

Capítulo 5

Optimización en varias variables sin restricciones

Describiremos a continuación algunos de los métodos numéricos básicos utilizados en la resolución de problemas no lineales sin restricciones en varias variables.

Prácticamente para todos los métodos existe una estructura fundamental. El algoritmo comienza desde un *punto inicial*, a continuación se determina mediante una regla *una dirección de movimiento*, y se sigue en esa dirección hasta llegar a un mínimo (relativo) de la función objetivo sobre esa recta. En ese nuevo punto se determina una nueva dirección utilizando la misma regla anterior y se repite el proceso. Como se puede suponer la diferencia entre los métodos radica en la regla mediante la cual se selecciona la dirección de movimiento en cada paso del algoritmo. El proceso de búsqueda del mínimo sobre la recta se llama *búsqueda lineal*. Una vez fijada la dirección de movimiento, el valor de la función objetivo depende solamente de una variable, que es precisamente la longitud recorrida en la dirección elegida, y sobre esta función “univariante” se pueden utilizar los algoritmos de búsqueda descritos en el tema anterior para funciones de este tipo.

Describiremos en primer lugar los métodos de búsqueda directa, que solamente utilizan evaluaciones de la función en diferentes puntos. Posteriormente se describirán métodos que utilizan las primeras y segundas derivadas de la función.

5.1 Métodos de búsqueda directa

Para la aplicación de estos métodos solamente es necesario conocer el valor de la función objetivo en cualquier punto del espacio y no necesitamos ninguna hipótesis adicional acerca de la diferenciabilidad de la función. Podemos emplear estos métodos, bien cuando el gradiente de la función, $\nabla f(\mathbf{x})$, no exista, no sea conocido o simplemente porque su expresión es demasiado compleja para poder manejarlo con eficacia.

Para el desarrollo de estos métodos supondremos que $f(\mathbf{x})$ es continua y además unimodal.

Podemos clasificar los métodos que solamente utilizan evaluaciones de la función en métodos heurísticos y métodos teóricos.

5.1.1 Método simplex o método S^2

Es un método de búsqueda heurística desarrollado por Spendley, Hext y Himsworth y está basado en la evaluación de la función en los vértices de un simplex regular. En n dimensiones, un *simplex regular* es un poliedro compuesto por $(n + 1)$ puntos equidistantes, estos puntos son los *vértices* del simplex. Por ejemplo, un triángulo equilátero es un simplex en dimensión 2, mientras que un tetraedro es un simplex para $n = 3$. La principal propiedad del simplex empleada por este algoritmo es que se puede generar un nuevo simplex proyectando uno cualquiera de sus vértices una determinada distancia a través del centroide de los demás vértices. El nuevo simplex se construye reemplazando el vértice reflejado por el generado mediante este procedimiento de reflexión. De esta forma construimos un nuevo simplex utilizando solamente una nueva evaluación de la función objetivo. En la figura 5.1 se puede observar el proceso para 2 dimensiones.

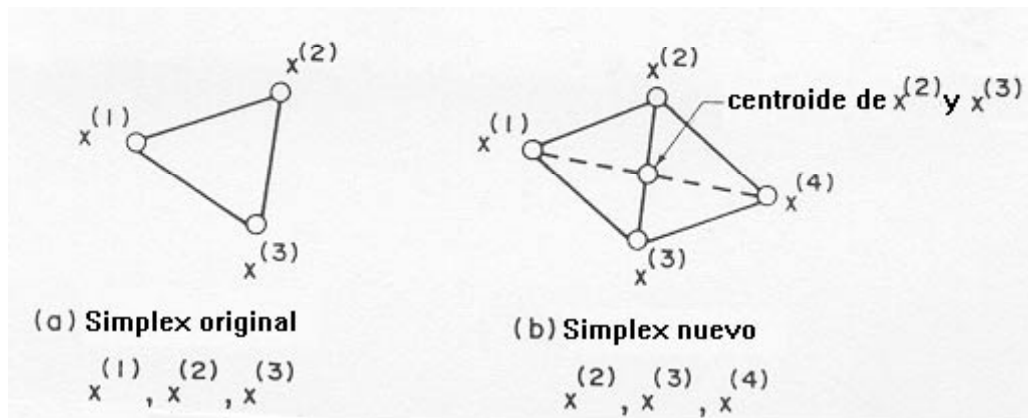


Figura 5.1: Reflexión

El método comienza construyendo un primer simplex regular en el espacio de las variables independiente y evaluando la función en cada uno de sus vértices. Localizamos el “peor” vértice, es decir, el vértice en el que la función objetivo toma el valor mayor de entre todos los vértices del Simplex. Este vértice se “refleja” a través del centroide de los demás para generar un nuevo punto. Este punto junto con los restantes constituyen los vértices del nuevo simplex. El proceso se repite hasta que se obtiene el mínimo o se entra en un ciclo entre 2 o más simplex, es decir, volvemos a obtener un simplex que ya habíamos construido previamente. Esta situación se puede resolver siguiendo tres reglas:

Regla 1. *Acotamiento mínimo*

Si el vértice que hay eliminar (por reflexión) ha sido generado en la iteración previa, entonces elegimos en su lugar el segundo “peor” vértice.

Regla 2. *Ciclado*

Si alguno de los vértices permanece invariante después de M iteraciones, reducimos el tamaño del simplex mediante un factor determinado. Construimos el nuevo simplex a partir del vértice en el que la función alcanza el valor más pequeño como punto base. Los trabajos de Spendley y sus colaboradores sugieren un valor para M de

$$M = 1.65n + 0.05n^2$$

donde n es la dimensión del problema, y M se obtiene por redondeo al entero más cercano. Obviamente, esta regla requiere la especificación de un factor de reducción.

Regla 3. *Criterio de finalización*

La búsqueda termina cuando el simplex se hace suficientemente pequeño o cuando la desviación estándar de los valores de la función en los vértices se hace suficientemente pequeña, es decir

$$S_f = \sqrt{\frac{\sum_{i=0}^n (f(x_i) - \bar{f})^2}{n+1}} = \sqrt{\frac{\sum_{i=0}^n f(x_i)^2}{n+1} - \bar{f}^2} < \varepsilon$$

donde

$$\bar{f} = \frac{\sum_{i=0}^n f(x_i)}{n+1}$$

Esta regla requiere la especificación de un parámetro de finalización: ε .

La implementación de este algoritmo requiere sólo dos tipos de cálculos: (1) la generación de un simplex regular a partir de un punto base inicial y un factor de escala apropiado, y (2) el cálculo del punto reflejado. El primer tipo de cálculo es muy fácil de realizar, puesto que puede demostrarse por geometría elemental que a partir de un punto $\mathbf{x}^{(0)}$ y un factor de escala, α (longitud del lado del simplex), se pueden generar los otros n vértices del simplex regular (en dimensión n) utilizando las expresiones:

$$\mathbf{x}_j^{(i)} = \begin{cases} \mathbf{x}_j^{(0)} + \delta_1 & j = i \\ \mathbf{x}_j^{(0)} + \delta_2 & j \neq i \end{cases}$$

para $i, j = 1, 2, 3, \dots, n$. Los valores de δ_1 , y δ_2 dependen solamente de n y α , mediante las expresiones:

$$\delta_1 = \left[\frac{(n+1)^{1/2} + n - 1}{n\sqrt{2}} \right] \alpha$$

$$\delta_2 = \left[\frac{(n+1)^{1/2} - 1}{n\sqrt{2}} \right] \alpha$$

El segundo tipo de cálculo, reflexión a través del centroide, es también muy sencillo de realizar. Supongamos que $\mathbf{x}^{(j)}$ es el punto que hay que reflejar. Entonces el centroide de los restantes n puntos es

$$\mathbf{x}_c = \frac{1}{n} \sum_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^n \mathbf{x}^{(i)}$$

Cualquier punto en la línea que une $\mathbf{x}^{(j)}$ y \mathbf{x}_c viene dado por

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}^{(j)} + \lambda (\mathbf{x}_c - \mathbf{x}^{(j)})$$

Donde $\lambda \in \mathbb{R}$. Por ejemplo, para $\lambda = 0$ tenemos el puntos original $\mathbf{x}^{(j)}$, mientras que para $\lambda = 1$ obtenemos el centroide, \mathbf{x}_c . Para mantener la regularidad del simplex, la reflexión debe ser simétrica. Por tanto, $\lambda = 2$ conduce al nuevo vértice buscado. Así

$$\mathbf{x}_{\text{nuevo}}^{(j)} = 2\mathbf{x}_c - \mathbf{x}_{\text{antiguo}}^{(j)}$$

Veamos como ilustración del método, ambos cálculos en el siguiente ejemplo:

Ejemplo 5.1 Utilizar el método S^2 para resolver el problema

$$\text{Minimizar } f(x) = (1 - x_1)^2 + (2 - x_2)^2$$

Solución: La construcción del simplex inicial requiere la especificación de un punto inicial y un factor de escala. Supongamos $\mathbf{x}^{(0)} = (0, 0)$, y $\alpha = 2$. Entonces

$$\delta_1 = \left[\frac{\sqrt{3} + 1}{2\sqrt{2}} \right] \cdot 2 = 1.9318$$

$$\delta_2 = \left[\frac{\sqrt{3} - 1}{2\sqrt{2}} \right] \cdot 2 = 0.5176$$

Con esos valores, los dos vértices restantes serán

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{(2)} &= \begin{bmatrix} 0 + 0.5176 \\ 0 + 1.9318 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.5176 \\ 1.9318 \end{bmatrix} \\ \mathbf{x}^{(1)} &= \begin{bmatrix} 0 + 1.9318 \\ 0 + 0.5176 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.9318 \\ 0.5176 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

con valores

$$\begin{aligned} f(x^{(0)}) &= 5 \\ f(x^{(1)}) &= 3.0658 \\ f(x^{(2)}) &= 0.2374 \end{aligned}$$

Por tanto $\mathbf{x}^{(0)}$ es el punto que tiene que ser reflejado para formar el nuevo simplex. El punto $\mathbf{x}^{(3)}$, se calcula de la siguiente forma

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_c &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 \mathbf{x}^{(i)} = \frac{1}{2} (x^{(1)} + x^{(2)}) \\ \mathbf{x}^{(3)} &= 2\mathbf{x}_c - \mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{x}^{(1)} + \mathbf{x}^{(2)} - \mathbf{x}^{(0)} = \begin{bmatrix} 2.4494 \\ 2.4494 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

En el nuevo punto $f(\mathbf{x}^{(3)}) = 2.3027$, por tanto se mejora el resultado. El nuevo simplex está compuesto por los puntos: $\mathbf{x}^{(1)}$, $\mathbf{x}^{(2)}$ y $\mathbf{x}^{(3)}$. El algoritmo continuaría ahora reflejando el punto donde la función toma el mayor valor: $\mathbf{x}^{(1)}$. El algoritmo se reproduce como anteriormente, salvo cuando nos encontramos con situaciones que requieren las reglas 1, 2 o 3, dadas anteriormente.

El algoritmo S^2 dado anteriormente tiene una serie de ventajas:

1. Los cálculos son muy simples y la lógica del método no es complicada, por tanto el programa será corto.
2. El almacenamiento es relativamente pequeño: un vector de dimensiones $(n+1, n+2)$
3. Se necesitan pocos parámetros modificables: el factor de escala α , un factor para reducir α si se utiliza la regla 2, y un criterio de parada.
4. El algoritmo es efectivo cuando las evaluaciones de los errores son significativas, puesto que opera en el peor caso en lugar del mejor punto.

Por otra parte el algoritmo tiene también varias importantes desventajas:

1. Se pueden producir problemas de escala puesto que todas las coordenadas están sujetas al mismo factor de escala α . Para disminuir este efecto, se pueden escalar todas las variables de forma que tengan magnitudes comparables.
2. El algoritmo es lento, puesto que no se utiliza información ya conocida para acelerar el movimiento.
3. No hay ninguna forma simple de expandir el simplex sin volver a calcular todo el patrón. Así, una vez que se reduce α , la búsqueda debe comenzar con este tamaño de paso reducido.

Para eliminar parcialmente algunas de las desventajas de este método, Nelder y Mead modifican el procedimiento del simplex, observando que aunque es conveniente utilizar la fórmula de construcción del simplex regular en el estado inicial del método, no hay por qué mantener la regularidad del simplex cuando se sigue con el procedimiento de búsqueda. De esta forma, se pueden efectuar expansiones y contracciones en el proceso de reflexión. Esta modificación requiere la utilización del punto con el mayor valor para $f(\mathbf{x})$, \mathbf{x}^h , el siguiente con mayor valor para $f(\mathbf{x})$, \mathbf{x}^g , y el punto con el menor valor para $f(\mathbf{x})$, \mathbf{x}^l , junto con los correspondientes valores de la función en dichos puntos f^h , f^g y f^l . Teniendo en cuenta esta información y que el paso de reflexión viene dado mediante la fórmula

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}^h + \lambda (\mathbf{x}_c - \mathbf{x}^h)$$

o equivalentemente por

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}^h + (1 + \theta) (\mathbf{x}_c - \mathbf{x}^h)$$

Si $\theta = 1$, tenemos la reflexión normal. Cuando $-1 \leq \theta \leq 1$, se produce una reflexión más corta o *contracción*, mientras que si $\theta > 1$, se generará un paso de reflexión de mayor longitud o una *expansión* del simplex. Podemos observar esta propiedad en la figura 5.2. Los tres valores de θ utilizados para reflexión normal, contracción y expansión se indican respectivamente como α , β y γ , y se utilizan según los criterios indicados en la figura. Nelder y Mead recomienda los valores de $\alpha = 1$, $\beta = 0.5$ y $\gamma = 2$ respectivamente.

