

T/510/M94

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO
FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y MATEMATICA
ESCUELA PROFESIONAL DE MATEMATICA



**UNA MODIFICACION DEL METODO DE NEWTON EN
PROGRAMACION NO LINEAL**

**TESIS PARA OPTAR EL TITULO PROFESIONAL
DE LICENCIADO EN MATEMATICA**

MELISSA FATIMA MUÑANTE TOLEDO

CALLAO, OCTUBRE, 2013

PERU

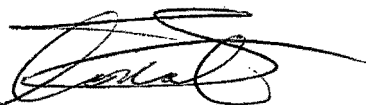
HOJA DE PRESENTACION

Una Modificación del Método de Newton en
Programación No Lineal

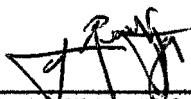
Melissa Fatima Muñante Toledo

Tesis presentada a consideración del Cuerpo Docente de la Facultad de Ciencias Naturales y Matemática de la Universidad del Callao, como parte de los requisitos para obtener el Título Profesional de Licenciado en Matemática.

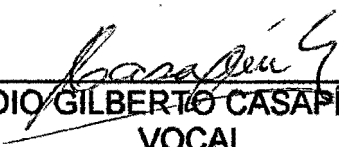
Aprobada por:



MG. ROEL MARIO VIDAL GUZMÁN
PRESIDENTE



LIC. ROLANDO MANUEL VEGA DE LA PEÑA
SECRETARIO



LIC. ELADIO GILBERTO CASAPIA ALMONTE
VOCAL



LIC. ABSALÓN CASTILLO VALDIVIESO
SUPLENTE

CALLAO – PERU

Octubre – 2013

FICHA CATALOGRAFICA

MUÑANTE TOLEDO, MELISSA FATIMA

Una Modificación del Método de Newton en Programación no lineal,
Callao [2013].

X, 86p., 29,7 cm. (UNAC, Licenciado en Matemática, 2013)

Tesis, Universidad Nacional del Callao, Facultad de Ciencias
Naturales y Matemática.

Matemática.

I. UNAC/FCNM II. TITULO (Serie)

Dedico este trabajo de investigación al gran amor de mi vida, que me llena de muchas alegrías, que es mi fortaleza y mi gran inspiración, con todo mi amor para mi hijo adorado:

Anders Johner.

AGRADECIMIENTOS

- A Dios, pues toda la felicidad y todos los reconocimientos que he recibido en mi vida te los debo sin duda alguna a ti mi DIOS y sé que en toda ocasión estás siempre conmigo.
- A mi madre, a ti te doy gracias por todos tus cuidados y porque siempre creíste en mí, nunca me olvidaré del apoyo incondicional que siempre me has brindado. Eres la mejor mujer que conozco, te amo.
- A mi padre, a ti te doy gracias por el impulso y sabios consejos que me diste para culminar lo que inicié y nunca rendirme, no lo olvidaré.
- A mi esposo Johnson, él que es mi verdadero amigo, que me conoce tal como soy, que me comprende, me acompaña en mis logros y en mis fracasos, celebra mis alegrías, comparte mi dolor y jamás me juzga por mis errores, gracias por tanto amor y sobre todo por tu gran amistad.
- A mi Asesor de Tesis el Mg. Edison Montoro, por su permanente disposición y desinteresada ayuda, por su generosidad al brindarme la oportunidad de recurrir a su capacidad y experiencia científica en un marco de confianza, afecto y amistad, pues tiene un valor incalculable para mí, fundamental para el logro de este trabajo.

*Hay una fuerza motriz más poderosa
que el vapor, la electricidad y la energía
atómica: **la voluntad.***

Albert Einstein.

RESUMEN

UNA MODIFICACIÓN DEL MÉTODO DE NEWTON EN PROGRAMACIÓN NO LINEAL

MELISSA FATIMA MUÑANTE TOLEDO

OCTUBRE – 2013

Asesor: Mg. Edison Raúl Montoro Alegre.

Título obtenido: Licenciado en Matemática.

Se estudia en este trabajo un problema de optimización sin la presencia de restricciones presentado por el autor [D.C.Sorensen. (1982)] el cual resuelve una variante del método de Newton cuya modificación se basa en el enfoque de modelo de región de confianza. Este informe contiene análisis detallados de las minimizaciones de los modelos cuadráticos que surgen como subproblemas en la iteración del Newton modificado. Varias alternativas se presentan para resolver estos subproblemas de manera que superan ciertas dificultades teóricas expuestas por este análisis. Resultados de convergencia se presentan en relación al algoritmo de minimización, lo que demuestra que las iteraciones convergen a un punto que cumple las condiciones necesarias de segundo orden para la minimización.

PALABRAS CLAVES:

- OPTIMIZACION DE CUADRATICAS
- METODO DE NEWTON
- REGION DE CONFIANZA

ABSTRACT

A NEWTON METHOD FOR NONLINEAR PROGRAMMING CHANGES

MELISSA FATIMA MUÑANTE TOLEDO

OCTOBER – 2013

Advisor: Mg. Edison Montoro.

Titule Obtained: Licentiate in Mathematics.

We study in this paper an optimization problem in the absence of restrictions introduced by the author [D.C.Sorensen. (1982)] which solves a variant of the Newton method whose modification is based on the approach of trust region model. This report contains detailed analysis minimizations of quadratic models that arise as subproblems in the modified Newton iteration. Several alternatives are presented for solving these subproblems so that exceed certain theoretical difficulties raised by this analysis. Convergence results are presented in relation to the minimization algorithm, which shows that the iterations converge to a point that meets the necessary conditions for minimizing the second order.

KEYWORDS:

- QUADRATIC OPTIMIZATION
- NEWTON METHOD
- TRUST REGION

INDICE

págs.

CAPITULO 1

1.1 Introducción 1

1.2 Revisión de la Bibliografía 3

CAPITULO 2

MINIMIZACION DE CUADRATICAS

2.1 Cuadráticas sin Restricción 6

2.2 Solución de Cuadráticas sin Restricción usando 16

Factorización

CAPITULO 3

METODOS CLASICOS PARA MINIMIZACION DE CUADRATICAS

3.1 Método de Newton 23

3.2 Región de Confianza 24

3.3 Método de Newton usando Región de Confianza 26

CAPITULO 4

METODO DE NEWTON MODIFICADO

4.1 Minimización de Cuadráticas con Restricciones 36

4.2 Una Iteración Modificada de Newton 46

4.3 Convergencia de la Iteración de Newton Modificado 51

MATERIALES Y METODOS 62

RESULTADOS 63

DISCUSION 64

CONCLUSION 65

BIBLIOGRAFIA	66
APENDICES	
1. Condiciones de optimalidad KKT	69
2. Teorema de Inercia	70
3. Teoría de Polos y Ceros	71
4. Ejemplo	72

CAPITULO 1

1.1 INTRODUCCIÓN

El siguiente trabajo de investigación tiene como finalidad resolver el siguiente problema de optimización:

$$\begin{aligned} & \text{Minimizar } f(x) && (1) \\ & x \in \Omega, \end{aligned}$$

donde $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, además f es dos veces continuamente diferenciable y la matriz hessiana $\nabla^2 f(x)$ es no singular y para el caso singular se hace uso de la pseudo inversa. Para resolver el problema de minimización de una función real f de varias variables reales en general puede ser atacado por cualquier variante del método de Newton, el cual encuentra un cero de la gradiente de f , como el valor que resuelve el problema (1). El término variante aquí es para incluir cualquier método basado en mantener una aproximación a la matriz hessiana mixta con derivadas parciales de segundo orden de f . Cuando esta matriz es en realidad calculada el método de Newton es el método elegido para la minimización del problema.

