e^{-4}$	2235	135
f9	254	229	4985	4131	0.0085	0.0074	4476	3443
f10	978	32	25608	617	0.1364	0.0017	23651	520
f11	532	6	1069	23	0.0029	$3.3515e^{-4}$	4	4
f12	41	4	201	22	$5.9847e^{-4}$	$3.9741e^{-4}$	118	9
f13	22928	19486	742426	593701	2.3206	0.6101	696569	535242

En la tabla 3.0.2 se muestran los resultados obtenidos usando: dimensión $n = 250$, $\alpha = 0,0001$, $\beta = 0,8$.

TABLA 3.0.2: Comparación de los Algoritmos GD y AGD

fp	Nrolter.		Evalf.		T.CPU		N.Backtracking	
	GD	AGD	GD	AGD	GD	AGD	GD	AGD
f1	72	16	2229	400	0.0048	0.0015	2084	351
f2	1235	1131	33040	28338	0.8056	0.7170	30569	24944
f3	929	413	12374	4206	0.0791	0.0274	10515	2966
f4	5	3	11	10	$1.1979e^{-4}$	$1.118e^{-4}$	0	0
f5	684	375	16170	7831	0.1149	0.0559	14801	6705
f6	4509	379	120647	8688	0.7576	0.0544	111628	7550
f7	1257	1187	29716	26126	0.3288	0.3323	2720	22564
f8	483	6	14448	152	0.0199	$3.1419e^{-4}$	13481	133
f9	1242	1137	33227	28478	0.2119	0.1796	30742	25066
f10	6772	133	224007	3492	2.5701	0.0222	210462	3092
f11	914	6	1833	23	0.0187	$3.8988e^{-4}$	4	4
f12	43	4	211	22	0.0017	$2.6618e^{-4}$	124	9
f13	53194	51856	1725321	1606214	7.5891	1.8972	1618932	1450645

En la tabla 3.0.3 se muestran los resultados obtenidos usando: dimensión $n = 500$, $\alpha = 0,0001$, $\beta = 0,8$.

TABLA 3.0.3: Comparación de los Algoritmos GD y AGD

fp	NroIter.		Evalf.		T.CPU		N.Backtracking	
	GD	AGD	GD	AGD	GD	AGD	GD	AGD
f1	72	18	2480	460	0.0075	0.0027	2335	405
f2	2471	2257	73766	64329	4.2832	3.8399	68823	57557
f3	1839	989	30180	13655	0.3883	0.1752	26501	10687
f4	5	3	11	10	$2.2334e^{-4}$	$2.3057e^{-4}$	0	0
f5	---	615	---	14659	---	0.2091	---	12813
f6	8357	611	249596	15857	3.1284	0.1981	232881	14023
f7	2499	2369	66820	59270	0.9271	0.8880	61821	52162
f8	893	149	29463	4269	0.0611	0.0084	27676	3821
f9	2482	2273	74094	64785	1.0565	0.8997	69129	57965
f10	13831	8625	499638	293275	8.5428	3.7388	471975	267399
f11	1154	6	2313	23	0.0474	$7.2673e^{-4}$	4	4
f12	44	4	216	22	0.0034	$4.7729e^{-4}$	127	9
f13	91448	90211	2968792	2786572	12.6468	13.3872	2785895	2515938

En la tabla 3.0.4 se totalizan todos los resultados mostrados en las tablas anteriores, exceptuando los valores correspondiente a la función $f5$ de a tabla 3.0.3, ya que no se obtuvo soluciones al aplicar el algoritmo GD , obteniendo así lo siguiente,

TABLA 3.0.4: Comparación de los Algoritmos GD y AGD

Característica Global	AGD	GD
Total nro Iter	184649	223327
Total nro Eval. de f.	5625647	7023453
Total tiempo CPU	27.085	46.158
Total nro de Backtraking	5071662	6552280

En la tabla 3.0.5 se muestran los resultados variando α y β solamente en las funciones $f5$, $f10$ y $f13$ con dimensión $n = 500$,