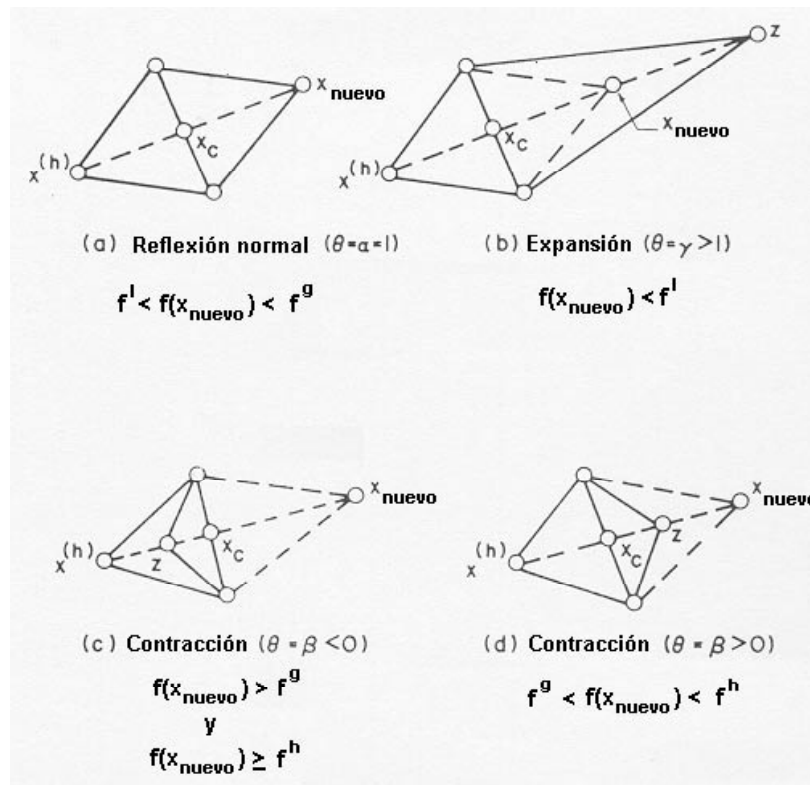


Figura 5.2: Método Simplex de Nelder-Mead

5.1.2 Métodos de descenso coordinado

Dada la función $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $f \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}^n)$, si $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$, el descenso respecto a la coordenada x_i , significa resolver el problema

$$\underset{x_i}{\text{Minimizar}} f(x_1, \dots, x_n)$$

Por tanto este método utiliza los ejes coordenados como direcciones de búsqueda. El método busca el mínimo de f en las direcciones \mathbf{e}_i , sólo hay variaciones en la coordenada x_i , mientras que las demás permanecen fijas. Si minimizamos de forma secuencial para diversas componentes de f podríamos llegar a un mínimo relativo de f . Existen diversas formas de efectuar esta minimización coordinada:

1. **Descenso coordinado cíclico.** Minimiza la función f en cada dirección de forma ordenada, desde la coordenada 1 hasta la coordenada n . Posteriormente se repite el proceso comenzando de nuevo desde la primera coordenada.
2. **Doble recorrido de Aitken.** En esta variante del método de descenso coordinado, se minimiza la función en todas las direcciones coordenadas, $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n$, para a continuación volver a minimizar hacia atrás, en la dirección \mathbf{e}_{n-1} hasta la \mathbf{e}_1 . En este método se requieren $n - 1$ búsquedas lineales en cada iteración. Obviamente para $n = 2$ este método y el anterior coinciden.
3. **Método de Gauss-Southwell.** Si la función es diferenciable y podemos calcular el gradiente, esta variante recomienda la selección de la coordenada del gradiente en cada punto con mayor magnitud (mayor valor absoluto) como la dirección de búsqueda.

En general el planteamiento del método es el siguiente: partimos de un punto inicial $\mathbf{x}^1 = (x_1^1, \dots, x_n^1)$ y a continuación resolvemos el problema

$$\underset{\lambda}{\text{Minimizar}} \{ f(\mathbf{x}^1 + \alpha \mathbf{e}_j) = f(x_1, \dots, x_j + \alpha, \dots, x_n) \}$$

que es una función univariante que puede resolverse por los métodos del tema anterior. Una vez encontrado el punto que resuelve el problema anterior, tomamos ese nuevo punto como punto de partida y elegimos, según el método, otra dirección de minimización.

El algoritmo para el caso del método de descenso cíclico es el siguiente

Algoritmo del método de descenso coordinado cíclico

- **Inicio.** Elegir un escalar $\epsilon > 0$ para utilizarlo como criterio de parada del algoritmo, y $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n$ como las direcciones de búsqueda. Elegir un punto inicial \mathbf{x}_1 . Hacer $\mathbf{y}_1 = \mathbf{x}_1, k = j = 1$ e ir al paso principal.

- **Principal.**

Paso 1.- Calcular α_j como la solución óptima del problema de minimizar $f(\mathbf{y}_j + \alpha \mathbf{e}_j), \alpha \in \mathbb{R}^n$, hacer $\mathbf{y}_{j+1} = \mathbf{y}_j + \alpha_j \mathbf{e}_j$. Si $j < n$, reemplazar j por $j + 1$ y repetir el paso 1. En otro caso, si $j = n$ ir al Paso 2.

Paso 2.- Hacer $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{y}_{n+1}$. Si $\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k\| < \epsilon$, parar. En otro caso, hacer $\mathbf{y}_1 = \mathbf{x}_{k+1}, j = 1$, reemplazar k por $k + 1$ e ir al Paso 1.

Notar que el algoritmo del método de descenso coordinado cíclico (y en el de cualquier método mediante direcciones coordinadas) una iteración completa del método termina cuando se han recorrido todas las direcciones coordinadas posibles.

Ejemplo 5.2 Considerar el siguiente problema

$$\text{Minimizar } (x_1 - 2)^4 + (x_1 - 2x_2)^2$$

Solución: La solución a este problema es el punto $(2, 1)$ con un valor de la función objetivo igual a 0. El resumen de los cálculos mediante el método coordinado cíclico comenzando desde el punto $(0.00, 3.00)$ se da en la tabla 5.1. Notar que en cada iteración, los vectores \mathbf{y}_2 e \mathbf{y}_3 se obtienen desarrollando una búsqueda lineal en las direcciones $(1, 0)$ y $(0, 1)$, respectivamente. Notar también que el avance significativo se experimenta en las primeras iteraciones, mientras que en las posteriores iteraciones el progreso se ralentiza. Después de 7 iteraciones, alcanzamos el punto $(2.22, 1.11)$, con un valor de 0.0023 para la función objetivo.

En la figura 5.3 se han dibujado los isocontornos de la función $f(x_1, x_2) = (x_1 - 2)^4 + (x_1 - 2x_2)^2$, y algunos de los puntos generados mediante el método de coordenadas cíclico aplicado a esta función. Notar que el avance significativo se produce en las primeros pasos del método, mientras que se obtiene un menor progreso en las últimas iteraciones debido a desplazamientos ortogonales cortos a lo largo del “valle” indicado mediante la línea de puntos.

Algoritmo método de descenso coordinado cíclico discreto

En esta variante del método de descenso coordinado, no se utiliza ningún método de búsqueda lineal a lo largo de los ejes coordinados $\{\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n\}$, en este caso se utiliza un desplazamiento discreto a lo largo de las direcciones de búsqueda, que siguen siendo los ejes. El algoritmo es el siguiente:

- **Inicio.** Elegir un escalar $\epsilon > 0$, utilizado para la terminación del algoritmo. Elegir un tamaño inicial del paso, $\Delta \geq \epsilon$ y un punto de partida \mathbf{x}_1 . Hacer $\mathbf{y}_1 = \mathbf{x}_1, k = j = 1$ e ir al paso principal.

- **Principal.**

Paso 1.- Si $f(\mathbf{y}_j + \Delta \mathbf{e}_j) < f(\mathbf{y}_j)$, consideramos el suceso como un *éxito*; hacer $\mathbf{y}_{j+1} = \mathbf{y}_j + \Delta \mathbf{e}_j$, e ir al

Paso 2. Si $f(\mathbf{y}_j + \Delta \mathbf{e}_j) \geq f(\mathbf{y}_j)$, el suceso se denomina *fracaso*, en este caso, si $f(\mathbf{y}_j - \Delta \mathbf{e}_j) < f(\mathbf{y}_j)$; hacer $\mathbf{y}_{j+1} = \mathbf{y}_j - \Delta \mathbf{e}_j$, e ir al Paso 2; si $f(\mathbf{y}_j - \Delta \mathbf{e}_j) \geq f(\mathbf{y}_j)$, $\mathbf{y}_{j+1} = \mathbf{y}_j$ e ir al Paso 2.

Paso 2.- Si $j < n$, reemplazar j por $j + 1$ y repetir Paso 1. En caso contrario, si $f(\mathbf{y}_{n+1}) < f(\mathbf{x}_k)$, reemplazar k por $k + 1, j = 1$ e ir al Paso 1, si $f(\mathbf{y}_{n+1}) \geq f(\mathbf{x}_k)$ ir al Paso 3.

Paso 3.- Si $\Delta \leq \epsilon$ parar; \mathbf{x}_k es la solución. En otro caso, sustituir Δ por $\Delta/2, \mathbf{y}_1 = \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k$. Reemplazar k por $k + 1, j = 1$ e ir al Paso 1.

Iteración k	\mathbf{x}_k^T $f(\mathbf{x}_k)$	j	\mathbf{d}_j^T	\mathbf{y}_j^T	α_j	\mathbf{y}_{j+1}^T
1	(0.00, 3.00)	1	(1.0, 0.0)	(0.00, 3.00)	3.13	(3.13, 3.00)
	52.00	2	(0.0, 1.0)	(3.13, 3.00)	-1.44	(3.13, 1.56)
2	(3.13, 1.56)	1	(1.0, 0.0)	(3.13, 1.56)	-0.50	(2.63, 1.56)
	1.63	2	(0.0, 1.0)	(2.63, 1.56)	-0.25	(2.63, 1.31)
3	(2.63, 1.31)	1	(1.0, 0.0)	(2.63, 1.31)	-0.19	(2.44, 1.31)
	0.16	2	(0.0, 1.0)	(2.44, 1.31)	-0.09	(2.44, 1.22)
4	(2.44, 1.22)	1	(1.0, 0.0)	(2.44, 1.22)	-0.09	(2.35, 1.22)
	0.04	2	(0.0, 1.0)	(2.35, 1.22)	-0.05	(2.35, 1.17)
5	(2.35, 1.17)	1	(1.0, 0.0)	(2.35, 1.17)	-0.06	(2.29, 1.17)
	0.015	2	(0.0, 1.0)	(2.29, 1.17)	-0.03	(2.29, 1, 14)
6	(2.29, 1, 14)	1	(1.0, 0.0)	(2.29, 1, 14)	-0.04	(2.25, 1.14)
	0.007	2	(0.0, 1.0)	(2.25, 1.14)	-0.02	(2.25, 1.12)
7	(2.25, 1.12)	1	(1.0, 0.0)	(2.25, 1.12)	-0.03	(2.22, 1.12)
	0.004	2	(0.0, 1.0)	(2.22, 1.12)	-0.01	(2.22, 1.11)

Tabla 5.1: Método Coordinado Cíclico

5.1.3 Método de Hooke & Jeeves

El método de descenso coordinado, cuando se aplica sobre funciones diferenciables, converge hacia un punto de pendiente 0. Sin embargo, en ausencia de diferenciablez, el método puede situarse en un punto no óptimo. Como muestra en la figura 5.4a, la búsqueda a lo largo de cualquiera de los ejes coordinados en \mathbf{x}_2 no conduce a una mejora de la función objetivo y el resultado es una terminación anticipada. La razón de ésta es la presencia de un “valle” causado por la no diferenciablez de f . Esta dificultad puede evitarse buscando en la dirección $\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1$. Podemos por tanto introducir una búsqueda en la dirección $\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k$ en cada paso del algoritmo, para evitar problemas con puntos donde la función objetivo no es diferenciable. Este paso se suele denominar paso de aceleración o patrón de búsqueda (*pattern search*, figura 5.4b). Utilizando esta técnica describimos a continuación el llamado método de Hooke & Jeeves.

Teniendo en cuenta lo expuesto anteriormente, el método de Hooke & Jeeves utiliza dos tipos de búsqueda. En primer lugar y partiendo de un punto \mathbf{x}_1 utilizamos búsqueda lineal sobre los ejes coordinados para obtener un segundo punto \mathbf{x}_2 . En segundo lugar y utilizando estos dos puntos se realiza una búsqueda patrón, y se minimiza de nuevo en la dirección $\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1$ para obtener un tercer punto \mathbf{y} ; este punto es el que se utiliza como punto de partida para una nueva iteración del algoritmo (Figura 5.5).

Se exponen a continuación dos variantes del método Hooke-Jeeves: la variante continua y la variante discreta. En el primer caso es necesario un método de búsqueda lineal para poder localizar los mínimos en las direcciones utilizadas, mientras que el método discreto utiliza solamente evaluaciones de la función, eso si, utilizando direcciones concretas.

Se describe a continuación el algoritmo empleado para el método HJ en la variante continua.

Algoritmo método de Hooke & Jeeves continuo

Utilizamos un proceso de búsqueda lineal a lo largo de los ejes coordinados $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n$.

- **Inicio.** Elegir un escalar $\epsilon > 0$, utilizado para la terminación del algoritmo. Elegir un punto de partida \mathbf{x}_1 , hacer $\mathbf{y}_1 = \mathbf{x}_1, k = j = 1$ e ir al paso principal.

- **Principal.**

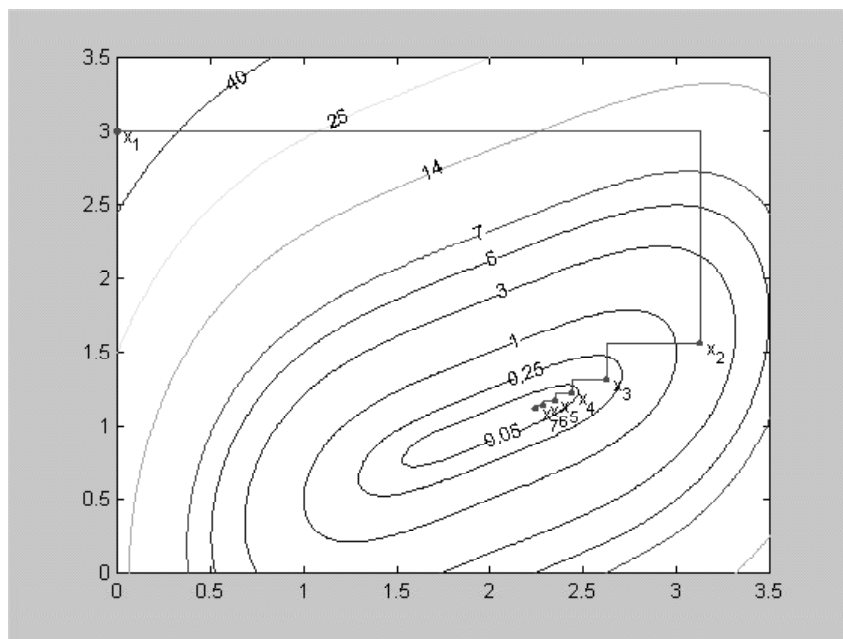


Figura 5.3: Método de coordenadas cíclico

Paso 1.- Calcular α_j como la solución óptima del problema de minimizar $f(\mathbf{y}_j + \alpha \mathbf{e}_j)$, $\alpha \in \mathbb{R}$. Hacer $\mathbf{y}_{j+1} = \mathbf{y}_j + \alpha_j \mathbf{e}_j$. Si $j < n$, reemplazar j por $j + 1$ y repetir el **Paso 1**. En otro caso, si $j = n$, hacer $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{y}_{n+1}$. Si $\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k\| < \epsilon$ parar; en caso contrario ir al **Paso 2**.

Paso 2.- Hacer $\mathbf{d} = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k$, y calcular $\hat{\alpha}$, la solución óptima del problema de minimizar $f(\mathbf{x}_{k+1} + \alpha \mathbf{d})$, $\alpha \in \mathbb{R}$. Hacer $\mathbf{y}_1 = \mathbf{x}_{k+1} + \hat{\alpha} \mathbf{d}$, $j = 1$, reemplazar k por $k + 1$ e ir al **Paso 1**.