Aquí describimos y analizamos una técnica para la solución del problema (1). El método que se presenta es llamado apropiadamente un método de Newton basado en el modelo de región de confianza. Aquí el paso para una nueva iteración es obtenido al calcular el mínimo de un modelo cuadrático local de la función objetivo f sobre una pequeña región centrada en la iteración actual. El diámetro de esta región puede expandirse y contraerse de forma controlada en función de la manera en que los modelos locales predicen comportamientos de la función objetivo f .

Es posible controlar la iteración de tal modo que la convergencia sea garantizada para cualquier valor inicial asumiendo condiciones razonables para

la función objetivo f . Hay varias cosas a considerar cuando se trata de proporcionar una aplicación práctica del método de Newton para uso general. De hecho, vamos a probar algunas propiedades de convergencia fuerte de este método en el capítulo 4.

El origen de este método se encuentra en el trabajo de Levenberg [16] y Marquardt [18] para cálculos de mínimos cuadrados no lineales. El método se debatió por primera vez en el trabajo de Goldfeld, Quandt y Trotter [12]. Powell [27] aplicó una modificación en una situación aún más general y Hebden [14] hace algunas observaciones computacionales importantes.

El interés actual se deriva de varios esfuerzos por obtener una aplicación en la práctica del método modificado de Newton en programación no lineal que es de suma importancia para aplicaciones no solo en el área de las matemáticas sino en diversas áreas de ciencias e ingeniería pues existen problemas reales que pueden expresarse como un problema de optimización del tipo (1).

En particular, creemos que es importante describir claramente esta naturaleza teórica de la minimización de cuadráticas con y sin restricciones por aparecer como subproblema a la hora de resolver el problema (1).

La tesis está dividida en dos partes:

En la primera parte se desarrolla la teoría de cuadráticas y modelos de región de confianza, y en la segunda parte desarrollamos el método de Newton modificado basado en el modelo de región de confianza.

El trabajo está organizado de la siguiente manera:

En el capítulo 1, realizamos la introducción de la tesis.

En el capítulo 2, definimos algunos conceptos básicos de minimización de cuadráticas los cuales serán usados a lo largo de la tesis.

En el capítulo 3, presentamos el algoritmo general del modelo de región de confianza y el algoritmo de Newton basado en el modelo de región de confianza, además introduciremos algunos teoremas que son de gran importancia y justifican la convergencia global de segundo orden.

En el capítulo 4, introducimos algunos lemas y teoremas de convergencia fuerte para el método de Newton modificado basado en el modelo de región de confianza.

1.2 REVISIÓN DE LA BIBLIOGRAFÍA

El problema (4.1) es estudiado por muchos autores, entre ellos tenemos:

- **P. E. GILL AND W. MURRAY, *Newton type methods for unconstrained and linearly constrained optimization*, Math. Prog., 7 (1974), pp. 311-350**, describen métodos numéricamente estables para la optimización sin restricciones y su generalización cuando se determinan las restricciones lineales de desigualdad.

- **M. J. D. POWELL, *A hybrid method for nonlinear equations*, in Numerical Methods for Nonlinear Algebraic Equations, P. Rabinowitz, ed., Gordon and Breach, London, 1970, pp. 87-114**. Este trabajo nos indica que muchos algoritmos región de confianza para la minimización sin restricciones tienen excelentes propiedades de convergencia global si sus aproximaciones de segunda derivada no son demasiado grandes.

- **D. W. MARQUARDT, *An algorithm for least squares estimation of nonlinear parameters*, SIAM J. Appl. Math., 11 (1963), pp. 431-441**. En este trabajo se desarrolló un método de vecindad máxima que lleva a cabo una interpolación óptima entre el método de series de Taylor y el método de la gradiente.

- **J. J. MORE AND D. C. SORENSEN, *On the use of directions of negative curvature in a modified Newton method*, Math. Prog. 16 (1979), pp. 1-20.** Nos presenta un método de Newton modificado para el problema de minimización sin restricciones.

- **H. MUKAI AND E. POLAK, *A second order method for unconstrained optimization*, J. Optim. Theory Appl., 26 (1978), pp. 501-513.** En este trabajo se presenta un algoritmo cuadráticamente convergente para la minimización sin restricciones. Todos los puntos de acumulación que construye deben cumplir las condiciones necesarias de segundo orden de optimalidad.

CAPITULO 2

Minimización de Cuadráticas

Una cuadrática es un polinomio en n variable con términos hasta segundo orden. La minimización de estas funciones tiene interés por el gran número de aplicaciones que recaen en este formato [4], [26], [2].

Por ejemplo: cuando para un conjunto de datos empíricos se postula una relación lineal con ciertos parámetros desconocidos, el problema de ajustar esos parámetros suele ser resuelto a través de la minimización de la suma de los cuadrados de los errores, es decir la minimización de una función cuadrática. La suma de cuadrados no es mejor que otras medidas globales de errores en términos de calidad de ajuste (pues se pudo haber considerado él con otro tipo de norma), sin embargo es la medida cuya minimización es la más simple del punto de vista numérico. De hecho la minimización de cuadráticas es uno de los problemas más fáciles en el arte de la **OPTIMIZACIÓN**, haciendo también que sea utilizado frecuentemente como subproblema auxiliar en algoritmos que resuelven problemas más complicados.