TABLA 3.0.5: Comparación de los Algoritmos GD y AGD

fp	α, β	NroIter.		Evalf.		T.CPU		N.Backtracking	
		GD	AGD	GD	AGD	GD	AGD	GD	AGD
f5	1e-3, 0.8	---	615	---	14659	---	0.2091	---	12813
f5	1e-3, 0.5	1362	952	13573	9894	0.2079	0.1940	10848	7037
f5	0.1, 0.2	941	731	5124	5124	0.0829	0.0829	3241	2931
f10	1e-3, 0.8	13831	8625	499638	293275	8.5428	3.7388	471975	267399
f10	1e-3, 0.5	12971	4284	168240	53491	2.5786	0.7077	142297	40638
f10	0.1, 0.2	4626	2544	30260	18745	0.4231	0.2769	21007	11112
f13	1e-3, 0.8	91448	90211	2968792	2786572	12.6468	13.3872	2785895	2515938
f13	1e-3, 0.5	13832	12715	179406	171597	4.2515	4.1978	151741	133451
f13	0.1, 0.2	4877	10262	31897	82073	0.7024	2.5354	22142	51287

CAPÍTULO 4

CONCLUSIONES

Hay que resaltar que en la investigación realizada por Neculai Andrei, en los resultados que generaron, solamente comparan el número de iteraciones, el número de evaluaciones de la función objetivo y el tiempo de CPU entre los métodos que usaron para comparar con el algoritmo AGD.

En este trabajo solamente se utilizó, el Método del Gradiente con búsqueda lineal de Armijo (GD) como algoritmo de comparación con AGD, además agregamos el número de veces que se activa el backtracking para determinar la longitud de paso en cada iteración como parámetros adicionales de comparación.

De los resultados numéricos se aprecia:

- De las tablas 3.0.1, 3.0.2 y 3.0.3 los resultados del método AGD con respecto al número de iteraciones, número de evaluaciones en la función, el tiempo de CPU y el número de veces que se activa el backtracking supera ampliamente al método del gradiente (GD). Hay que indicar que en la tabla 3.0.3 se aprecia que la función f_5 no se obtuvo resultado con el algoritmo (GD), mientras que con AGD si se obtiene la solución.
- En la tabla 3.0.4 se presenta una totalización de los resultados obtenidos en las tres primeras tablas, donde se observa como el algoritmo AGD, disminuye el número de iteraciones en un 17,3%, reduce en un 20% el número de evaluaciones en la función objetivo, además reduce en un 41,3% el tiempo de CPU y en un 22,6% disminuye el número de veces que se activa el backtracking.
- En la tabla 3.0.5 se aprecia que al ajustar los parámetros α y β en el algoritmo 7 (AGD), los resultados en las funciones f_5 , f_{10} y f_{13} mejoran con respecto a los obtenidos en la tabla (3.0.3), más aún también mejoran los resultados del algoritmo (GD) de forma tal que la función f_5 se obtiene solución. Esto es un indicativo de que estos métodos son sensible al ajuste de los parámetros.