De nuevo y como en el método de descenso cíclico es necesario buscar el mínimo en todas las direcciones coordenadas antes de encontrar la siguiente aproximación. Esta es una característica de todos los métodos que utilizan un conjunto de n direcciones como también se comprueba en los métodos de direcciones conjugadas, gradiente conjugado o métrica variable que se verán más adelante.

Ejemplo 5.3 Considerar el siguiente problema

$$\text{Minimizar } (x_1 - 2)^4 + (x_1 - 2x_2)^2$$

Solución: La tabla 5.2 resume los cálculos efectuados mediante el método de Hooke–Jeeves, comenzando desde el punto (0.00, 3.00). En cada iteración, realizamos una búsqueda exploratoria a lo largo de las direcciones coordenadas que nos proporciona los puntos \mathbf{y}_2 e \mathbf{y}_3 , y una búsqueda patrón en la dirección $\mathbf{d} = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k$ nos da el punto \mathbf{y}_1 , excepto en la iteración $k = 1$, donde $\mathbf{y}_1 = \mathbf{x}_1$. Necesitamos cuatro iteraciones para movernos desde el punto inicial hasta el punto óptimo (2.00, 1.00), para el que la función objetivo vale 0. En este punto, $\|\mathbf{x}_5 - \mathbf{x}_4\| = 0.045$, y terminamos el procedimiento.

La figura 5.6 ilustra los puntos generados utilizando este método para la función $f(x_1, x_2) = (x_1 - 2)^4 + (x_1 - 2x_2)^2$, hasta llegar al mínimo de la función. Notar que el empleo de la búsqueda patrón ha mejorado substancialmente la convergencia moviéndonos en una dirección que es casi paralela al “valle” representado por la línea punteada.

Algoritmo método de Hooke & Jeeves discreto

Como en el método de descenso coordenado cíclico, podemos definir una variante discreta para el método Hooke–Jeeves, donde no se utilice ningún método de búsqueda lineal. El algoritmo es el siguiente:

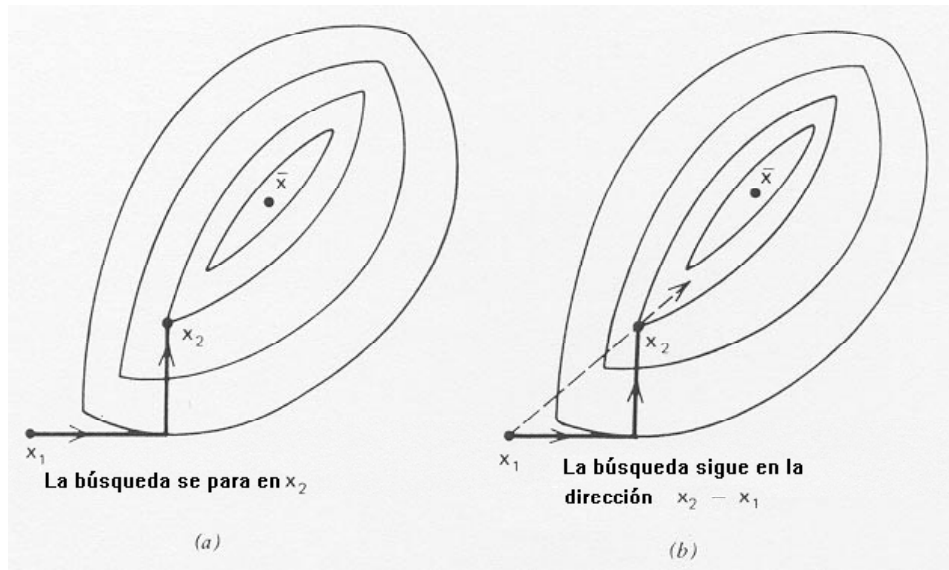


Figura 5.4: Ilustración del efecto de no derivabilidad

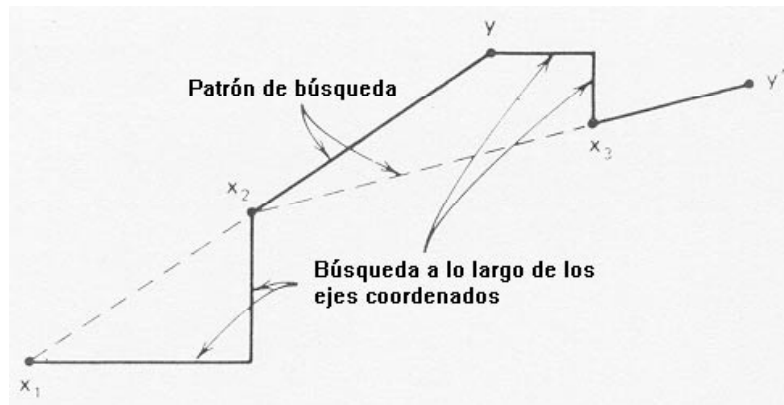


Figura 5.5: Método de Hooke-Jeeves

- **Inicio.** Elegir un escalar $\epsilon > 0$, utilizado para la terminación del algoritmo. Elegir un tamaño inicial del paso, $\Delta \geq \epsilon$, un factor de aceleración, $\alpha > 0$ y un punto de partida x_1 . Hacer $y_1 = x_1, k = j = 1$ e ir al paso principal.
- **Principal.**
 - Paso 1.-** Si $f(y_j + \Delta e_j) < f(y_j)$, consideramos el suceso como un *éxito*; hacer $y_{j+1} = y_j + \Delta e_j$, e ir al **Paso 2**.
 - Paso 2.-** Si $f(y_j + \Delta e_j) \geq f(y_j)$, el suceso se denomina *fracaso*, en este caso, si $f(y_j - \Delta e_j) < f(y_j)$; hacer $y_{j+1} = y_j - \Delta e_j$, e ir al **Paso 2**; si $f(y_j - \Delta e_j) \geq f(y_j)$, $y_{j+1} = y_j$ e ir al **Paso 2**.
 - Paso 2.-** Si $j < n$, reemplazar j por $j + 1$ y repetir **Paso 1**. En caso contrario, si $f(y_{n+1}) < f(x_k)$ ir al **Paso 3**, y si $f(y_{n+1}) \geq f(x_k)$ ir al **Paso 4**.
 - Paso 3.-** Hacer $x_{k+1} = y_{n+1}$, $y_1 = x_{k+1} + \alpha(x_{k+1} - x_k)$. Reemplazar k por $k + 1$, $j = 1$ e ir al **Paso 1**.
 - Paso 4.-** Si $\Delta \leq \epsilon$ parar; x_k es la solución. En otro caso, sustituir Δ por $\Delta/2$, $y_1 = x_{k+1} = x_k$. Reemplazar k por $k + 1$, $j = 1$ e ir al **Paso 1**.

k	\mathbf{x}_k^T $f(\mathbf{x}_k)$	j	\mathbf{d}_j^T	\mathbf{y}_j^T	α_j	\mathbf{y}_{j+1}^T	\mathbf{d}^T	$\hat{\alpha}$	$\mathbf{y}_3^T + \hat{\alpha}\mathbf{d}^T$
1	(0.00, 3.00)	1	(1.0, 0.0)	(0.00, 3.00)	3.13	(3.13, 3.00)	—	—	—
	52.00	2	(0.0, 1.0)	(3.13, 3.00)	-1.44	(3.13, 1.56)	(3.13, 1.44)	-0.10	(2.82, 1.70)
2	(3.13, 1.56)	1	(1.0, 0.0)	(2.82, 1.70)	-0.12	(2.70, 1.70)	—	—	—
	1.63	2	(0.0, 1.0)	(2.70, 1.70)	-0.35	(2.70, 1.35)	(-0.43, -0.21)	1.50	(2.06, 1.04)
3	(2.70, 1.35)	1	(1.0, 0.0)	(2.06, 1.04)	-0.02	(2.04, 1.04)	—	—	—
	0.24	2	(0.0, 1.0)	(2.04, 1.04)	-0.02	(2.04, 1.02)	(-0.66, -0.33)	0.06	(2.00, 1.00)
4	(2.04, 1.02)	1	(1.0, 0.0)	(2.00, 1.00)	-0.00	(2.00, 1.00)	—	—	—
	0.000003	2	(0.0, 1.0)	(2.00, 1.00)	-0.00	(2.00, 1.00)	—	—	—
5	(2.00, 1.00)								
	0.00								

Tabla 5.2: Método Hooke-Jeeves

Ejemplo 5.4 Resolver el siguiente problema

$$\text{Minimizar } (x_1 - 2)^4 + (x_1 - 2x_2)^2$$

utilizando el método de Hooke-Jeeves en forma discreta.

Solución: Elegimos $\alpha = 1.0$ y $\Delta = 0.2$. Los primeros puntos obtenidos por este método se muestran en la tabla 5.3. Una E , denota que el intento ha sido un éxito, y una F indica un fracaso. En la primera interacción, y en las iteraciones sucesivas para las que $f(\mathbf{y}_3) \geq f(\mathbf{x}_k)$, entonces $\mathbf{y}_1 = \mathbf{x}_k$. En caso contrario, $\mathbf{y}_1 = 2\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k$. Notar que al final de la décima iteración, alcanzamos el punto (1.70, 0.80) con un valor de 0.02 para la función objetivo. El procedimiento se detiene ya que el parámetro de parada es $\epsilon = 0.1$. En caso de necesitarse un grado de precisión mayor, habría que reducir Δ a 0.05

5.2 Métodos basados en el gradiente

Los métodos desarrollados en esta sección utilizan la información proporcionada por el gradiente de la función, y en algunos casos la información dada por la matriz Hessiana de la misma, por tanto, para aplicarlos necesitamos que la función sea diferenciable e incluso dos veces diferenciable.

Discutimos en primer lugar métodos que solamente utilizan información de primer orden; asumimos pues, que podemos obtener los elementos del gradiente, $\nabla f(\mathbf{x})$, de forma directa o mediante una aproximación numérica.

Todos los métodos considerados aquí emplean un procedimiento iterativo similar, según la fórmula de recursiva

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha^{(k)} s \left[x^{(k)} \right] \quad (5.1)$$

donde $\mathbf{x}^{(k)}$ es la estimación actual de la solución \mathbf{x}^* del problema; $\alpha^{(k)}$ es un parámetro que determina la longitud de paso y $s \left[x^{(k)} \right] = s^{(k)}$ es la dirección de búsqueda elegida en el espacio n -dimensional de las variables de decisión.

5.2.1 Método de descenso de mayor pendiente o del gradiente

Este método es el de mayor importancia teórica, puesto que es uno de los más sencillos para los que existe un análisis satisfactorio. A menudo se pueden conseguir algoritmos más avanzados modificando la técnica de descenso de mayor pendiente.

Sea $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$; $f \in C^1(\mathbb{R}^n)$, el método de mayor pendiente o de gradiente se fundamenta en la construcción de una sucesión $\{\mathbf{x}_k\}$ que sea convergente a la solución del problema, del siguiente modo: la recta que pasa por

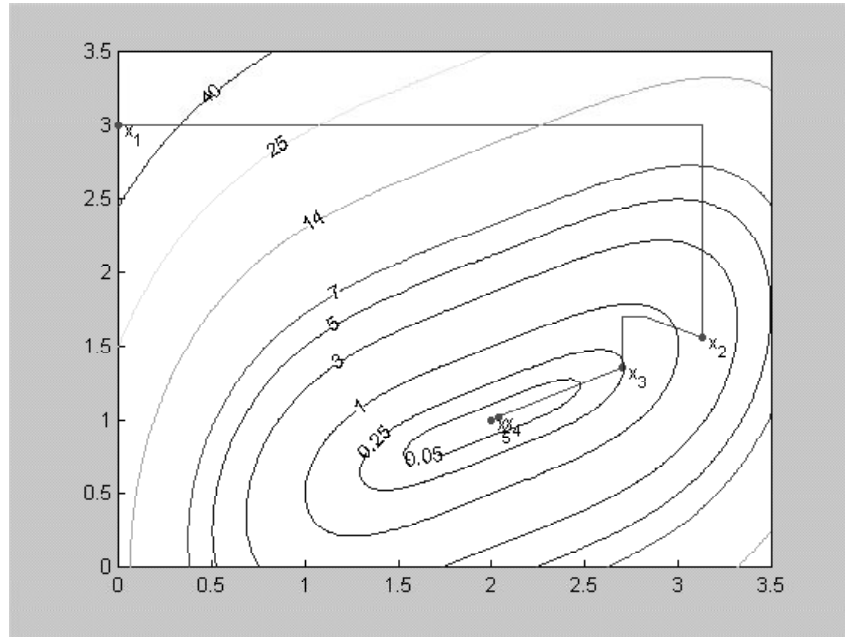


Figura 5.6: Método de Hooke-Jeeves

\mathbf{x}_k y \mathbf{x}_{k+1} tiene que tener la dirección de máximo descenso en \mathbf{x}_k . Si $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ es una dirección de descenso en \mathbf{x}_k , entonces por el teorema de caracterización de las mismas (puesto que $f(\mathbf{x})$ es diferenciable), tenemos

$$\frac{f(\mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{d}) - f(\mathbf{x}_k)}{\alpha} \approx \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d} < 0$$

y si queremos maximizar la pendiente (término izquierdo), tendremos que resolver el problema

$$\text{Minimizar } \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d}$$

para todas las direcciones \mathbf{d} , de descenso.