2.1 CUADRÁTICAS SIN RESTRICCIONES

Dada $G \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simétrica $x, b \in \mathbb{R}^n$; $c \in \mathbb{R}$ constante. El problema de estudio será

$$\text{minimizar } \psi(x) = c + bx^t + \frac{1}{2}x^t Gx \quad (2.1)$$

Lema 2.1.1

Si $\psi(x) = c + bx^t + \frac{1}{2}x^t Gx$, entonces :

$$\nabla \psi(x) = Gx + b$$

$$H\psi(x) = G$$

Prueba:

Sea

$$x = (x_1, x_2, \dots, x_n), \quad b = (b_1, b_2, \dots, b_n) ,$$

y

$$G = \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & \dots & g_{1n} \\ g_{21} & g_{22} & \dots & g_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ g_{n1} & g_{n2} & \dots & g_{nn} \end{pmatrix} ,$$

entonces:

$$\psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \left[\mathbf{x}^t \left(\sum_{i=1}^n g_{1i} x_i, \sum_{i=1}^n g_{2i} x_i, \dots, \sum_{i=1}^n g_{ni} x_i \right) \right] + \left(\sum_{i=1}^n b_i x_i \right) + c$$

$$\psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \left[\sum_{i=1}^n g_{1i} x_i x_1 + \sum_{i=1}^n g_{2i} x_i x_2 + \dots + \sum_{i=1}^n g_{ni} x_i x_n \right] + \sum_{i=1}^n b_i x_i + c.$$

Luego:

$$\nabla \psi(\mathbf{x}) = \left(\frac{\partial \psi(\mathbf{x})}{\partial x_1}, \frac{\partial \psi(\mathbf{x})}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial \psi(\mathbf{x})}{\partial x_n} \right),$$

es decir:

$$\frac{\partial \psi(\mathbf{x})}{\partial x_1} = \frac{1}{2} \left[\left(g_{11} x_1^2 + \sum_{i=2}^n g_{1i} x_i x_1 \right)' + (g_{21} x_1 x_2)' + \dots + (g_{n1} x_1 x_n)' \right] + b_1$$

$$\frac{\partial \psi(\mathbf{x})}{\partial x_1} = \frac{1}{2} \left[2g_{11} x_1 + \sum_{i=2}^n g_{1i} x_i + (g_{21} x_2 + g_{31} x_3 + \dots + g_{n1} x_n) \right] + b_1.$$

Pero por ser G simétrica se cumple que $g_{ij} = g_{ji}$. Por tanto se obtiene:

$$\frac{\partial \psi(\mathbf{x})}{\partial x_1} = g_{11} x_1 + \frac{1}{2} \left[\sum_{i=2}^n 2g_{1i} x_i \right] + b_1$$

$$\frac{\partial \psi(\mathbf{x})}{\partial x_1} = g_{11} x_1 + \sum_{i=2}^n g_{1i} x_i + b_1 = \sum_{i=1}^n g_{1i} x_i + b_1.$$

En forma análoga se obtiene un resultado similar para cada

$$\frac{\partial \psi(\mathbf{x})}{\partial x_j} = \sum_{i=1}^n g_{ji} x_i + b_j, \quad j = 2, 3, 4, \dots, n.$$

Luego:

$$\nabla\psi(x) = \left(\frac{\partial\psi(x)}{\partial x_1}, \frac{\partial\psi(x)}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial\psi(x)}{\partial x_n} \right) = \left(\sum_{i=1}^n g_{1i}x_i + b_1, \sum_{i=1}^n g_{2i}x_i + b_2, \dots, \sum_{i=1}^n g_{ni}x_i + b_n \right)$$

$$\nabla\psi(x) = \left(\sum_{i=1}^n g_{1i}x_i, \sum_{i=1}^n g_{2i}x_i, \dots, \sum_{i=1}^n g_{ni}x_i \right) + (b_1 + b_2 + \dots + b_n)$$

$$\nabla\psi(x) = \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & \dots & g_{1n} \\ g_{21} & g_{22} & \dots & g_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ g_{n1} & g_{n2} & \dots & g_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ b_n \end{pmatrix},$$

por lo tanto:

$$\nabla\psi(x) = Gx + b.$$

Para la última parte del lema hacemos:

$$\nabla h(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial h_1(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial h_1(x)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial h_1(x)}{\partial x_n} \\ \frac{\partial h_2(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial h_2(x)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial h_2(x)}{\partial x_1} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \frac{\partial h_n(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial h_n(x)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial h_n(x)}{\partial x_1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & \dots & g_{1n} \\ g_{21} & g_{22} & \dots & g_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ g_{n1} & g_{n2} & \dots & g_{nn} \end{pmatrix} = G$$

Los puntos críticos de (2.1) serán aquellos puntos donde el gradiente se anula. Por tanto de acuerdo al lema 2.1.1, serán todas las soluciones del sistema lineal.

$$Gx + b = 0$$

La existencia o unicidad estará determinada por las propiedades de este sistema.

Lema 2.1.2

- a) El problema (2.1) admite algún punto crítico si y solo si $b \in \mathfrak{R}(G)$, donde $\mathfrak{R}(G)$ es el espacio generado por las columnas de G .
- b) El problema (2.1) admite un único punto crítico si y solo si G es no singular.

Prueba:

- a) Sea x^* un punto crítico, entonces

$$Gx^* = -b$$

es decir:

$$[G_1, G_2, \dots, G_n] \begin{bmatrix} x^*_1 \\ x^*_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ x^*_n \end{bmatrix} = -b$$

donde G_i representa la i -ésima columna de G . De donde:

$$x^*_1 G_1 + x^*_2 G_2 + \dots + x^*_n G_n = -b.$$

Por lo tanto

$$b \in \mathfrak{R}(G).$$

La parte reciproca es análoga.

b) Tenemos el sistema lineal

$$Gx + b = 0$$

$$Gx = -b, \quad (*)$$

el cual es un sistema de n ecuaciones y n incógnitas. Por el álgebra lineal (*) posee solución única si y solo si G es una matriz no singular. ■

La ecuación de los puntos críticos

$$Gx + b = 0 \quad (2.2)$$

Puede tener una, infinita o ninguna solución.

Si (2.2) no tiene solución, es decir $b \notin \mathfrak{R}(G)$ entonces (2.1) no admite minimizador local o global (caso contrario se tendría un x^* tal que $Gx^* + b = 0$ contradicción con la hipótesis) uno de esos casos podría ser por ejemplo cuando

$$\psi(x) = c + bx^t + \frac{1}{2}x^t Gx,$$

con $G = 0$ y $b \neq 0$.

Si (2.2) tiene solución única, entonces ese punto sería el único punto crítico de (2.1) pero él podría ser minimizador, maximizador o punto silla.

Finalmente si (2.2) tiene infinitas soluciones (Eso ocurre cuando G es singular y $b \in \mathfrak{R}(G)$) entonces todas ellas serán puntos críticos y del mismo tipo (será probado más adelante).

Observación:

Es interesante observar aquí, que en un problema con infinitas soluciones (G es singular y $b \in \mathfrak{R}(G)$) Puede ser transformado en un problema sin solución, debido a una perturbación pequeña en el vector b . Por ejemplo el sistema lineal

$$0x + 0 = 0$$

Tiene como soluciones a todo \mathbb{R}^n pero el sistema.

$$0x + \varepsilon = 0.$$

No posee solución alguna para cualquier $\varepsilon \neq 0$.

Esto nos muestra que, muchas veces, es difícil distinguir las situaciones “sin solución” de las “infinitas soluciones” En Efecto: Debido a errores de redondeo, puede ocurrir que el vector b que, en realidad estaba en el espacio columna de G ($b \in \mathfrak{R}(G)$), quede fuera de ese subespacio, haciendo que un sistema con infinitas soluciones aparente ser incompatible en los cálculos numéricos.