REFERENCIAS

- [1] Goldstein A.A., *On steepest descent.*, SIAM J. Control 3, (1965), 147.
- [2] A.Cauchy., *Méthodes generales pour la resoluón des systemes d' equations simultanees*, C. R. Acad. Sci. Par. (1847), no. 25, 536–538.
- [3] Neculai Andrei, *An acceleration of gradient descent algorithm with backtracking for unconstrained optimization*, Numer Algor **42** (2006), 63–73.
- [4] ———, *An unconstrained optimization test functions collection*, Advanced Modeling and Optimization **10** (2008), no. 1.
- [5] L. Armijo, *Minimization of functions having lipschitz continuous first partial derivatives.*, Pacific J. Math. **16** (1966), 1–3.
- [6] J. E. Dennis and R. B. Schnabel, *Numerical methods for nonlinear equations and unconstrained optimization*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1983.
- [7] R.: Fletcher, *Practical methods of optimization.*, Wiley, New York, 1987.
- [8] Motzkin T.S.: Forsythe, G.E., *Asymptotic properties of the optimum gradient method.*, Bull. Am. Soc. **57**, 183 (1951).
- [9] C. Lemaréchal, *Aview of line search. in: Auslander, a., oettli, w., stoer, j. (eds.)*, Optimization and Optimal Control. Springer, Berlin (1981), 59–78.
- [10] Thuente D.J. Moré, J.J., *On line search algorithms with guaranteed sufficient decrease. mathematics and computer science division preprint.*
- [11] E. Polak, *Optimization: Algorithms and consistent approximations*, Springer-Verlag New York, 1997.
- [12] Shi Y. Potra, F.A., *Efficient line search algorithm for unconstrained optimization.*, J. Optim. Theory Appl. **85** (1995), 677–704.
- [13] M. J. D. Powell, *Some global convergence properties of a variable-metric algorithm for minimization without exact line searches*, SIAM-AMS Proc., Philadelphia **9** (1976), 53–72.
- [14] Schinzinger R., *Optimization in electromagnetic system design. in: Lavi, a., vogl, t.p. (eds.)*, Recent Advances in Optimisation Techniques. Wiley, New York (1966).

-
- [15] Zhen-Jun S., *Convergence of line search methods for unconstrained optimization.*, Appl. Math. Comput. **157**, (2004), 393–405.
- [16] Humphrey W.E., *A general minimising routine-minfun.* in: Lavi, a., vogl, t.p. (eds.), Recent Advances in Optimisation Techniques. Wiley, New York (1966).
- [17] P. Wolfe, *Convergence conditions for ascent methods.*, SIAM Rev. **11** (1968), 226–235.
- [18] J. Nocedal y J.S. Wright, *Numerical optimization*, Springer-Verlag New York, 1999.

APÉNDICES

APÉNDICE A

FUNCIONES DE PRUEBA

1. Función de Penalización Extendida

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n-1} (x_i - 1)^2 + \left(\sum_{j=1}^n x_j^2 - 0,25 \right)^2, \quad x_0 = (1, 2, \dots, n)'$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(x)}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\sum_{i=1}^{n-1} (x_i - 1)^2 \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\sum_{j=1}^n x_j^2 - 0,25 \right)^2 \\ &= 2(x_i - 1) + 2 \left(\sum_{j=1}^n x_j^2 - 0,25 \right) 2x_i \\ &= 2(x_i - 1) + 4x_i \left(\sum_{j=1}^n x_j^2 - 0,25 \right), \quad i = 1, 2, \dots, n - 1 \end{aligned}$$

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_n} = 4x_n \left(\sum_{j=1}^n x_j^2 - 0,25 \right)$$

2. Función Cuadrática Pertubada

$$f(x) = \sum_{i=1}^n i x_i^2 + \frac{1}{100} \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2, \quad x_0 = (0,5, 0,5, \dots, 0,5)'$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(x)}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\sum_{j=1}^n j x_j^2 + \frac{1}{100} \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2 \right) \\ &= 2i x_i + \frac{1}{50} \sum_{i=1}^n x_i, \quad i = 1, \dots, n \end{aligned}$$

3. Función Raydan-1

$$f(x) = \sum_{i=1}^n \frac{i}{10} (e^{x_i} - x_i), \quad x_0 = (1, 1, \dots, 1)'$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial f(x)}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\sum_{j=1}^n \frac{j}{10} (e^{x_j} - x_j) \right) \\ &= \frac{i}{10} (e^{x_i} - 1), \quad i = 1, \dots, n\end{aligned}$$

4. Función Raydan-2

$$f(x) = \sum_{i=1}^n (e^{x_i} - x_i), \quad x_0 = (1, 1, \dots, 1)'$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial f(x)}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\sum_{j=1}^n (e^{x_j} - x_j) \right) \\ &= e^{x_i} - 1, \quad i = 1, \dots, n\end{aligned}$$