Como estamos interesados en la dirección, tomaremos \mathbf{d} un vector unitario, es decir, $\|\mathbf{d}\| = 1$.

$$\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d} < 0 \Rightarrow -\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d} = \left| \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d} \right|$$

y aplicando la desigualdad de Schwartz

$$\left| \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d} \right| \leq \|\nabla f(\mathbf{x}_k)\| \cdot \|\mathbf{d}\| = \|\nabla f(\mathbf{x}_k)\|$$

y por tanto

$$-\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d} \leq \|\nabla f(\mathbf{x}_k)\|$$

multiplicando por -1

$$\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d} \geq -\|\nabla f(\mathbf{x}_k)\|$$

y la igualdad se obtiene cuando

$$\mathbf{d} = -\frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{\|\nabla f(\mathbf{x}_k)\|}$$

La recta que une \mathbf{x}_k y \mathbf{x}_{k+1} es, por tanto, tangente a la curva de nivel de f en \mathbf{x}_k ; se define \mathbf{x}_{k+1} como:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \alpha_k \nabla f(\mathbf{x}_k) \quad \alpha_k \geq 0 \quad (5.2)$$

Iteración k	Δ	\mathbf{x}_k $f(\mathbf{x}_k)$	j	\mathbf{y}_j $f(\mathbf{y}_j)$	\mathbf{d}_j	$\mathbf{y}_j + \Delta \mathbf{d}_j$ $f(\mathbf{y}_j + \Delta \mathbf{d}_j)$	$\mathbf{y}_j - \Delta \mathbf{d}_j$ $f(\mathbf{y}_j - \Delta \mathbf{d}_j)$
1	0.2	(2.00, 3.00) 16.00	1	(2.00, 3.00) 16.00	(1.00, 0.00)	(2.20, 3.00) 14.44(<i>E</i>)	—
			2	(2.20, 3.00) 14.44	(0.00, 1.00)	(2.20, 3.20) 17.64(<i>F</i>)	(2.20, 2.80) 11.56(<i>E</i>)
2	0.2	(2.20, 2.80) 11.56	1	(2.40, 2.60) 7.87	(1.0, 0.0)	(2.60, 2.60) 6.89(<i>E</i>)	—
			2	(2.60, 2.60) 6.89	(0.0, 1.0)	(2.60, 2.80) 9.13(<i>F</i>)	(2.60, 2.40) 4.97(<i>E</i>)
3	0.2	(2.60, 2.40) 4.97	1	(3.00, 2.00) 2.00	(1.0, 0.0)	(3.20, 2.00) 2.71(<i>F</i>)	(2.80, 2.00) 1.85(<i>E</i>)
			2	(2.80, 2.00) 1.85	(0.0, 1.0)	(2.80, 2.20) 2.97(<i>F</i>)	(2.80, 1.80) 1.05(<i>E</i>)
4	0.2	(2.80, 1.80) 1.05	1	(3.00, 1.20) 1.36	(1.0, 0.0)	(3.20, 1.20) 2.71(<i>F</i>)	(2.80, 1.20) 0.57(<i>E</i>)
			2	(2.80, 1.20) 0.57	(0.0, 1.0)	(2.80, 1.40) 0.41(<i>E</i>)	—
5	0.2	(2.80, 1.40) 0.41	1	(2.80, 1.00) 1.05	(1.0, 0.0)	(3.00, 1.00) 2.00(<i>F</i>)	(2.60, 1.00) 0.49(<i>E</i>)
			2	(2.60, 1.00) 0.49	(0.0, 1.0)	(2.60, 1.20) 0.17(<i>E</i>)	—

Tabla 5.3: Método de Hooke-Jeeves de pasos discretos

El problema que se plantea consiste en determinar el α_k adecuado. En general para que la sucesión “siga” la curva de máxima pendiente α_k debe ser pequeño, lo que ralentiza el algoritmo, mientras que si α_k es grande, pueden producirse grandes desviaciones sobre dicha curva de máxima pendiente.

El valor de α_k se obtiene al minimizar la función $f(\mathbf{x})$, en la dirección que indica el gradiente de $f(\mathbf{x})$ en el punto \mathbf{x}_k , de modo que en el punto \mathbf{x}_{k+1} se alcance el mínimo de f sobre la recta normal de ecuación

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_k - \alpha \nabla f(\mathbf{x}_k) \quad \alpha \geq 0$$

Es decir, elegimos α_k de forma que minimice la curva $g(\alpha) = f(\mathbf{x}_k - \alpha \nabla f(\mathbf{x}_k))$ respecto a α .

El método se aproxima al mínimo de una forma lenta, puesto que el cambio en las variables está directamente relacionado con la magnitud del gradiente, que tiende a 0. No hay ningún mecanismo para producir una aceleración hacia el mínimo en las iteraciones finales. La mejor ventaja del método de Cauchy es la propiedad de descenso que tiene, puesto que por la naturaleza del método en cada iteración aseguramos que

$$f(\mathbf{x}_{k+1}) \leq f(\mathbf{x}_k)$$

Este método también se denomina *método de Cauchy*.

Teniendo en cuenta que una función con un mínimo en \mathbf{x}^* se comporta como una función cuadrática cerca de ese punto, veremos a continuación qué sucede con una función de este tipo.

Iteración k	Δ	\mathbf{x}_k $f(\mathbf{x}_k)$	j	\mathbf{y}_j $f(\mathbf{y}_j)$	\mathbf{d}_j	$\mathbf{y}_j + \Delta \mathbf{d}_j$ $f(\mathbf{y}_j + \Delta \mathbf{d}_j)$	$\mathbf{y}_j - \Delta \mathbf{d}_j$ $f(\mathbf{y}_j - \Delta \mathbf{d}_j)$
6	0.2	(2.60, 1.20) 0.17	1	(2.40, 1.00) 0.19	(1.00, 0.00)	(2.60, 1.00) 0.49(F)	(2.20, 1.00) 0.04(E)
			2	(2.20, 1.00) 0.04	(0.00, 1.00)	(2.20, 1.20) 0.04(F)	(2.20, 0.80) 0.36(F)
7	0.2	(2.20, 1.00) 0.04	1	(1.80, 0.80) 0.04	(1.0, 0.0)	(2.00, 0.80) 0.16(F)	(1.60, 0.80) 0.03(E)
			2	(1.60, 0.80) 0.03	(0.0, 1.0)	(1.60, 1.00) 0.19(F)	(1.60, 0.60) 0.19(F)
8	0.2	(1.60, 0.80) 0.03	1	(1.00, 0.60) 0.67	(1.0, 0.0)	(1.20, 0.60) 0.41(E)	—
			2	(1.20, 0.60) 0.41	(0.0, 1.0)	(1.20, 0.80) 0.57(F)	(1.20, 0.40) 0.57(F)
9	0.1	(1.60, 0.80) 0.03	1	(1.60, 0.80) 0.03	(1.0, 0.0)	(1.70, 0.80) 0.02(E)	—
			2	(1.70, 0.80) 0.02	(0.0, 1.0)	(1.70, 0.90) 0.02(F)	(1.70, 0.70) 0.10(F)
10	0.1	(1.70, 0.80) 0.02	1	(1.80, 0.80) 0.04	(1.0, 0.0)	(1.90, 0.80) 0.09(F)	(1.70, 0.80) 0.02(E)
			2	(1.70, 0.80) 0.02	(0.0, 1.0)	(1.70, 0.90) 0.02(F)	(1.70, 0.70) 0.10(F)

Tabla 5.4: continuación

Caso cuadrático

Sea $f(\mathbf{x})$ una función cuadrática de la forma

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{Q} \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c$$

donde $\mathbf{b}, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$; $\mathbf{Q} \in M_{n \times n}(\mathbb{R})$ simétrica y definida positiva, $c \in \mathbb{R}$.

El único punto estacionario se puede hallar directamente igualando el gradiente a 0

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{Q} \mathbf{x} + \mathbf{b}$$

Entonces $\nabla f(\mathbf{x}) = 0 \iff \mathbf{x}^* = -\mathbf{Q}^{-1} \mathbf{b}$, punto en el se alcanza el mínimo porque el Hessiano de $f(x)$ ($\mathbf{H}f(\mathbf{x}) = \mathbf{Q}$) en ese punto (y en todos) es definido positivo por hipótesis. Apliquemos el método del gradiente a $f(\mathbf{x})$. Para ello hallamos el valor de α_k , suponiendo que $\nabla f(\mathbf{x}_k) \neq 0$ y calculando el mínimo de la función univariante en α

$$f(\mathbf{x}_k - \alpha \nabla f(\mathbf{x}_k)) = \frac{1}{2} (\mathbf{x}_k - \alpha \nabla f(\mathbf{x}_k))^T \mathbf{Q} (\mathbf{x}_k - \alpha \nabla f(\mathbf{x}_k)) + \mathbf{b}^T (\mathbf{x}_k - \alpha \nabla f(\mathbf{x}_k)) + c$$

cuya derivada respecto a α es:

$$\frac{df(\mathbf{x}_k - \alpha \nabla f(\mathbf{x}_k))}{d\alpha} = \alpha \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{Q} \nabla f(\mathbf{x}_k) - \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \nabla f(\mathbf{x}_k)$$

derivada que se anula para

$$\alpha^* = \frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \nabla f(\mathbf{x}_k)}{\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{Q} \nabla f(\mathbf{x}_k)}$$

que corresponde a un mínimo ya que al ser \mathbf{Q} definida positiva

$$\frac{d^2 f(\mathbf{x}_k - \alpha^* \nabla f(\mathbf{x}_k))}{d\alpha^2} = \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{Q} \nabla f(\mathbf{x}_k) > 0$$

El algoritmo según la ecuación 5.2 estará definido por

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \nabla f(\mathbf{x}_k)}{\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{Q} \nabla f(\mathbf{x}_k)} \nabla f(\mathbf{x}_k)$$

Conviene observar dos características de este método:

1. El mínimo de $f(\mathbf{x})$ en la recta $\mathbf{x} = \mathbf{x}_k - \alpha \nabla f(\mathbf{x}_k)$, se encuentra en \mathbf{x}_{k+1} , donde el gradiente $\nabla f(\mathbf{x}_{k+1})$ es perpendicular a dicha recta. Por ello ésta es ortogonal a la recta donde habrá que buscar el nuevo punto \mathbf{x}_{k+2} , es decir, $\nabla f(\mathbf{x}_k) \perp \nabla f(\mathbf{x}_{k+1})$, y el algoritmo va haciendo *zig-zag* en ángulo recto.
2. Si modificamos el método con $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{Q}^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_k)$, teniendo en cuenta que para funciones cuadráticas $\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{Q}\mathbf{x} + \mathbf{b} \implies \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{Q}^{-1}(\mathbf{Q}\mathbf{x}_k + \mathbf{b}) = -\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{b} = \mathbf{x}^*$, lo que significa que se llega a la solución en un único paso. Esta idea proporciona las bases para el desarrollo del método de Newton.

Ejemplo 5.5 Considerar la función

$$f(\mathbf{x}) = 8x_1^2 + 4x_1x_2 + 5x_2^2$$

obtener el mínimo de $f(\mathbf{x})$ utilizando el método de Cauchy

Solución: Para comenzar, calculamos las componentes del gradiente de $f(\mathbf{x})$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x_1} &= 16x_1 + 4x_2 \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} &= 4x_1 + 10x_2 \end{aligned}$$

Ahora para emplear el método de la máxima pendiente, utilizamos $\mathbf{x}^{(0)}$ como aproximación inicial de la solución, donde:

$$\mathbf{x}^{(0)} = \begin{bmatrix} 10 \\ 10 \end{bmatrix}$$

y generamos una nueva aproximación mediante la fórmula 5.2

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{(1)} &= \mathbf{x}^{(0)} - \alpha^{(0)} \nabla f(\mathbf{x}^{(0)}) \\ &= \begin{bmatrix} 10 \\ 10 \end{bmatrix} - \alpha \begin{bmatrix} 200 \\ 140 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 10 - 200\alpha \\ 10 - 140\alpha \end{bmatrix} \end{aligned}$$

El valor del parámetro $\alpha^{(0)}$ se obtiene minimizando en la dirección $\nabla f(\mathbf{x}^{(0)})$, de forma que:

$$f(\mathbf{x}^{(1)}) = \min_{\alpha^{(0)} \geq 0} f(\mathbf{x}^{(0)} - \alpha^{(0)} \nabla f(\mathbf{x}^{(0)}))$$

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}^{(0)} - \alpha \nabla f(\mathbf{x}^{(0)})) &= f(10 - 200\alpha, 10 - 140\alpha) \\ &= 1700 - 59600\alpha + 530000\alpha^2 \end{aligned}$$

que es una función cuadrática unidimensional cuyo mínimo puede obtenerse fácilmente por derivación

$$f'(\alpha) = 1060000\alpha - 59600$$

$$f'(\alpha) = 0 \iff \alpha = \frac{59600}{1060000} = 0.056$$

por tanto

$$\mathbf{x}^{(1)} = \begin{bmatrix} -1.20 \\ 2.16 \end{bmatrix}$$

El paso siguiente es calcular $\mathbf{x}^{(2)}$

$$\mathbf{x}^{(2)} = \mathbf{x}^{(1)} - \alpha^{(1)} \nabla f(\mathbf{x}^{(1)})$$

evaluando el gradiente en $\mathbf{x}^{(1)}$ y realizando la búsqueda lineal.

Los valores obtenidos para los 4 primeras iteraciones son los siguientes:

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$f(\mathbf{x}^{(k)})$
1	-1.2403	2.1181	24.2300
2	0.1441	0.1447	0.3540
3	-0.0181	0.0309	0.0052
4	0.0021	0.0021	0.0000

Dado un punto \mathbf{x} , el algoritmo del método del gradiente o de la máxima pendiente se construye desarrollando una búsqueda lineal a lo largo de la dirección $\frac{-\nabla f(\mathbf{x})}{\|\nabla f(\mathbf{x})\|}$, o equivalentemente, a lo largo de la dirección $-\nabla f(\mathbf{x})$. El algoritmo asociado a este método podría realizarse como sigue:

Algoritmo del método del Gradiente

- **Inicialización.** Elegir $\epsilon > 0$ un escalar que determina la terminación del método. Elegir un punto de partida \mathbf{x}_1 , hacer $k = 1$ e ir al paso principal.
- **Principal.** Si $\|\nabla f(\mathbf{x}_k)\| < \epsilon$, parar; en otro caso hacer $\mathbf{d}_k = -\nabla f(\mathbf{x}_k)$, y calcular α_k , el valor que minimiza la función univariante $f(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d}_k)$, $\alpha \geq 0$. Hacer $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k$, reemplazar k por $k + 1$ y repetir el paso principal.

Debido a la lentitud en la convergencia de este método, este se puede modificar de forma que limitemos el número de iteraciones realizadas, introduciendo para ello un nuevo parámetro, M , en el paso principal que controle si dicho límite es superado o no.

Ejemplo 5.6 Considerar el siguiente problema

$$\text{Minimizar } (x_1 - 2)^4 + (x_1 - 2x_2)^2$$

Solución: Resolveremos el problema utilizando el método del gradiente, comenzando con el punto $\mathbf{x}_1^T = (0.00, 3.00)$. La tabla 5.5 muestra un resumen de los cálculos. Después de 7 iteraciones, alcanzamos el punto $\mathbf{x}_8^T = (2.28, 1.15)$. El algoritmo termina puesto que $\|\nabla f(\mathbf{x}_8)\| = 0.09$ es pequeño. Podemos observar la evolución del método en la figura 5.7. Notar que la solución de este problema es $(2.00, 1.00)$.