También puede ocurrir que una matriz G singular se torne inversible, por perturbaciones de redondeo (las clásicas matrices mal - condicionadas), transformando un sistema incompatible, o indeterminado en un problema con solución única.

Usando resultados de convexidad y las condiciones de optimalidad de segundo orden, podemos clasificar fácilmente los puntos críticos de (2.1):

Si x^* es minimizador local, entonces se cumple $H\psi(x^*) \geq 0$. Y como $G = H\psi(x^*)$, entonces G es semidefinida positiva para todo x . Luego $\psi(x)$ será una función convexa y cualquier minimizador local es global. Con todo esto podemos concluir si x^* es un punto crítico y $G \geq 0, \forall x \in \mathbb{R}^n$ entonces necesariamente x^* es un minimizador global.

Con el mismo razonamiento deducimos que toda cuadrática tiene un único tipo de punto crítico porque la hessiana es una matriz constante, es decir todos serán minimizadores globales, maximizadores globales o puntos sillas.

La prueba del siguiente lema, muestra que debido a la simplicidad de las funciones cuadráticas es fácil obtener las mismas conclusiones sin apelar a los resultados de convexidad.

Lema 2.1.3:

Si $G \geq 0$ y x^* es punto crítico de (2.1), entonces x^* es un minimizador global de (2.1).

Prueba:

Tenemos:

$$\psi(x) = \frac{1}{2}x^t Gx + bx^t + c = \frac{1}{2}x^t Gx - x^* Gx + c.$$

Pues $x^* G = -b$. Luego:

$$\psi(x) = \frac{1}{2}x^t Gx + \frac{1}{2}x^* Gx^* - x^* Gx - \frac{1}{2}x^* Gx^* + c$$

$$\psi(x) = \frac{1}{2}(x - x^*)^t G(x - x^*) - \frac{1}{2}x^* Gx^* + c.$$

Luego por ser G semidefinida positiva se tiene:

$$\psi(x) \geq -\frac{1}{2}x^* Gx^* + c = -\frac{1}{2}x^* Gx^* + \frac{1}{2}x^* Gx^* - \frac{1}{2}x^* Gx^* + c, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n$$

$$\psi(x) \geq \frac{1}{2}x^* Gx^* - x^* Gx^* + c = \frac{1}{2}x^* Gx^* + b^t x^* + c = \psi(x^*),$$

$$\psi(x) \geq \psi(x^*), \quad \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

Por lo tanto x^* es un minimizador global. ■

Lema 2.1.4:

Si el problema (2.1) admite minimizador local, entonces G es semidefinida positiva para todo $x \in \mathbb{R}^n$.

Prueba:

Si x^* es un minimizador local, entonces $\exists r > 0$ tal que:

$$\psi(x) \geq \psi(x^*), \quad \forall x \in B(x^*, r)$$

$$\frac{1}{2}xGx + b^T x + c \geq \frac{1}{2}x^* G x^* + b^T x^* + c$$

De donde:

$$\frac{1}{2}xGx - \frac{1}{2}x^* G x^* + b^T x - b^T x^* \geq 0$$

$$\frac{1}{2}xGx - \frac{1}{2}x^* G x^* + b^T (x - x^*) \geq 0$$

$$\frac{1}{2}xGx - \frac{1}{2}x^* G x^* - x^* G (x - x^*) \geq 0$$

$$\frac{1}{2}xGx - \frac{1}{2}x^* G x^* - x^* G x + x^* G x^* \geq 0$$

$$\frac{1}{2}xGx - x^* G x + \frac{1}{2}x^* G x^* \geq 0$$

$$\frac{1}{2}(x - x^*)^T G (x - x^*) \geq 0, \quad \forall x \in B(x^*, r) \quad (\alpha)$$

Si $x \notin B(x^*, r)$, entonces

$$y = \frac{x - x^*}{\|x - x^*\|} a \quad \text{con } a < r$$

Es tal que $y \in B(x^*, r)$. Luego:

$$0 \leq \left(\frac{x-x^*}{\|x-x^*\|} \right)^t G \left(\frac{x-x^*}{\|x-x^*\|} \right) = \frac{a^2}{\|x-x^*\|^2} [(x-x^*)^t G(x-x^*)].$$

De donde:

$$(x-x^*)^t G(x-x^*) \geq 0, \quad \forall x \in B(x^*, r) \quad (\beta)$$

De (α) y (β) concluimos que $G \geq 0, \forall x \in \mathbb{R}^n$ ■

Corolario 2.1.5

Todo minimizador local de (2.1) es global.

Prueba:

Si x^* es minimizador local. Entonces por el lema 2.1.4: $G \geq 0, \forall x \in \mathbb{R}^n$.

Por otro lado, por el teorema de Taylor se tiene que:

$$\psi(x) = \psi(x^*) + \nabla \psi(x^*)(x-x^*) + \frac{1}{2}(x-x^*)^t H \psi(x^*)(x-x^*) \quad \forall x$$

$$\psi(x) = \psi(x^*) + [Gx^* + b](x-x^*) + \frac{1}{2}(x-x^*)^t G(x-x^*) \quad \forall x$$

$$\psi(x) = \psi(x^*) + 0 + \frac{1}{2}(x-x^*)^t G(x-x^*) \quad \forall x$$

$$\psi(x) \geq \psi(x^*), \quad \forall x \in \mathbb{R}^n. \quad \blacksquare$$

Corolario 2.1.6

Si la matriz G es indefinida. Entonces la cuadrática $\psi(x)$ no tiene extremos locales (es decir no posee ni máximos ni mínimos locales).

Prueba:

Sea x^* punto crítico.

Si G es indefinida, entonces $G = H\psi(x^*)$ es indefinida. Luego, existirán w, y vectores no nulos en \mathbb{R}^n tal que

$$y \cdot H\psi(x^*)y > 0 \quad w \cdot H\psi(x^*)w < 0,$$

como $\psi(x)$ tiene segundas derivadas parciales continuas, existirá un $\varepsilon > 0$ tal que:

$$y \cdot H\psi(x^* + ty)y > 0 \quad w \cdot H\psi(x^* + tw)w < 0,$$

Para todo t tal que $|t| < \varepsilon$. Entonces, podemos definir

$$Y(t) = \psi(x^* + ty) \quad W(t) = \psi(x^* + tw),$$

de donde

$$Y(0)'' = 0 \quad W(0)'' = 0$$

Por tanto podemos concluir que $t=0$ mínimo local estricto para $Y(t)$ y máximo local estricto para $W(t)$. Esto quiere decir, que si nos movemos a partir de x^* en la dirección de y ó $-y$ los valores de $g(x)$ aumentan. Pero si nos movemos a partir de x^* en la dirección de w ó $-w$. Los valores de $\psi(x)$ disminuyen. Por esta razón, denominamos al punto crítico x^* punto silla, y este punto no es ni máximo ni mínimo. ■