5. Función Diagonal 1

$$f(x) = \sum_{i=1}^n (e^{x_i} - ix_i), \quad x_0 = \left(\frac{1}{n}, \frac{1}{n}, \dots, \frac{1}{n} \right)'$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial f(x)}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\sum_{j=1}^n (e^{x_j} - jx_j) \right) \\ &= e^{x_i} - i, \quad i = 1, \dots, n\end{aligned}$$

6. Función Diagonal Cuadrática Perturbada

$$f(x) = \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2 + \sum_{i=1}^n \frac{i}{100} x_i^2, \quad x_0 = (0,5, 0,5, \dots, 0,5)'$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial f(x)}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\left(\sum_{j=1}^n x_j \right)^2 + \sum_{j=1}^n \frac{j}{100} x_j^2 \right) \\ &= 2 \sum_{j=1}^n x_j + \frac{i}{50} x_i, \quad i = 1, \dots, n\end{aligned}$$

7. Función Cuadrática QF1

$$f(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n ix_i^2 - x_n, \quad x_0 = (1, 1, \dots, 1)'$$

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_i} = ix_i, \quad i = 1, 2, \dots, n-1$$

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_n} = nx_n - 1$$

8. Función Arwhea

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n-1} (-4x_i + 3) + \sum_{i=1}^{n-1} (x_i^2 + x_n^2)^2, \quad x_0 = (1, 1, \dots, 1)'$$

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_i} = -4 + 4(x_i^2 + x_n^2)x_i, \quad i = 1, 2, \dots, n-1$$

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_n} = 4 \sum_{i=1}^{n-1} (x_i^2 + x_n^2)x_n$$

9. Función Cuadrática Casi Perturbada

$$f(x) = \sum_{i=1}^n ix_i^2 + \frac{1}{100}(x_1 + x_n)^2, \quad x_0 = (0,5, 0,5, \dots, 0,5)'$$

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_1} = 2x_1 + \frac{1}{50}(x_1 + x_n)$$

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_i} = 2ix_i, \quad i = 2, \dots, n-1$$

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_n} = 2nx_n + \frac{1}{50}(x_1 + x_n)$$

10. Función Liarwhd

$$f(x) = \sum_{i=1}^n 4(-x_1 + x_i^2)^2 + \sum_{i=1}^n (x_i - 1)^2, \quad x_0 = (4, 4, \dots, 4)'$$

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_1} = 8(-x_1 + x_i^2)(2x_1 - 1) - \sum_{i=2}^n 8(-x_1 + x_i^2) + 2(x_1 - 1)$$

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_i} = 16(-x_1 + x_i^2)x_i + 2(x_i - 1), \quad i = 2, 3, \dots, n$$

11. Función Quartc

$$f(x) = \sum_{i=1}^n (x_i - 1)^4, \quad x_0 = (2, 2, \dots, 2)'$$

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_i} = 4(x_i - 1)^3, \quad i = 1, \dots, n$$

12. Función Diagonal 7

$$f(x) = \sum_{i=1}^n (e^{x_i} - 2x_i - x_i^2), \quad x_0 = (1, 1, \dots, 1)'$$

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_i} = e^{x_i} - 2 - 2x_i, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

13. Función Rosenbrock Generalizada

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n-1} [c(x_{i+1} - x_i^2)^2 + (1 - x_i)^2], \quad c = 100 \quad x_0 = (-1, 2, 1, \dots, -1, 2, 1)'$$

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_1} = -4x_1c(x_2 - x_1^2) = 2(1 - x_1)$$

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_i} = 2c(x_i - x_{i-1}^2) - 4x_i c(x_{i+1} - x_i^2) - 2(1 - x_i), \quad i = 2, 3, \dots, n-1$$

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_n} = 2c(x_n - x_{n-1}^2)$$