Iteración k	\mathbf{x}_k^T	$f(\mathbf{x}_k)$	$\nabla f^T(\mathbf{x}_k)$	$\ \nabla f(\mathbf{x}_k)\ $	$\mathbf{d}_k^T = -\nabla f^T(\mathbf{x}_k)$	α_k	\mathbf{x}_{k+1}^T
1	(0.00, 3.00)	52.00	(-44.00, 24.00)	50.12	(44.00, -24.00)	0.062	(2.70, 1.51)
2	(2.70, 1.51)	0.34	(0.73, 1.28)	0.147	(-0.73, -1.28)	0.24	(2.52, 1.20)
3	(2.52, 1.20)	0.09	(0.80, -0.48)	0.93	(-0.80, 0.48)	0.11	(2.43, 1.25)
4	(2.43, 1.25)	0.04	(0.18, 0.28)	0.33	(-0.18, -0.28)	0.31	(2.37, 1.16)
5	(2.37, 1.16)	0.02	(0.30, -0.20)	0.36	(-0.30, 0.20)	0.12	(2.33, 1.18)
6	(2.33, 1.18)	0.01	(0.08, 0.12)	0.14	(-0.08, -0.12)	0.36	(2.30, 1.14)
7	(2.30, 1.14)	0.009	(0.15, -0.08)	0.17	(-0.15, 0.08)	0.13	(2.28, 1.15)
8	(2.28, 1.15)	0.007	(0.05, 0.08)	0.09			

Tabla 5.5: Método del gradiente

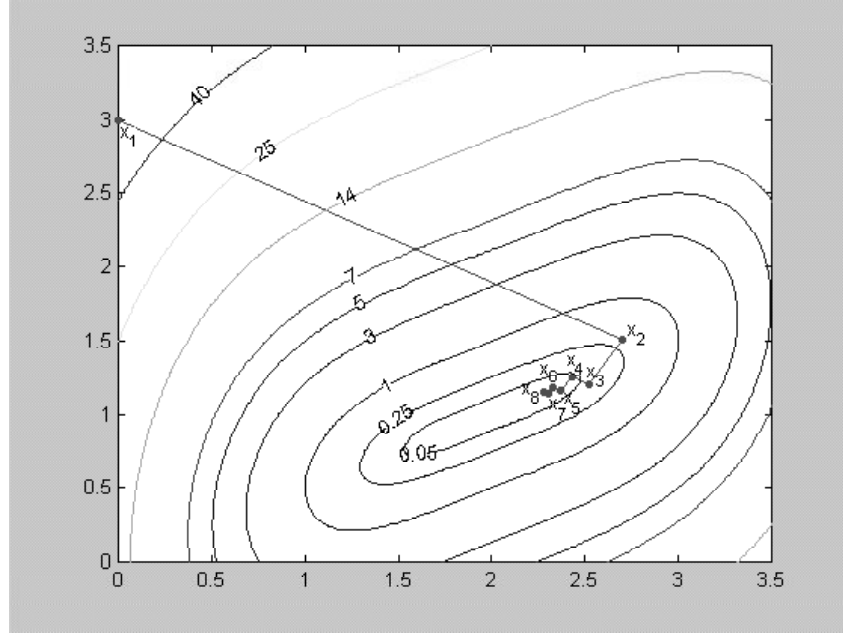


Figura 5.7: Método del Gradiente

5.2.2 Método de Newton

Como en el caso univariante, el método de Newton consistirá en la aproximación a la función f mediante una función cuadrática en x_k y calcular x_{k+1} como el mínimo exacto de esta aproximación. Si tomamos como aproximación de $f(\mathbf{x})$ su desarrollo en series de Taylor hasta el segundo orden obtenemos la expresión:

$$f(\mathbf{x}) \simeq f(\mathbf{x}_k) + \nabla f(\mathbf{x}_k)^T(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) + \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k)^T \mathbf{H}f(\mathbf{x}_k)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k)$$

donde se ha supuesto que la función $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ es de clase $\mathcal{C}^2(\mathbb{R}^n)$. De acuerdo con el apartado anterior el mínimo de esta aproximación cuadrática es $\mathbf{x}^* = -\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{b}$, en este caso $\mathbf{Q} = \mathbf{H}f(\mathbf{x}_k)$, y por tanto la expresión de \mathbf{x}_{k+1} toma la forma:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - [\mathbf{H}f(\mathbf{x}_k)]^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_k) \quad (5.3)$$

k	\mathbf{x}_k	$f(\mathbf{x}_k)$	$\nabla f(\mathbf{x}_k)$	$\mathbf{H}f(\mathbf{x}_k)$	$\mathbf{H}f(\mathbf{x}_k)^{-1}$	$-\mathbf{H}f(\mathbf{x}_k)^{-1}\nabla f(\mathbf{x}_k)$	\mathbf{x}_{k+1}
1	$\begin{bmatrix} 0.00 \\ 3.00 \end{bmatrix}$	52.00	$\begin{bmatrix} -44.00 \\ 24.00 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 50.0 & -4.0 \\ -4.0 & 8.0 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{384} \begin{bmatrix} 8.0 & 4.0 \\ 4.0 & 50.0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.67 \\ -2.67 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.67 \\ 0.33 \end{bmatrix}$
2	$\begin{bmatrix} 0.67 \\ 0.33 \end{bmatrix}$	3.13	$\begin{bmatrix} -9.39 \\ -0.04 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 23.23 & -4.0 \\ -4.0 & 8.0 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{169.84} \begin{bmatrix} 8.0 & 4.0 \\ 4.0 & 23.23 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.44 \\ 0.23 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1.11 \\ 0.56 \end{bmatrix}$
3	$\begin{bmatrix} 1.11 \\ 0.56 \end{bmatrix}$	0.63	$\begin{bmatrix} -2.84 \\ -0.04 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 11.50 & -4.0 \\ -4.0 & 8.0 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{76} \begin{bmatrix} 8.0 & 4.0 \\ 4.0 & 11.50 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.30 \\ 0.14 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1.41 \\ 0.70 \end{bmatrix}$
4	$\begin{bmatrix} 1.41 \\ 0.70 \end{bmatrix}$	0.12	$\begin{bmatrix} -0.80 \\ -0.04 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 6.18 & -4.0 \\ -4.0 & 8.0 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{33.44} \begin{bmatrix} 8.0 & 4.0 \\ 4.0 & 6.18 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.20 \\ 0.10 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1.61 \\ 0.80 \end{bmatrix}$
5	$\begin{bmatrix} 1.61 \\ 0.80 \end{bmatrix}$	0.02	$\begin{bmatrix} -0.22 \\ -0.04 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 3.83 & -4.0 \\ -4.0 & 8.0 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{14.64} \begin{bmatrix} 8.0 & 4.0 \\ 4.0 & 3.83 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.13 \\ 0.07 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1.74 \\ 0.87 \end{bmatrix}$
6	$\begin{bmatrix} 1.74 \\ 0.87 \end{bmatrix}$	0.005	$\begin{bmatrix} -0.07 \\ 0.00 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 2.81 & -4.0 \\ -4.0 & 8.0 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{6.84} \begin{bmatrix} 8.0 & 4.0 \\ 4.0 & 2.81 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.09 \\ 0.04 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1.83 \\ 0.91 \end{bmatrix}$
7	$\begin{bmatrix} 1.83 \\ 0.91 \end{bmatrix}$	0.0009	$\begin{bmatrix} 0.0003 \\ -0.04 \end{bmatrix}$				

Tabla 5.6: Método de Newton

Teniendo en cuenta las condiciones de suficiencia de 2° orden para que \mathbf{x}^* sea un punto de mínimo relativo de la función $f(\mathbf{x})$, la matriz $\mathbf{H}f(\mathbf{x}^*)$ debe ser definida positiva \implies Si $f \in \mathcal{C}^2(\mathbb{R}^n)$ y $\mathbf{H}f(\mathbf{x}^*)$ es definida positiva (o al menos semidefinida positiva) el método convergerá cerca de la solución.

Ejemplo 5.7 Consideremos la siguiente función

$$f(\mathbf{x}) = 8x_1^2 + 4x_1x_2 + 5x_2^2$$

donde su gradiente es:

$$\nabla f(\mathbf{x}) = (16x_1 + 4x_2, 4x_1 + 10x_2)$$

y su hessiano:

$$\mathbf{H}f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 16 & 4 \\ 4 & 10 \end{bmatrix}$$

Resuelve el problema de la minimización de $f(\mathbf{x})$ utilizando el método de Newton

Solución: Utilizamos la expresión 5.3, con $\mathbf{x}^{(0)} = \begin{bmatrix} 10 \\ 10 \end{bmatrix}$, obtenemos

$$\mathbf{x}^{(1)} = \begin{bmatrix} 10 \\ 10 \end{bmatrix} - \left(\frac{1}{144} \right) \begin{bmatrix} 10 & -4 \\ -4 & 16 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 200 \\ 140 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10 \\ 10 \end{bmatrix} - \left(\frac{1}{144} \right) \begin{bmatrix} 1440 \\ 1440 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

que es la solución exacta del problema. Este resultado no es sorprendente, ya que, como se esperaba para el método de Newton aplicado a una función cuadrática, el método es exacto.

Ejemplo 5.8 Considerar el siguiente problema

$$\text{Minimizar } (x_1 - 2)^4 + (x_1 - 2x_2)^2$$

Solución: El resumen de los cálculos mediante el método de Newton están dados en la tabla 5.6. En cada iteración, \mathbf{x}_{k+1} está dado mediante la ecuación 5.3.

Después de 6 iteraciones, alcanzamos el punto $\mathbf{x}_7 = (1.83, 0.91)^T$. En este punto $\|\nabla f(\mathbf{x}_7)\| = 0.04$, y el procedimiento termina. En la figura 5.8 se presentan los puntos generados por el método de Newton

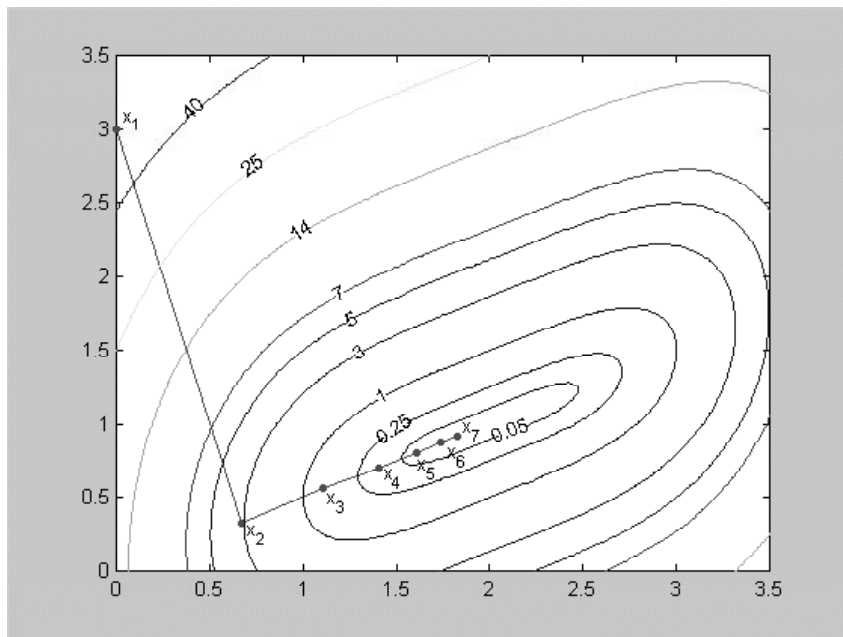


Figura 5.8: Método de Newton

En el ejemplo anterior el valor de la función objetivo decrecía en cada iteración. Sin embargo, para el método de Newton este no es el comportamiento general, por tanto, en general la función $f(\mathbf{x})$ no puede utilizarse como una función descendente con este método.

Método de Newton Modificado

La desventaja del método de Newton es que si la aproximación inicial del método, $\mathbf{x}^{(0)}$, está situada lejos del punto solución \mathbf{x}^* , puede ocurrir, como en el caso del método de Newton-Raphson para funciones de una variable, que la sucesión construida según la ecuación 5.3 sea divergente. Sin embargo, es posible modificar el algoritmo de forma simple y lógica para asegurar que sea descendente, utilizando en cada paso una búsqueda lineal, como en el método de Cauchy. Si construimos la sucesión $\{\mathbf{x}_k\}$ definida según la ecuación iterativa

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \alpha_k [\mathbf{H}f(x_k)]^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_k)$$

eligiendo α_k de forma que

$$f(\mathbf{x}_{k+1}) = \min f\left(\mathbf{x}_k - \alpha [\mathbf{H}f(x_k)]^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_k)\right)$$

Este es el *método de Newton modificado*, y se muestra eficiente cuando existen y se pueden calcular de forma precisa la primera y segunda derivada de $f(\mathbf{x})$. La mayor dificultad del método es calcular la inversa de la matriz hessiana, $\mathbf{H}f(\mathbf{x})$, en cada iteración.

Método de Levenberg-Marquardt

Este método combina los métodos de Cauchy y Newton. La dirección de búsqueda lineal en cada paso del algoritmo está expresada mediante la siguiente ecuación

$$s(\mathbf{x}_k) = -[\mathbf{H}^f(\mathbf{x}_k) + \lambda_k \mathbf{I}]^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_k) \quad (5.4)$$

donde $\lambda_k \geq 0$. En este caso $\alpha_k = +1$ en la ecuación 5.1, puesto que el parámetro λ_k se utiliza para controlar tanto la dirección de búsqueda como la longitud del paso. \mathbf{I} es la matriz identidad en el espacio $M_{n \times n}(\mathbb{R})$. Para comenzar la búsqueda tomamos λ_0 con un valor constante grande y un punto \mathbf{x}_0 , de forma que

$$[\mathbf{H}f(\mathbf{x}_0) + \lambda_0 \mathbf{I}]^{-1} \simeq [\lambda_0 \mathbf{I}]^{-1} = \left(\frac{1}{\lambda_0}\right) \mathbf{I}$$

Por tanto, para λ_0 suficientemente grande, $s(\mathbf{x}_k) \rightarrow -\nabla f(\mathbf{x}_0)$, y tenemos el método del gradiente. Ahora bien si λ decrece hasta cero, entonces obtendremos el método de Newton. De acuerdo a este esquema, después del primer paso, si obtenemos $f(\mathbf{x}_1) < f(\mathbf{x}_0)$, entonces elegimos $\lambda_1 < \lambda_0$, e iteramos de nuevo, en caso contrario ponemos $\lambda_0 = \beta\lambda_0$, con $\beta > 1$, y realizamos el paso previo de nuevo. Resumimos el algoritmo como sigue:

Algoritmo de Marquardt

Paso 1. Definimos \mathbf{x}_1 , el punto inicial o primera aproximación de \mathbf{x}^* . M el máximo número de iteraciones permitido, y ε el criterio de convergencia o parada. Hacemos $k = 1$ y $\lambda_1 = 10^4$

Paso 2. Calculamos $\nabla f(\mathbf{x}_k)$

Paso 3. Si $\|\nabla f(\mathbf{x}_k)\| < \varepsilon \Rightarrow \mathbf{x}^* = \mathbf{x}_k$. Parar

Paso 4. Si $k > M \Rightarrow$ Superado el número de iteraciones. Parar.

Paso 5. Calcular

$$s(\mathbf{x}_k) = -[\mathbf{H}f(\mathbf{x}_k) + \lambda_k \mathbf{I}]^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_k)$$

Paso 6. Calcular

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + s(\mathbf{x}_k)$$

Paso 7. Si $f(\mathbf{x}_{k+1}) < f(\mathbf{x}_k) \Rightarrow \lambda_{k+1} = \frac{1}{2}\lambda_k$ y $k \rightarrow k+1$. Ir al **Paso 2**.