2.2 SOLUCIÓN DE CUADRÁTICAS SIN RESTRICCIONES USANDO FACTORIZACION

La forma más ruda de resolver (2.1) es considerando la descomposición espectral de G . En efecto, como G es simétrica existe una matriz ortogonal Q (es decir $Q \cdot Q^t = Q^t \cdot Q = I$) y una matriz diagonal D tal que:

$$G = QDQ^t \quad (2.3)$$

Los "Autovalores" de G : $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots, \sigma_n$ son elementos de la diagonal D y los autovectores correspondientes son las columnas de Q . Luego para cualquier $x \in \mathbb{R}^n$, $x \neq 0$, existirá un $y \in \mathbb{R}^n$, $y \neq 0$ tal que:

$$x = Qy = [q_1]y_1 + [q_2]y_2 + [q_3]y_3 + \dots + [q_n]y_n$$

donde los $[q_i]$ son las columnas de Q . Entonces:

$$x^t G x = (Qy)^t G (Qy) = y^t (Q^t G Q) y$$

$$x^t G x = y^t D y = \sigma_1 y_1^2 + \sigma_2 y_2^2 + \sigma_3 y_3^2 + \dots + \sigma_n y_n^2.$$

De donde:

$$x^t G x \geq 0 \Leftrightarrow \sigma_i \geq 0 \quad \forall i.$$

Con eso afirmamos: G es semidefinida positiva si todas las entradas de D son no negativas. Si todos los elementos de la diagonal son mayores que cero, entonces, D y G son definidas positivas.

Por tanto, observando la diagonal de D obtenemos información sobre el tipo de puntos críticos que el problema (2.1) puede tener: Si estamos en minimizadores, y $D \geq 0$, entonces analizaremos el sistema:

$$Gx + b = 0.$$

Usando (2.3), el sistema toma la forma:

$$(QQ^t)x = -b \quad (2.4)$$

de la cual obtenemos:

$$DQ^t x = -Q^t b \quad (2.5)$$

$$Dz = -Q^t b \quad (2.6)$$

donde $z = Q^t x$. Además:

$$x = Qz. \quad (**)$$

El sistema (2.6) tendrá solución si y solo si un posible cero en la diagonal de D corresponde a una coordenada nula $\left(\left[Q^t b \right]_i \right)$ de $-Q^t b$.

a) Si hay un cero en la diagonal, es decir $\sigma_i = 0$, tal que $\left[Q^t b \right]_i \neq 0$, entonces el sistema (2.4) no posee solución y consecuentemente el problema (2.1) carece de puntos críticos.

b) Si todos los elementos de D son estrictamente positivos (i.e. $\det(G) \neq 0$), entonces (2.4) tiene solución única y el vector x calculado a través de (2.6) y (**) será un minimizador global del problema (2.1)

c) Si el sistema (2.6) es compatible, pero existe $\sigma_i = 0$ y $\left[Q^t b \right]_i = 0$, Entonces tendremos infinitas soluciones. En efecto, sea: $Dz = -Q^t b$

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 z_1 \\ \vdots \\ \sigma_i z_i \\ \vdots \\ \sigma_j z_j \\ \vdots \\ \sigma_n z_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} [-Q^t b]_1 \\ \vdots \\ [-Q^t b]_i \\ \vdots \\ [-Q^t b]_j \\ \vdots \\ [-Q^t b]_n \end{pmatrix}$$

Con $\sigma_i = 0$ y $[-Q^t b]_i = 0$; $\sigma_j = 0$ y $[-Q^t b]_j = 0$. Notamos que z_i podrá tomar cualquier valor y siempre será solución. Lo mismo ocurre para z_j . Esto quiere decir, que se obtendrán infinitas soluciones. Cabe mencionar aquí que debido a que:

$$z = Q^t x \text{ entonces } x = Qz.$$

Es decir

$$x = [q_1 \ q_2 \ \dots \ q_n] z,$$

donde q_i son las soluciones de Q . Entonces:

$$x = z_1 q_1 + z_2 q_2 + \dots + z_n q_n.$$

Pero como z_i y z_j toman infinitos valores, x tomara la forma:

$$x = M + z_i q_i + z_j q_j$$

es decir:

$$x \in A = \{x = M + z_i q_i + z_j q_j / z_i, z_j \in \mathbb{R}\}$$

Esto quiere decir que, todas las infinitas soluciones de (2.4) forman una variedad afín en \mathbb{R}^n de dimensión igual al número de ceros en la diagonal D . Además todas las soluciones serán minimizadores, pues por dato $D \geq 0$ lo que implica $G \geq 0$.

Analizamos ahora los diferentes casos que se pueden presentar:

Caso 1: Cuando no existen minimizadores (es decir G es indefinida) del problema (2.1), es útil determinar para cada $x \in \mathbb{R}^n$ tal que:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \psi(x + td) = -\infty \quad (2.7)$$

Si realmente pudiéramos hallar una dirección que satisfaga (2.7), podríamos decir que siempre seremos capaces de resolver (2.1) (incluso cuando el mínimo sea $-\infty$, minimizador será $x + \infty d$).

Analizamos pues este caso:

Si algún auto valor de G , $\sigma_i < 0$ entonces tomamos $d =$ autovector asociado a σ_i (ubicada en la i -ésima columna de Q), entonces

$$\begin{aligned} \psi(x + td) &= \frac{1}{2}(x + td)^t G(x + td) + b^t(x + td) + c \\ &= \frac{1}{2}x^t Gx + x^t G(td) + \frac{1}{2}t^2 d^t Gd + b^t x + tb^t d + c \\ &= \psi(x) + t(b^t d + x^t Gd) + \frac{1}{2}t^2 d^t Gd \\ &= \psi(x) + t(b^t + x^t G)d + \frac{1}{2}t^2 d^t Gd \\ &= \psi(x) + t \nabla \psi(x) d + \frac{1}{2}t^2 d^t Gd. \end{aligned}$$

Pero como $d^t Gd = d^t (QDQ^t)d = (d^t Q)D(Q^t d) = (0 \dots 1 \dots 0)D \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \sigma_i$

Por lo tanto:

$$\psi(x + td) = \psi(x) + t \nabla \psi(x) d + \frac{1}{2}t^2 \sigma_i$$

Con esto podemos afirmar que $\psi(x + td)$ como función de t es una parábola cóncava y

$$\psi(x + td) \rightarrow -\infty, \text{ cuando } t \rightarrow \pm\infty .$$

La elección de aquel d , no es la única que satisface (2.7). En efecto bastará escoger cualquier dirección d tal que $d^t G d < 0$.

Caso 2: Consideremos el caso en que $D \geq 0$, pero existe $\sigma_i = 0$ con $[Q^t b]_i \neq 0$ (es decir el sistema $Gx + b = 0$ es incompatible, no existe solución alguna).