Paso 8. Si $f(\mathbf{x}_{k+1}) \geq f(\mathbf{x}_k) \Rightarrow \lambda_k \rightarrow 2\lambda_k$. Ir al **Paso 5**.

Las ventajas del método son su simplicidad, la propiedad de descenso, la excelente convergencia cerca de la solución, \mathbf{x}^* , y la ausencia de búsqueda lineal. La mayor desventaja es la necesidad de calcular \mathbf{H}_k y resolver el conjunto de ecuaciones correspondientes a 5.4. El método se utiliza concretamente en problemas en los que la función $f(\mathbf{x})$ es una suma de cuadrados de funciones, i.e.

$$f(\mathbf{x}) = f_1^2(\mathbf{x}) + f_2^2(\mathbf{x}) + \cdots + f_m^2(\mathbf{x})$$

5.2.3 Métodos de dirección conjugada

Una de las características del método de Cauchy es que suele ser efectivo lejos del punto solución, decreciendo su efectividad al acercarnos al mismo, mientras que el método de Newton puede no converger a un punto si estamos lejos de la solución, siendo muy efectivo cerca de la misma. Buscaremos en esta sección métodos intermedios entre el método de mayor pendiente y el de Newton. Buscamos métodos que aceleren la convergencia, pero que no tengan el problema del método del gradiente y que no necesiten el cálculo de la inversa de la matriz Hessiana del método de Newton.

Definiremos los métodos de dirección conjugada basándonos en el caso cuadrático puro

$$\text{Minimizar } \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{Q} \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} \quad (5.5)$$

donde \mathbf{Q} es una matriz $n \times n$, simétrica y definida positiva. Las técnicas desarrolladas para este problema se extienden, por aproximación, a problemas más generales ya que en el punto solución todo problema es aproximadamente cuadrático. Definiremos en primer lugar cuando dos vectores son \mathbf{Q} -ortogonales o conjugados respecto a \mathbf{Q} .

Definición 5.9 (Direcciones conjugadas) Sea $\mathbf{Q} \in M_{n \times n}(\mathbb{R})$ simétrica, dos vectores $\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2 \in \mathbb{R}^n$, son \mathbf{Q} -ortogonales o conjugados respecto a $\mathbf{Q} \iff$

$$\mathbf{d}_1^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_2 = 0$$

Un conjunto de vectores $\{\mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_k\}$ es \mathbf{Q} -ortogonal \iff

$$\mathbf{d}_i^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_j = 0 \quad \forall \quad i \neq j$$

En adelante \mathbf{Q} será definida positiva.

A continuación vemos una propiedad muy importante de las direcciones \mathbf{Q} -ortogonales

Proposición 5.10 Sea $\mathbf{Q} \in M_{n \times n}(\mathbb{R})$ simétrica y definida positiva, $\{\mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_k\} \in \mathbb{R}^n$ vectores \mathbf{Q} -ortogonales, $\mathbf{d}_j \neq 0; j = 1, \dots, k \implies \{\mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_k\}$ son linealmente independientes.

Demostración: Si $\exists \alpha_j; j = 1, \dots, k$ con $\alpha_1 \mathbf{d}_1 + \dots + \alpha_k \mathbf{d}_k = 0$. Si multiplicamos por \mathbf{Q} y tomamos el producto escalar por \mathbf{d}_j , y lo hacemos para cualquier j

$$(\alpha_1 \mathbf{d}_1 + \dots + \alpha_k \mathbf{d}_k)^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_j = 0$$

$$(\alpha_j \mathbf{d}_j)^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_j = 0$$

como \mathbf{Q} es definida positiva $\implies (\mathbf{x}^T \mathbf{Q} \mathbf{x} > 0, \mathbf{x} \neq 0) \implies \alpha_j = 0$, y eso ocurre para cualquier $j = 1, \dots, k$; por tanto los vectores $\mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_k$ son linealmente independientes. ■

Esta propiedad nos permite utilizar un conjunto de vectores \mathbf{Q} -ortogonales como direcciones de búsqueda en un problema de minimización.

Supongamos que queremos minimizar la función cuadrática

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{Q} \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x}$$

cuando \mathbf{Q} es definida positiva. Recordemos que la única solución al problema es la única solución de la ecuación lineal

$$0 = \mathbf{Q} \mathbf{x} + \mathbf{b}$$

es decir $\mathbf{x}^* = -\mathbf{Q}^{-1} \mathbf{b}$.

Si $\{\mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_n\} \in \mathbb{R}^n; \mathbf{d}_k \neq 0; k = 1, \dots, n$ y \mathbf{Q} -ortogonales, por la proposición anterior constituyen una base de \mathbb{R}^n , entonces \mathbf{x}^* se puede expresar en términos de esta base

$$\mathbf{x}^* = -\mathbf{Q}^{-1} \mathbf{b} = \alpha_1 \mathbf{d}_1 + \dots + \alpha_n \mathbf{d}_n \quad (5.6)$$

Si multiplicamos por $\mathbf{d}_k^T \mathbf{Q}$ para cada k , obtenemos

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{x}^* &= \mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} (\alpha_1 \mathbf{d}_1 + \dots + \alpha_n \mathbf{d}_n) \\ &= \sum_{j=1}^n \mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \alpha_j \mathbf{d}_j \\ &= \sum_{j=1}^n \alpha_j \mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_j \end{aligned}$$

Como $\{\mathbf{d}_j\}$ son \mathbf{Q} -ortogonales $\implies \mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_j = 0$ si $j \neq k$ y nos queda

$$\mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{x}^* = \alpha_k \mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_k$$

y de ahí despejamos el valor de α_k

$$\alpha_k = \frac{\mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{x}^*}{\mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_k} = -\frac{\mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{b}}{\mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_k} = -\frac{\mathbf{d}_k^T \mathbf{b}}{\mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_k} \quad (5.7)$$

Por tanto \mathbf{x}^* puede expresarse como

$$\mathbf{x}^* = \sum_{k=1}^n \frac{-\mathbf{d}_k^T \mathbf{b}}{\mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_k} \mathbf{d}_k \quad (5.8)$$

y podemos obtener el valor del mínimo a partir de un conjunto de n vectores \mathbf{Q} -ortogonales. Habrá que elegir por tanto, un conjunto \mathbf{Q} -ortogonal, $\{\mathbf{d}_k\}_{k=1}^n$.

El siguiente teorema proporciona una forma de construir un algoritmo de búsqueda utilizando direcciones conjugadas.

Teorema 5.11 (Teorema de la dirección conjugada) Si f es la función cuadrática pura (sin término independiente)

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{Q} \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x}$$

y $\{\mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_n\} \in \mathbb{R}^n$, no nulos y \mathbf{Q} -ortogonales dos a dos $\implies \forall \mathbf{x}_1 \in \mathbb{R}^n$, el algoritmo

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{k+1} &= \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k \\ \alpha_k &= -\frac{\mathbf{d}_k^T (\mathbf{Q} \mathbf{x}_k + \mathbf{b})}{\mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_k} \end{aligned} \quad (5.9)$$

converge en n pasos a la solución $\mathbf{x}^* \implies \mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}^*$

Demostración: Utilizando la ecuación recursiva de 5.9 obtenemos

$$S \begin{cases} \mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1 + \alpha_1 \mathbf{d}_1 \\ \mathbf{x}_3 = \mathbf{x}_2 + \alpha_2 \mathbf{d}_2 = \mathbf{x}_1 + \alpha_1 \mathbf{d}_1 + \alpha_2 \mathbf{d}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_1 + \alpha_1 \mathbf{d}_1 + \dots + \alpha_n \mathbf{d}_n \end{cases}$$

entonces

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_1 + \sum_{k=1}^n \alpha_k \mathbf{d}_k = \mathbf{x}_1 + \sum_{k=1}^n \frac{-\mathbf{d}_k^T (\mathbf{Q} \mathbf{x}_k + \mathbf{b})}{\mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_k} \mathbf{d}_k$$

como $\{\mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_n\}$ es una base de $\mathbb{R}^n \implies \mathbf{x}_1 = \lambda_1 \mathbf{d}_1 + \dots + \lambda_n \mathbf{d}_n$, siendo

$$\lambda_k = \frac{\mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{x}_1}{\mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_k}$$

y

$$\mathbf{x}_1 = \sum_{k=1}^n \frac{\mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{x}_1}{\mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_k} \mathbf{d}_k$$

Del sistema S y teniendo en cuenta que $\{\mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_n\}$ son \mathbf{Q} -ortogonales, deducimos que

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{x}_k &= \mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \left(\mathbf{x}_1 + \sum_{j=1}^{k-1} \alpha_j \mathbf{d}_j \right) \\ &= \mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{x}_1 + \sum_{j=1}^{k-1} \mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_j \alpha_j \\ &= \mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{x}_1 \end{aligned}$$

Para \mathbf{x}_{n+1} tenemos:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{n+1} &= \mathbf{x}_1 + \sum_{k=1}^n \frac{-\mathbf{d}_k^T (\mathbf{Q} \mathbf{x}_k + \mathbf{b})}{\mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_k} \mathbf{d}_k \\ &= \sum_{k=1}^n \frac{\mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{x}_1}{\mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_k} \mathbf{d}_k + \sum_{k=1}^n \frac{-\mathbf{d}_k^T (\mathbf{Q} \mathbf{x}_k + \mathbf{b})}{\mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_k} \mathbf{d}_k \\ &= \sum_{k=1}^n \frac{\mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{x}_1}{\mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_k} \mathbf{d}_k + \sum_{k=1}^n \frac{-\mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{x}_k - \mathbf{d}_k^T \mathbf{b}}{\mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_k} \mathbf{d}_k \\ &= \sum_{k=1}^n \frac{-\mathbf{d}_k^T \mathbf{b}}{\mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_k} \mathbf{d}_k \end{aligned}$$

que es \mathbf{x}^* . ■

Estos métodos son intermedios entre el de Newton que necesita un único paso y el del gradiente que necesita infinitos.

El siguiente resultado nos proporcionará un conjunto de resultados utilizados posteriormente para la construcción de un conjunto de vectores \mathbf{Q} -ortogonal.

Teorema 5.12 Sea $f(\mathbf{x})$ la función cuadrática pura

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{Q} \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x}$$

donde $\mathbf{Q} \in M_{n \times n}(\mathbb{R})$ es simétrica y definida positiva. Sean $\{\mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_n\}$ vectores de \mathbb{R}^n , \mathbf{Q} -conjugados, y sea $\mathbf{x}_1 \in \mathbb{R}^n$. Para $k = 1, \dots, n$; sea α_k la solución óptima del problema de minimizar $f(\mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{d}_k)$, $\alpha \in \mathbb{R}$, y definamos $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k$. Entonces para $k = 1, \dots, n-1$, tenemos

1. $\nabla f(\mathbf{x}_{k+1})^T \mathbf{d}_j = 0 \quad j = 1, \dots, k$
2. $\nabla f(\mathbf{x}_1)^T \mathbf{d}_k = \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d}_k$
3. \mathbf{x}_{k+1} es la solución óptima del problema de minimizar $f(\mathbf{x})$ sujeto a $\mathbf{x} - \mathbf{x}_1 \in \mathcal{L}(\mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_k)$, donde $\mathcal{L}(\mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_k)$ es el subespacio lineal generado por $\mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_k$, es decir

$$\mathcal{L}(\mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_k) = \left\{ \sum_{j=1}^k \beta_j \mathbf{d}_j : \beta_j \in \mathbb{R} \right\}$$

En particular \mathbf{x}_{n+1} es el punto que minimiza f sobre \mathbb{R}^n

Demostración: Para probar la parte 1, notar que $f(\mathbf{x}_j + \alpha \mathbf{d}_j)$ alcanza el mínimo en α_j sólo si, $\nabla f(\mathbf{x}_j + \alpha \mathbf{d}_j)^T \mathbf{d}_j = 0$, es decir, $\nabla f(\mathbf{x}_{j+1})^T \mathbf{d}_j = 0$. Así, el apartado 1 se cumple para $j = k$. Para $j < k$, notar que

$$\nabla f(\mathbf{x}_{k+1}) = \mathbf{b} + \mathbf{Q} \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{b} + \mathbf{Q} \mathbf{x}_{j+1} + \mathbf{Q} \left(\sum_{i=j+1}^k \alpha_i \mathbf{d}_i \right) \quad (5.10)$$

$$\nabla f(\mathbf{x}_{k+1}) = \nabla f(\mathbf{x}_{j+1}) + \mathbf{Q} \left(\sum_{i=j+1}^k \alpha_i \mathbf{d}_i \right) \quad (5.11)$$

Por la propiedad de ser conjugados, $\mathbf{d}_i^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_j = 0$ si $i = j+1, \dots, k$. Así a partir de la ecuación 5.10 se cumple $\nabla f(\mathbf{x}_{k+1})^T \mathbf{d}_j = 0$ y queda demostrada la primera parte.

Si se reemplaza k por $k-1$ y $j = 0$ en la ecuación 5.10 obtenemos

$$\nabla f(\mathbf{x}_k) = \nabla f(\mathbf{x}_1) + \mathbf{Q} \left(\sum_{i=1}^{k-1} \alpha_i \mathbf{d}_i \right) \quad \text{Para } k \geq 2$$

Multiplicando por \mathbf{d}_k^T y observando que $\mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_i = 0$ para $i = 1, \dots, k-1$, se prueba el apartado 2, para $k \geq 2$. La demostración es trivial para $k = 1$.