Tomemos nuevamente $d =$ autovector asociado a σ_i ,

$$b^t d = [Q^t b]_i \neq 0 \text{ y } d^t G d = \sigma_i = 0$$

Siempre que $b^t d = [Q^t b]_i < 0$ Caso contrario se tomará $-d$. De esta manera, siempre podremos suponer que $b^t d < 0$ Luego

$$\begin{aligned} \psi(x + td) &= \psi(x) + t \nabla \psi(x) d + \frac{1}{2} d^t G d \\ &= \psi(x) + t(Gx + b)^t d \\ &= \psi(x) + t x^t G d + t b^t d. \end{aligned}$$

Pero $Gd = 0$. En efecto

$$Gd = (QDQ^t)d = (QD)(Q^t d) = (QD) \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

2237

$$= Q \left[\begin{array}{c} \left(\begin{array}{c} \sigma_1 \\ \vdots \\ \sigma_i \\ \vdots \\ \sigma_n \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{array} \right) \\ \left(\begin{array}{c} 0 \\ \vdots \\ \sigma_i \\ \vdots \\ 0 \end{array} \right) \end{array} \right] = \left(\begin{array}{c} 0 \\ \vdots \\ \sigma_i \\ \vdots \\ 0 \end{array} \right) = 0$$

por lo tanto

$$\psi(x + td) = \psi(x) + tb^T d.$$

Luego $\psi(x + td)$ Es una recta con pendiente negativa y

$$\psi(x + td) \rightarrow -\infty, \text{ cuando } t \rightarrow \infty .$$

Con todo esto podemos concluir que la Descomposición Espectral, resuelve de manera totalmente satisfactoria el problema (2.1). Sin embargo, su costo computacional es frecuentemente intolerable y la búsqueda de alternativas más baratas es necesaria.

La manera más popular de resolver (2.1) se basa en la **Factorización de Cholesky** de G . Tal procedimiento funciona y es estable solo cuando G es definida positiva, en tal caso:

$$G = LDL^T$$

Donde $L \in \mathbb{R}^n$ matriz triangular inferior y elementos de la diagonal iguales a 1,
 $D \in \mathbb{R}^{n \times n}$ matriz diagonal con elementos positivos.

El siguiente algoritmo halla los factores Cholesky de G .

ALGORITMO 2.2.1:

$$d_{11} = g_{11}$$

Para $j = 2$ hasta n hacer



2237

$$d_{jj} := g_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} d_{kk} l_{jk}^2$$

Si $j = n$ Pare.

Si $j < n$ Entonces

Para $i = j + 1$ hasta n hacer

$$l_{ij} := \frac{1}{d_{jj}} \left(g_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} d_{kk} l_{jk} l_{ik} \right)$$

El algoritmo de Cholesky termina produciendo $D > 0 \leftrightarrow G$ es definida positiva. Si G es singular o indefinida, en algún momento aparecerá un $d_{jj} \leq 0$ en el cálculo de estas entradas.

En los casos en que la factorización de Cholesky de G es completada con éxito, el único minimizador del problema (2.1) es obtenido resolviendo:

$$LDL^t x = -b$$

Proceso que puede ser descompuesto en tres pasos:

- a) Resolver $Ly = -b$
- b) Resolver $Dz = y$
- c) Resolver $L^t x = z$

La minimización de la función cuadrática bajo este procedimiento alcanza $O(n^3/6)$ de tiempo. Cuando con el algoritmo 2.2.1, detectamos que con la matriz G no es definida positiva, podemos apelar por el proceso mucho más costoso de calcular su descomposición espectral.

CAPITULO 3

Métodos Clásicos para Minimización de Cuadráticas

3.1 MÉTODO DE NEWTON:

En esta sección presentamos el Método de Newton en su forma más básica o clásica. Este método nos sirve para encontrar un cero de una función no lineal. Cuando la utilizamos para la optimización de una función f y aplicando la condición necesaria de primer orden para un minimizador local, se obtiene el sistema:

$$\nabla f(x) = 0.$$

Dado que el Jacobiano de $\nabla f(x)$ es $\nabla^2 f(x)$, el método de Newton nos conduce a la siguiente fórmula:

$$x_{k+1} = x_k - [\nabla^2 f(x)]^{-1} \nabla f(x).$$

El método de Newton se escribe a menudo como $x_{k+1} = x_k + p_k$, donde p_k es la solución de la ecuación de Newton:

$$[\nabla^2 f(x)]p = -\nabla f(x).$$

Esto indica que el paso p se puede obtener normalmente mediante la resolución de un sistema lineal de ecuaciones en lugar de calcular la inversa de la Hessiana.

3.2 REGIÓN DE CONFIANZA:

Consideremos un problema genérico de optimización:

$$\begin{aligned} & \text{Minimizar } f(x) \\ & x \in \Omega. \end{aligned} \tag{3.1}$$

donde Ω es un subconjunto arbitrario de \mathbb{R}^n . La idea básica es en cada iteración, construir una aproximación cuadrática o modelo cuadrático para una función objetivo en torno al punto actual x_k :

$$f(x) \approx \psi_k(x) \equiv f(x_k) + g(x_k)^t(x - x_k) + \frac{1}{2}(x - x_k)^t B_k(x - x_k), \tag{3.2}$$

donde $g(x_k) = \nabla f(x_k)$ y $B_k \in \mathbb{R}^{n \times n}$ es simétrica.

Como el modelo cuadrático (3.2) deja de ser representativo a medida que x se aleja de x_k , podemos confiar en aproximar $f(x)$ por $\psi_k(x)$ en una vecindad de x_k o sea, en el conjunto.

$$\{x \in \Omega \mid \|x - x_k\| \leq \Delta\}, \tag{3.3}$$

donde $\Delta > 0$ y $\|\cdot\|$ es una norma cualquiera en \mathbb{R}^n .

De esta forma, un minimizador de ψ_k en la región (3.3) sería una buena aproximación para el minimizador de f en la misma región. No en tanto, si el valor de f en el minimizador de ψ_k no es suficientemente menor que $f(x_k)$ reducimos el radio Δ y definimos un nuevo subproblema con un dominio menor. El algoritmo conceptual a seguir sistematiza estas ideas.

ALGORITMO 3.2.1: REGION DE CONFIANZA

Fijemos $\Delta_{\min} > 0$, $\alpha \in (0,1)$, $x_0 \in \Omega$ dado:

Paso (1) Escoger $\Delta > \Delta_{\min}$ y B_k simétrica.

definir $\psi_k(x) = f(x_k) + g(x_k)^t(x - x_k) + \frac{1}{2}(x - x_k)^t B_k(x - x_k)$.

Paso (2) Encontrar \bar{x} minimizador aproximado de ψ_k

sujeto a $x \in \Omega / \|x - x_k\| \leq \Delta$.

Paso (3) Si $f(\bar{x}) \leq f(x_k) + \alpha [\psi_k(\bar{x}) - \psi_k(x)]$,

definir $x_{k+1} = \bar{x}$ y terminar la iteración.

Si no, escoger $\Delta_* \in [0.1\|\bar{x} - x_k\|, 0.9\Delta]$, $\Delta \leftarrow \Delta_*$ y regresar al paso (2).

En la forma presentada, el algoritmo de región de confianza se aplica a cualquier problema de optimización con o sin restricciones, no entanto los subproblemas de minimizar ψ_k en (3.3) pueden ser más difíciles que un problema original, circunstancias que es atenuada por la expresión “minimizador aproximado” usado en el paso (2). El radio original de la región de confianza en la iteración k siempre es mayor o igual a una raíz fija Δ_{\min} esto representa una necesidad de por lo menos en la primera tentativa, estaremos suficientemente tentados para no fijarnos con pasos cortos. Más aún, un requisito $\Delta > \Delta_{\min}$ facilita las pruebas de convergencia, más no es esencial en la metodología de regiones de confianza.

Un criterio de aceptación de soluciones de subproblemas es dado con el paso (3).

En él se establece que una disminución de f debe ser por lo menos una fracción de la disminución del modelo ψ_k y usualmente, se escoge $\alpha = 0.1$. Existen muchas reglas prácticas para definir un valor de Δ en el comienzo de cada iteración, en función del éxito o fracaso de la iteración anterior. La idea es que, si la iteración anterior fue muy buena, en el sentido de que la función objetivo disminuye casi tanto o más que el modelo cuadrático, este merece más confianza y consecutivamente Δ debe ser aumentado. En general para la definición del Δ_* en el paso (3), son usados procedimientos muy simples, por

ejemplo $\Delta_* = \frac{\|\bar{x} - x_k\|}{2}$. El algoritmo de región de confianza, fue analizado con

esta generalidad, en las secciones siguientes, estudiaremos la aplicación de este método para dos tipos de región factibles.

3.3 METODO DE NEWTON USANDO REGION DE CONFIANZA:

Para un problema de minimización sin restricciones:

$$\begin{aligned} \text{Minimizar } f(x) & & (3.4) \\ x \in \mathbb{R}^n. & \end{aligned}$$

Veremos que con los cuidados necesarios, el método de Newton podrá disfrutar de las propiedades de convergencia global en un punto estacionario de primer orden. El algoritmo genérico basado en el esquema de región de confianza proporcionará una manera mucho más natural de globalizar el método de Newton, con una conservación de subproblemas newtonianos para la determinación de puntos nuevos después de eventuales fracasos. Este nuevo procedimiento permite un resultado extremadamente atrayente: Los puntos límites son puntos críticos del primer y segundo orden.

ALGORITMO 3.3.1: NEWTON CON REGION DE CONFIANZA.

Fijemos $\Delta_{\min} > 0$, $\alpha \in (0,1)$, $x_0 \in \mathbb{R}^n$ dado:

Paso (1) Escoger $\Delta > \Delta_{\min}$ calcular $B_k = \nabla^2 f(x_k)$.

Paso (2) Definir \bar{x} como minimizador global de $\psi_k(x)$ sujeto a $\|x - x_k\| \leq \Delta$.

Paso (3) Si $f(\bar{x}) \leq f(x_k) + \alpha [\psi_k(\bar{x}) - \psi_k(x_k)]$,

definir $x_{k+1} = \bar{x}$, $\Delta_k = \Delta$ y terminar la iteración.

Si no, escoger $\Delta_* \in [0.1\|x - x_k\|, 0.9\Delta]$, $\Delta \leftarrow \Delta_*$ y regresar al paso (2).

El subproblema del paso (2) consiste en encontrar un minimizador global de cuadrática ψ_k en la bola $\|x - x_k\| \leq \Delta$ Para una norma arbitraria, este problema

puede ser bastante difícil, sin embargo, cuando $\| \cdot \|$ es una norma euclidiana, existen técnicas relativamente simples de resolverlo. En el capítulo 2 se estudio una forma de resolver cuadráticas usando factorizaciones de Cholesky sin embargo en el paso (2) exigimos el minimizador global "Exacto" del subproblema, para ello podemos elegir el algoritmo iterativo Mori-Sorensen, como una posibilidad, el cual permite cierto grado de inexactitud, en sentido de que las sucesivas iteraciones x^l son soluciones exactas del problema de la forma:

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar } \psi_k(x) \\ &\text{sujeto a } \|x - x_k\| \leq \Delta^l, \end{aligned}$$

donde $\Delta^l \rightarrow \Delta$. Como la elección de Δ en el paso (1) o en el paso (3) no es rígida, podemos suspender el proceso iterativo cuando, digamos, $\|\Delta^l - \Delta\| \leq 0.1\Delta$, y redefinimos posteriormente $\Delta \leftarrow \Delta^l$. De esa manera, el número de factorización de Cholesky invocados por el método Mori-Sorensen queda bastante moderado sin embargo, es evidente su elevado costo.

A continuación vamos a mostrar que, a menos que x_k sea un punto estacionario de segundo orden, la próxima iteración x_{k+1} estará bien definida y satisface $f(x_{k+1}) < f(x_k)$. Este será un paso previo a la prueba de que todo punto límite es estacionario de segundo orden. A lo largo de esta sección supondremos que $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$. Como en el capítulo anterior denotamos $g(x) = \nabla f(x)$.

TEOREMA 3.3.2: (BUENA DEFINICIÓN)

Si x_k no es un punto estacionario de segundo orden de (3.4) entonces x_{k+1} está bien definida y $f(x_{k+1}) < f(x_k)$.

Prueba:

Si x_k no es punto estacionario de segundo orden de (3.1) entonces

$$g(x_k) \neq 0 \quad (3.5)$$

O

$$g(x_k) = 0 \quad \text{y} \quad \nabla^2 f(x_k) \not\geq 0 \quad (3.6)$$

Supongamos inicialmente que $g(x_k) \neq 0$. Sea $d \in \mathbb{R}^n$ tal que $\|d\| = 1$ y

$$g(x_k)^t d < 0 \quad (3.7)$$

Sea $\bar{x}(\Delta)$ minimizador de $\psi_k(x)$ sujeto a $\|x - x_k\| \leq \Delta$. Para simplificar, escribiremos $\bar{x} = \bar{x}(\Delta)$. Como $\|\Delta d\| = \Delta$.

Tenemos

$$\psi_k(\bar{x}) \leq \psi_k(x_k + \Delta d) = f(x_k) + g(x_k)^t \Delta d + \frac{1}{2} \Delta d^t B_k \Delta d.$$

Ó sea

$$\psi_k(\bar{x}) - f(x_k) \leq g(x_k)^t \Delta d + \frac{1}{2} \Delta d^t \nabla^2 f(x_k) \Delta d \leq g(x_k)^t \Delta d + \frac{\|\nabla^2 f(x_k)\| \Delta^2}{2}.$$

Para la última desigualdad siempre existirá un $\Delta \in \mathbb{R}$ tal que sea válida.