Para demostrar la tercera parte, puesto que $\mathbf{d}_i^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_j = 0$ para $i \neq j$, obtenemos

$$f(\mathbf{x}_{k+1}) = f[\mathbf{x}_1 + (\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_1)] = f \left(\mathbf{x}_1 + \sum_{j=1}^k \alpha_j \mathbf{d}_j \right) \quad (5.12)$$

$$f(\mathbf{x}_{k+1}) = f(\mathbf{x}_1) + \nabla f(\mathbf{x}_1)^T \left(\sum_{j=1}^k \alpha_j \mathbf{d}_j \right) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^k \alpha_j^2 \mathbf{d}_j^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_j \quad (5.13)$$

Suponiendo que $\mathbf{x} - \mathbf{x}_1 \in \mathcal{L}(\mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_k)$, entonces \mathbf{x} puede escribirse como $\mathbf{x}_1 + \sum_{j=1}^k \beta_j \mathbf{d}_j$. Como en la ecuación 5.12, tenemos

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_1) + \nabla f(\mathbf{x}_1)^T \left(\sum_{j=1}^k \beta_j \mathbf{d}_j \right) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^k \beta_j^2 \mathbf{d}_j^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_j \quad (5.14)$$

Para completar la demostración, necesitamos probar que $f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{x}_{k+1})$. Si por el contrario, suponemos que $f(\mathbf{x}) < f(\mathbf{x}_{k+1})$. A partir de las ecuaciones 5.12 y 5.14, tenemos

$$\nabla f(\mathbf{x}_1)^T \left(\sum_{j=1}^k \beta_j \mathbf{d}_j \right) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^k \beta_j^2 \mathbf{d}_j^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_j < \nabla f(\mathbf{x}_1)^T \left(\sum_{j=1}^k \alpha_j \mathbf{d}_j \right) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^k \alpha_j^2 \mathbf{d}_j^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_j$$

Por definición de α_j , notar que $f(\mathbf{x}_j + \alpha_j \mathbf{d}_j) \leq f(\mathbf{x}_j + \beta_j \mathbf{d}_j)$, para cada j . Por tanto

$$f(\mathbf{x}_j) + \alpha_j \nabla f(\mathbf{x}_j)^T \mathbf{d}_j + \frac{1}{2} \alpha_j^2 \mathbf{d}_j^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_j \leq f(\mathbf{x}_j) + \beta_j \nabla f(\mathbf{x}_j)^T \mathbf{d}_j + \frac{1}{2} \beta_j^2 \mathbf{d}_j^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_j$$

Por el apartado 2, $\nabla f(\mathbf{x}_j)^T \mathbf{d}_j = \nabla f(\mathbf{x}_1)^T \mathbf{d}_j$ y sustituyendo en la desigualdad anterior, obtenemos

$$\alpha_j \nabla f(\mathbf{x}_1)^T \mathbf{d}_j + \frac{1}{2} \alpha_j^2 \mathbf{d}_j^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_j \leq \beta_j \nabla f(\mathbf{x}_1)^T \mathbf{d}_j + \frac{1}{2} \beta_j^2 \mathbf{d}_j^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_j \quad (5.15)$$

Sumando la ecuación 5.15 para $j = 1, \dots, k$ contradecimos la ecuación 5.14. Así \mathbf{x}_{k+1} es un punto de mínimo sobre la variedad $\mathbf{x}_1 + \mathcal{L}(\mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_k)$. En particular, puesto que $(\mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_n)$ son linealmente independientes, entonces $\mathcal{L}(\mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_n) = \mathbb{R}^n$, y por tanto \mathbf{x}_{k+1} es un punto de mínimo de $f(\mathbf{x})$ sobre \mathbb{R}^n . ■

Por otra parte el siguiente teorema nos proporciona el método de construcción del conjunto de direcciones \mathbf{Q} -ortogonales

Teorema 5.13 Sea f la función cuadrática pura

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{Q} \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x}$$

donde $\mathbf{Q} \in M_{n \times n}(\mathbb{R})$ es simétrica y definida positiva

Sean $\{\mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_k\}$ direcciones \mathbf{Q} -conjugadas, y sean $\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1 \in \mathbb{R}^n$. Si para todo $j = 1, \dots, k$, se construyen los puntos \mathbf{x}_{j+1} y \mathbf{y}_{j+1} según las ecuaciones recurrentes

$$\mathbf{x}_{j+1} = \mathbf{x}_j + \alpha_j \mathbf{d}_j$$

$$\mathbf{y}_{j+1} = \mathbf{y}_j + \beta_j \mathbf{d}_j$$

donde α_j y β_j son las soluciones de los problemas: Minimizar $f(\mathbf{x}_j + \alpha \mathbf{d}_j)$ y Minimizar $f(\mathbf{y}_j + \beta \mathbf{d}_j)$, respectivamente con $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$. Entonces $\mathbf{d}_{k+1} = (\mathbf{y}_{k+1} - \mathbf{x}_{k+1})$ es \mathbf{Q} -ortogonal con $\{\mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_k\}$.

Demostración: Por el apartado 1 del teorema anterior tenemos

$$\nabla f(\mathbf{x}_{k+1})^T \mathbf{d}_j = 0 \quad j = 1, \dots, k$$

y también

$$\nabla f(\mathbf{y}_{k+1})^T \mathbf{d}_j = 0 \quad j = 1, \dots, k$$

Utilizando ahora que

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{Q} \mathbf{x} + \mathbf{b}$$

obtenemos

$$(\mathbf{Q} \mathbf{x}_{k+1} + \mathbf{b})^T \mathbf{d}_j = 0$$

y

$$(\mathbf{Q} \mathbf{y}_{k+1} + \mathbf{b})^T \mathbf{d}_j = 0$$

Restando ambas expresiones

$$(\mathbf{Q} \mathbf{y}_{k+1} + \mathbf{b})^T \mathbf{d}_j - (\mathbf{Q} \mathbf{x}_{k+1} + \mathbf{b})^T \mathbf{d}_j = 0 \iff (\mathbf{y}_{k+1} - \mathbf{x}_{k+1})^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_j = 0 \quad j = 1, \dots, k$$

y por tanto $\mathbf{d}_{k+1} = (\mathbf{y}_{k+1} - \mathbf{x}_{k+1})$ es \mathbf{Q} -ortogonal con $\{\mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_k\}$. ■

Ejemplo 5.14 Considerar el siguiente problema

$$\text{Minimizar } f(\mathbf{x}) = -12x_2 + 4x_1^2 + 4x_2^2 + 4x_1x_2$$

Solución: Notar que el Hessiano de $f(\mathbf{x})$ es

$$\mathbf{H}f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 8 & 4 \\ 4 & 8 \end{bmatrix}$$

Generamos ahora dos direcciones conjugadas, \mathbf{d}_1 y \mathbf{d}_2 . Supongamos que elegimos $\mathbf{d}_1^T = (1, 0)$. Por tanto, como $\mathbf{d}_2^T = (a, b)$ tiene que ser \mathbf{H} conjugado con \mathbf{d}_1 , se tiene que cumplir

$$0 = \mathbf{d}_1^T \mathbf{H} \mathbf{d}_2 = 8a + 4b$$

En particular podemos tomar, $a = 1$ y $b = -2$, y por tanto $\mathbf{d}_2^T = (1, -2)$. Notar que las direcciones conjugadas no son únicas.

Si minimizamos la función objetivo $f(\mathbf{x})$ a partir del punto $\mathbf{x}_1^T = \left(-\frac{1}{2}, 1\right)$ en la dirección \mathbf{d}_1 , obtenemos el punto $\mathbf{x}_2^T = \left(-\frac{1}{2}, 1\right)$. Si ahora minimizamos en la dirección \mathbf{d}_2 a partir de este punto, obtenemos el punto $\mathbf{x}_3^T = (-1, 2)$, que es el mínimo de la función.

5.2.4 Método del gradiente conjugado

El método del gradiente conjugado es el método de la dirección conjugada que se obtiene eligiendo las direcciones como una versión conjugada del método del gradiente. Las direcciones no se especifican *a priori*, sino que se determinan en cada paso de la iteración. Las direcciones \mathbf{Q} -ortogonales en cada punto se eligen de manera sencilla en función de ∇f . Esta dependencia hace que el método converja más uniformemente. Tiene tres ventajas

1. A no ser que se alcance la solución en n pasos, el gradiente siempre es $\neq 0$ y linealmente independiente de todos los vectores dirección anteriores.
2. Una fórmula sencilla para determinar el nuevo vector de dirección.
3. Como las direcciones se basan en el gradiente, el proceso, tiene en cada paso un buen avance uniforme hacia la solución.

El método general del gradiente conjugado tiene la siguiente estructura:

Se parte de un punto inicial $\mathbf{x}_1 \in \mathbb{R}^n$, y se toma como primera dirección conjugada el gradiente cambiado de signo, $\mathbf{d}_1 = -\nabla f(\mathbf{x}_1)$. A continuación, se construye la sucesión $\{\mathbf{x}_k\}$ definida mediante la ecuación recursiva

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k$$

donde α_k es la solución del problema: Minimizar $f(\mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{d}_k)$.

La siguiente dirección conjugada, \mathbf{d}_{k+1} , se determina a partir de la expresión

$$\mathbf{d}_{k+1} = -\nabla f(\mathbf{x}_{k+1}) + \sum_{j=1}^k \beta_{k,j} \mathbf{d}_j$$

donde los coeficientes $\beta_{k,j}$ se obtiene de forma que \mathbf{d}_{k+1} sea \mathbf{Q} -ortogonal con $\{\mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_k\}$.

Para funciones cuadráticas la expresión de α_k es conocida y vale

$$\alpha_k = -\frac{\mathbf{d}_k^T (\mathbf{Q}\mathbf{x}_k + \mathbf{b})}{\mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_k} = -\frac{-\mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_k}{\mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_k}$$

donde $\mathbf{g}_k = \nabla f(\mathbf{x}_k) = \mathbf{Q}\mathbf{x}_k + \mathbf{b}$.

También en el caso de funciones cuadráticas podemos simplificar la expresión de \mathbf{d}_{k+1} , ya que para estas funciones ocurre $\beta_{k,j} = 0 \ \forall j < k$, de manera que

$$\mathbf{d}_{k+1} = -\nabla f(\mathbf{x}_{k+1}) + \beta_k \mathbf{d}_k$$

donde hemos puesto para simplificar $\beta_{k,k} = \beta_k$. Además la expresión de β_k en este caso particular es de la forma:

$$\beta_k = \frac{\mathbf{g}_{k+1}^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_k}{\mathbf{d}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_k}$$

Observar que si $\exists \mathbf{d}_k = 0 \implies \mathbf{x}_k = \mathbf{x}^*$, en caso contrario $\{\mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_n\}$ son \mathbf{Q} -conjugados, y entonces $\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}^*$ por ser un método de direcciones conjugadas aplicado a una función cuadrática.

Notar que el algoritmo en el primer paso es idéntico a un paso del método de descenso de mayor pendiente, y cada paso sucesivo se mueve en una dirección combinación lineal del gradiente actual y la dirección anterior.

Para funciones no cuadráticas $f \in \mathcal{C}^2(\mathbb{R}^n)$ con $\mathbf{H}f(\mathbf{x})$ definida positiva podemos hacer la aproximación

$$\mathbf{g}_k \iff \nabla f(\mathbf{x}_k) \quad \mathbf{Q} \iff \mathbf{H}f(\mathbf{x}_k)$$

en las expresiones anteriores. Y se sigue la filosofía del método de Newton, donde en cada punto la solución de un problema general se aproxima por la solución de un problema cuadrático puro. Aplicados a problemas no cuadráticos los métodos de gradiente conjugado, no suelen terminar en n pasos. Sólo se pueden buscar direcciones según el algoritmo y acabar cuando se alcance el criterio de terminación. El algoritmo del gradiente conjugado es el siguiente.

Existen diferentes variantes para el cálculo de β_k , las más conocidas son las siguientes:

1. **Método de Fletcher-Reeves**

$$\beta_k^{FR} = \frac{\|\nabla f(\mathbf{x}_{k+1})\|^2}{\|\nabla f(\mathbf{x}_k)\|^2} \quad (5.16)$$

2. **Método de Polak-Ribiere.** Sustituir la definición de β_k por

$$\beta_k^{PR} = \frac{\nabla f(\mathbf{x}_{k+1})^T (\nabla f(\mathbf{x}_{k+1}) - \nabla f(\mathbf{x}_k))}{\|\nabla f(\mathbf{x}_k)\|^2} \quad (5.17)$$

3. **Método de Hestenes-Stiefel.** Sustituir la definición de β_k por

$$\beta_k^{HS} = \frac{\alpha_k \nabla f(\mathbf{x}_{k+1})^T (\nabla f(\mathbf{x}_{k+1}) - \nabla f(\mathbf{x}_k))}{(\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k)^T (\nabla f(\mathbf{x}_{k+1}) - \nabla f(\mathbf{x}_k))} \quad (5.18)$$

El algoritmo del gradiente conjugado es el siguiente

Método del gradiente conjugado de Fletcher & Reeves

• **Paso inicial.** Elegir un escalar $\epsilon > 0$ y un punto inicial \mathbf{x}_1 . Hacer $\mathbf{y}_1 = \mathbf{x}_1, \mathbf{d}_1 = -\nabla f(\mathbf{y}_1), k = j = 1$ e ir al paso principal.

• **Paso principal.**

1. Si $\|\nabla f(\mathbf{y}_j)\| < \epsilon$ parar. En caso contrario, elegir α_j la solución óptima del problema de minimizar $f(\mathbf{y}_j + \alpha \mathbf{d}_j)$, sujeta a $\alpha \geq 0$. Hacer $\mathbf{y}_{j+1} = \mathbf{y}_j + \alpha_j \mathbf{d}_j$. Si $j < n$ ir al paso 2, en caso contrario, ir al paso 3.

2. Hacer $\mathbf{d}_{j+1} = -\nabla f(\mathbf{y}_{j+1}) + \beta_j \mathbf{d}_j$, donde

$$\beta_j = \frac{\|\nabla f(\mathbf{y}_{j+1})\|^2}{\|\nabla f(\mathbf{y}_j)\|^2} \quad (5.19)$$

Substituir j por $j + 1$, e ir al paso 1.

k	\mathbf{x}_k^T $f(\mathbf{x}_k)$	j	\mathbf{y}_j^T $f(\mathbf{y}_j)$	$\nabla f^T(\mathbf{y}_j)$	$\ \nabla f(\mathbf{y}_j)\ $	α_1	\mathbf{d}_j^T	α_j	\mathbf{x}_{k+1}^T
1	(0.00, 3.00) 52.00	1	(0.00, 3.00) 52.00	(-44.00, 24.00)	50.12	—	(44.00, -24.00)	0.062	(2.70, 1.51)
		2	(2.70, 1.51) 0.34	(0.73, 1.28)	1.47	0.0009	(-0.69, -1.30)	0.23	(2.54, 1.21)
2	(2.54, 1.21) 0.10	1	(2.54, 1.21) 0.10	(0.87, -0.48)	0.99	—	(-0.87, 0.48)	0.11	(2.44, 1.26)
		2	(2.44, 1.26) 0.04	(0.18, 0.32)	0.37	0.14	(-0.30, -0.25)	0.63	(2.25, 1.10)
3	(2.25, 1.10) 0.008	1	(2.25, 1.10) 0.008	(0.16, -0.20)	0.32	—	(-0.16, 0.20)	0.10	(2.23, 1.12)
		2	(2.23, 1.12) 0.003	(0.03, 0.04)	0.05	0.04	(-0.036, -0.032)	1.02	(2.19, 1.09)
4	(2.19, 1.09) 0.0017	1	(2.19, 1.09) 0.0017	(0.05, -0.04)	0.06	—	(-0.05, 0.04)	0.11	(2.185, 1.094)
		2	(2.185, 1.094) 0.0012	(0.02, 0.01)	0.02				

Tabla 5.7: Método de Fletcher-Reeves

3. Hacer $\mathbf{y}_1 = \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{y}_{n+1}$, y $\mathbf{d}_1 = -\nabla f(\mathbf{y}_1)$. Hacer $j = 1$, reemplazar k por $k + 1$ e ir al paso 1.

Para los métodos de Polak-Ribiere y Hestenes-Stiefel, habría que substituir β_j por β_j^{PR} (ecuación 5.17) o β_j^{HS} (ecuación 5.18) respectivamente. Notar de nuevo la minimización sobre todas las direcciones coordenadas antes de conseguir la nueva aproximación del mínimo de $f(\mathbf{x})$.

Ejemplo 5.15 Considerar el siguiente problema

$$\text{Minimizar } (x_1 - 2)^4 + (x_1 - 2x_2)^2$$

Solución: Damos el resumen de los cálculos efectuados mediante el método de Fletcher-Reeves en la tabla 5.7.

En cada iteración, $\mathbf{d}_1 = -\nabla f(\mathbf{y}_1)$, y $\mathbf{d}_2 = -\nabla f(\mathbf{y}_2) + \beta_1 \mathbf{d}_1$, donde $\beta_1 = \|\nabla f(\mathbf{y}_2)\|^2 / \|\nabla f(\mathbf{y}_1)\|^2$. El punto \mathbf{y}_{j+1} se obtiene optimizando en la dirección \mathbf{d}_j , a partir de \mathbf{y}_j . En la cuarta iteración, alcanzamos el punto $\mathbf{y}_2^T = (2.185, 1.094)$, que está muy cerca del punto óptimo $(2.00, 1.00)$. Puesto que la norma del gradiente es igual a 0.02, paramos. Representamos el progreso del algoritmo en la figura ??.

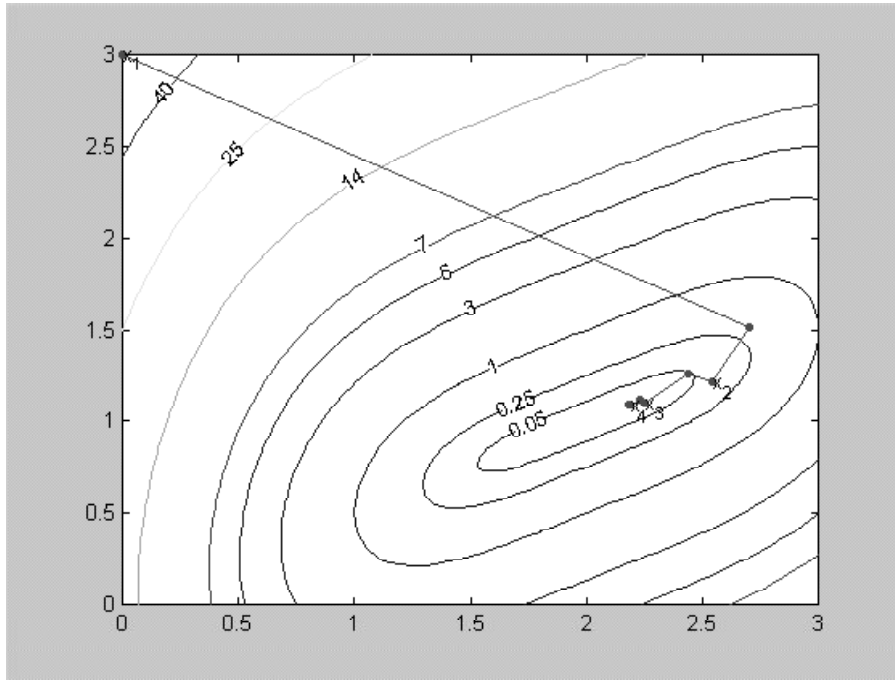


Figura 5.9: Método de Fletcher-Reeves

5.2.5 Métodos Cuasi-Newton o de métrica variable

En esta sección se presenta otro enfoque al desarrollo de métodos entre el descenso de mayor pendiente y el método de Newton. Trabajando con el hecho de que el cálculo de la matriz hessiana no es práctico o es costoso de realizar, la idea básica de todos los métodos cuasi Newton es utilizar una aproximación a la inversa del hessiano, en lugar de dicha inversa, como requiere el método de Newton.

Un proceso iterativo básico para resolver el problema

$$\text{Minimizar } f(\mathbf{x})$$

que incluye como casos especiales la mayoría de los anteriores es

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \alpha_k \mathbf{D}_k \nabla f(\mathbf{x}_k) \quad (5.20)$$

donde \mathbf{D}_k es una matriz simétrica de $n \times n$, y donde, como es usual, α_k se elige para minimizar $f(\mathbf{x}_{k+1})$. Si \mathbf{D}_k es la inversa del Hessiano de f , se obtiene el método de Newton, mientras que si $\mathbf{D}_k = \mathbf{I}$, se tiene el descenso de mayor pendiente. Se elige \mathbf{D}_k , pues, como una aproximación a la inversa del hessiano.

El método elaborado aquí, propuesto por Davidon, y desarrollado posteriormente por Fletcher y Powell, tiene la propiedad de que, para una función cuadrática, genera simultáneamente las direcciones del método del gradiente conjugado y construye la inversa del hessiano. La inversa del hessiano se actualiza en cada paso con la suma de dos matrices simétricas.

Método de Davidon-Fletcher-Powell

El método de Davidon-Fletcher-Powell tiene la siguiente estructura:

Se parte de un punto inicial $\mathbf{x}_1 \in \mathbb{R}^n$, y se toma una matriz simétrica definida positiva inicial, \mathbf{D}_1 , por ejemplo la identidad \mathbf{I} y se toma como dirección inicial de búsqueda $\mathbf{d}_1 = -\mathbf{D}_1 \nabla f(\mathbf{x}_1)$. A continuación, se construye la sucesión $\{\mathbf{x}_k\}$ definida mediante la ecuación recursiva

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k$$

donde α_k es la solución del problema: Minimizar $f(\mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{d}_k)$ con $\alpha \geq 0$.

La siguiente dirección conjugada, \mathbf{d}_{k+1} , se determina a partir de la expresión

$$\mathbf{d}_{k+1} = -\mathbf{D}_{k+1} \nabla f(\mathbf{x}_{k+1})$$

donde la matriz \mathbf{D}_{k+1} se obtiene según la expresión

$$\mathbf{D}_{k+1} = \mathbf{D}_k + \frac{\mathbf{p}_k \mathbf{p}_k^T}{\mathbf{p}_k^T \mathbf{q}_k} - \frac{\mathbf{D}_k \mathbf{q}_k \mathbf{q}_k^T \mathbf{D}_k}{\mathbf{q}_k^T \mathbf{D}_k \mathbf{q}_k} \quad (5.21)$$

donde

$$\mathbf{p}_k = \alpha_k \mathbf{d}_k = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k \quad (5.22)$$

$$\mathbf{q}_k = \nabla f(\mathbf{x}_{k+1}) - \nabla f(\mathbf{x}_k) \quad (5.23)$$

Se puede demostrar que la matriz \mathbf{D}_{k+1} creada según la ecuación 5.21, es una matriz simétrica y definida positiva

Resumimos aquí el método de Davidon-Fletcher-Powell para minimizar una función diferenciable de varias variables. En particular, si la función es cuadrática, entonces, el método produce direcciones conjugadas y termina en una iteración completa.

Método de Davidon-Fletcher-Powell

- **Paso inicial.** Elegir $\epsilon > 0$, para la terminación del algoritmo. Elegir un punto inicial \mathbf{x}_1 , y una matriz simétrica definida positiva inicial, \mathbf{D}_1 , por ejemplo la matriz identidad. Hacer $\mathbf{y}_1 = \mathbf{x}_1$, $k = j = 1$, e ir al paso principal.

- **Paso Principal.**

1. Si $\|\nabla f(\mathbf{y}_j)\| < \epsilon$, parar; en caso contrario hacer $\mathbf{d}_j = -\mathbf{D}_j \nabla f(\mathbf{y}_j)$, y buscar α_j como la solución óptima del problema de minimizar $f(\mathbf{y}_j + \alpha \mathbf{d}_j)$, sujeto a $\alpha \geq 0$. Hacer $\mathbf{y}_{j+1} = \mathbf{y}_j + \alpha_j \mathbf{d}_j$. Si $j < n$ ir al paso 2. Si $j = n$, hacer $\mathbf{y}_1 = \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{y}_{n+1}$, reemplazar k por $k + 1$, hacer $j = 1$ y repetir el paso 1.
2. Construir \mathbf{D}_{j+1} como sigue

$$\mathbf{D}_{j+1} = \mathbf{D}_j + \frac{\mathbf{p}_j \mathbf{p}_j^T}{\mathbf{p}_j^T \mathbf{q}_j} - \frac{\mathbf{D}_j \mathbf{q}_j \mathbf{q}_j^T \mathbf{D}_j}{\mathbf{q}_j^T \mathbf{D}_j \mathbf{q}_j} \quad (5.24)$$

donde

$$\mathbf{p}_j = \alpha_j \mathbf{d}_j = \mathbf{y}_{j+1} - \mathbf{y}_j \quad (5.25)$$

$$\mathbf{q}_j = \nabla f(\mathbf{y}_{j+1}) - \nabla f(\mathbf{y}_j) \quad (5.26)$$

reemplazar j por $j + 1$, y repetir el paso 1.

De nuevo es necesario una minimización a lo largo de n direcciones antes de conseguir la siguiente aproximación de \mathbf{x}^* , el mínimo de $f(\mathbf{x})$.

Ejemplo 5.16 Considerar el siguiente problema

$$\text{Minimizar } (x_1 - 2)^4 + (x_1 - 2x_2)^2$$

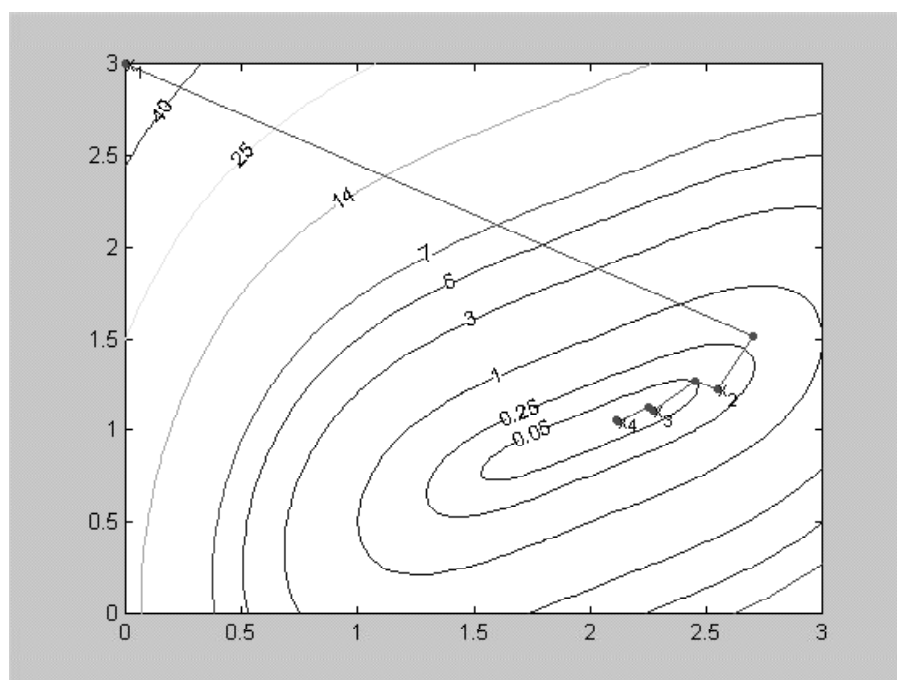
Solución: El resumen de los cálculos efectuados mediante el método DFP se presentan en la tabla 5.8.

En cada iteración, para $j = 1, 2$, $\mathbf{d}_j = \mathbf{D}_j - \nabla f(\mathbf{y}_j)$, donde \mathbf{D}_1 es la matriz identidad y \mathbf{D}_2 se calcula a partir de 5.21, 5.22 y 5.23. En la iteración $k = 1$, tenemos $\mathbf{p}_1^T = (2.7, -1.49)$ y $\mathbf{q}_1^T = (44.73, -22.72)$, y finalmente en la iteración 3, tenemos $\mathbf{p}_3^T = (-0.1, 0.05)$ y $\mathbf{q}_3^T = (-0.7, 0.8)$. El punto \mathbf{y}_{j+1} se calcula optimizando en la dirección \mathbf{d}_j , a partir de \mathbf{y}_j para $j = 1, 2$. El procedimiento termina en el punto $\mathbf{y}_2^T = (2.115, 1.058)$ en la cuarta iteración, puesto que $\nabla f(\mathbf{y}_2) = 0.006$. El camino descrito por el método se muestra en la figura ??.

Otro método propuesto simultáneamente por Broyden, Fletcher, Goldfarb y Shanno (BFGS) utiliza la siguiente variación para actualizar la aproximación de la inversa del Hessiano:

$$\mathbf{D}_{k+1} = \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{p}_k \mathbf{q}_k^T}{\mathbf{p}_k^T \mathbf{q}_k} \right) \mathbf{D}_k \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{p}_k \mathbf{q}_k^T}{\mathbf{p}_k^T \mathbf{q}_k} \right) - \frac{\mathbf{p}_k \mathbf{p}_k^T}{\mathbf{p}_k^T \mathbf{q}_k}$$

de nuevo \mathbf{p}_k y \mathbf{q}_k están descritos por las ecuaciones 5.22 y 5.23.



Método de Davidon-Fletcher-Powell

k	\mathbf{x}_k^T $f(\mathbf{x}_k)$	j	\mathbf{y}_j^T $f(\mathbf{y}_j)$	$\nabla f^T(\mathbf{y}_j)$	$\ \nabla f(\mathbf{y}_j)\ $	\mathbf{D}_j	\mathbf{d}_j^T	α_j	\mathbf{y}_{j+1}^T
1	(0.00, 3.00) 52.00	1	(0.00, 3.00) 52.00	(-44.00, 24.00)	50.12	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	(44.00, -24.00)	0.062	(2.70, 1.51)
		2	(2.70, 1.51) 0.34	(0.73, 1.28)	1.47	$\begin{bmatrix} 0.25 & 0.38 \\ 0.38 & 0.81 \end{bmatrix}$	(-0.67, -1.31)	0.22	(2.55, 1.22)
2	(2.55, 1.22) 0.1036	1	(2.55, 1.22) 0.1036	(0.89, -0.44)	0.99	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	(-0.89, 0.44)	0.11	(2.45, 1.27)
		2	(2.45, 1.27) 0.0490	(0.18, 0.36)	0.40	$\begin{bmatrix} 0.65 & 0.45 \\ 0.45 & 0.46 \end{bmatrix}$	(-0.28, -0.25)	0.64	(2.27, 1.11)
3	(2.27, 1.11) 0.008	1	(2.27, 1.11) 0.008	(0.18, -0.20)	0.27	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	(-0.18, 0.20)	0.10	(2.25, 1.13)
		2	(2.25, 1.13) 0.004	(0.04, 0.04)	0.06	$\begin{bmatrix} 0.80 & 0.38 \\ 0.38 & 0.31 \end{bmatrix}$	(-0.05, -0.03)	2.64	(2.12, 1.05)
4	(2.12, 1.05) 0.0005	1	(2.12, 1.05) 0.0005	(0.05, -0.08)	0.09	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	(-0.05, 0.08)	0.10	(2.115, 1.058)
		2	(2.115, 1.058) 0.0002	(0.004, 0.004)	0.006				

Tabla 5.8: Método de Davidon-Fletcher-Powell