Luego, como $f(x_k) = \psi_k(x_k)$,

$$\frac{\psi_k(\bar{x}) - \psi_k(x_k)}{\Delta} \leq g(x_k)^t d + \frac{\|\nabla^2 f(x_k)\| \Delta}{2}.$$

Por otro lado, existe $\bar{\Delta} > 0$ tal que para $\Delta \leq \bar{\Delta}$, y

$$\frac{\psi_k(\bar{x}) - \psi_k(x_k)}{\Delta} \leq \frac{g(x_k)^t d}{2} = a < 0. \quad (3.8)$$

Definimos

$$\rho(\Delta) = \frac{f(\bar{x}) - f(x_k)}{\psi_k(\bar{x}) - \psi_k(x_k)}, \quad (3.9)$$

y entonces de (3.8) obtenemos:

$$\begin{aligned} |\rho(\Delta) - 1| &= \left| \frac{f(\bar{x}) - f(x_k) - [\psi_k(\bar{x}) - \psi_k(x_k)]}{\psi_k(\bar{x}) - \psi_k(x_k)} \right| = \left| \frac{f(\bar{x}) - f(x_k)}{\psi_k(\bar{x}) - \psi_k(x_k)} \right| \\ &= \left| \frac{f(\bar{x}) - f(x_k) - g(x_k)^t(\bar{x} - x_k) - \frac{1}{2}(\bar{x} - x_k)^t \nabla^2 f(x_k)(\bar{x} - x_k)}{\psi_k(\bar{x}) - \psi_k(x_k)} \right| \\ &\leq o(\Delta^2) / (-a\Delta) \rightarrow 0, \text{ cuando } \Delta \rightarrow 0. \end{aligned}$$

Luego, $\lim_{\Delta \rightarrow 0} \rho(\Delta) = 1$, o sea, existe $\bar{\Delta} \in (0, \bar{\Delta}]$ tal que para $\Delta \leq \bar{\Delta}$,

$$f(\bar{x}(\Delta)) \leq f(x_k) + \alpha[\psi_k(\bar{x}(\Delta)) - \psi_k(x_k)]. \quad (3.10)$$

Por lo tanto x_{k+1} está bien definida en este caso.

Supongamos ahora que vale 3.6, entonces existe $d \in \mathbb{R}^n$ tal que $\|d\| = 1$

$$d^t \nabla^2 f(x_k) d < 0 \quad (3.11)$$

Como ante, sea $\bar{x} = \bar{x}(\Delta)$, minimizador global de $\psi_k(x)$ sujeto a $\|x - x_k\| \leq \Delta$.

Así, por (3.6) se sigue que para $\Delta \leq \Delta_1$,

$$\psi_k(\bar{x}) \leq \psi_k(x_k + \Delta d) = f(x_k) + g(x_k)^t \Delta d + \frac{1}{2} \Delta d^t \frac{1}{2} \nabla^2 f(x_k) \Delta d.$$

$$\frac{\psi_k(\bar{x}) - \psi_k(x_k)}{\Delta^2} \leq \frac{1}{2} d^t \nabla^2 f(x_k) d.$$

Por tanto, existe $\bar{\Delta} > 0$ tal que para $\Delta \leq \bar{\Delta}$,

$$\frac{\psi_k(\bar{x}) - \psi_k(x_k)}{\Delta^2} \leq \frac{1}{4} d^t \nabla^2 f(x_k) d = b < 0. \quad (3.12)$$

Entonces usando la aproximación de Taylor de segundo orden, tenemos:

$$|\rho(\Delta) - 1| = \left| \frac{f(\bar{x}) - f(x_k)}{\psi_k(\bar{x}) - \psi_k(x_k)} \right| \leq \frac{o\left(\|\bar{x} - x_k\|^2\right)}{\Delta^2 b} \rightarrow 0.$$

Luego, $\lim_{\Delta \rightarrow 0} \rho(\Delta) = 1$. Así, para Δ suficientemente pequeño, (3.10) se verifica y completa la prueba. ■

La convergencia global para puntos que satisfacen las condiciones necesarias de segundo orden en el siguiente teorema.

TEOREMA 3.2.3: CONVERGENCIA GLOBAL DE SEGUNDO ORDEN.

Sea $\{x_k\}$ una sucesión infinita generada por el algoritmo 3.3.1. Si x_* es un punto límite de $\{x_k\}$, entonces $\nabla f(x_*) = 0$ y $\nabla^2 f(x_*) \geq 0$.

Prueba:

Sea K_1 un conjunto infinito de índices tal que:

$$\lim_{k \in K_1} x_k = x_*.$$

Hay dos posibilidades para ser consideradas:

$$\inf_{k \in K_1} \Delta_k = 0 \quad (3.13)$$

o

$$\inf_{k \in K_1} \Delta_k > 0. \quad (3.14)$$

Asumiendo inicialmente (3.13), entonces existe $K_2 \subset K_1$ tal que

$$\inf_{k \in K_2} \Delta_k = 0 \quad (3.15)$$

De esta forma, existe $k_2 \in \mathbb{N}$ tal que $\Delta_k < \Delta_{\min}$ para todo $k \in K_3$, donde $K_3 \equiv \{k \in K_2 / k \geq k_2\}$., además en cada iteración inicialmente tentamos el radio $\Delta \geq \Delta_{\min}$. Entonces para cada $k \in K_3$, existen $\bar{\Delta}_k$ y $\bar{x}(\bar{\Delta}_k)$ tal que $\bar{x}(\bar{\Delta}_k)$ es solución global de:

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar } \psi_k(x) \\ &\|x - x_k\| \leq \bar{\Delta}_k \end{aligned} \quad (3.16)$$

además

$$f(\bar{x}(\bar{\Delta}_k)) \leq f(x_k) + \alpha [\psi_k(\bar{x}(\bar{\Delta}_k)) - \psi_k(x_k)]. \quad (3.17)$$

Por la actualización del radio de confianza en el paso (3) del algoritmo 3.3.1, tenemos:

$$\Delta_k > 0.1 \|\bar{x}(\bar{\Delta}_k) - x_k\|. \quad (3.18)$$

Luego por (3.15) y (3.18) se sigue que:

$$\lim_{k \in K_3} \|\bar{x}(\bar{\Delta}_k) - x_k\| = 0 \quad (3.19)$$

Supongamos que x_* no sea un minimizador local de (3.4). Entonces:

$$\nabla f(x_*) = g(x_*) \neq 0 \quad (3.20)$$

Si ocurre (3.20), entonces existe $d \in \mathbb{R}^n$ tal que $\|d\| = 1$ y

$$g(x_*)^t d < 0. \quad (3.21)$$

Entonces, para $k \in K_3$,

$$\psi_k(\bar{x}(\bar{\Delta}_k)) \leq \psi_k(x_k + \bar{\Delta}_k d) = f(x_k) + \bar{\Delta}_k g(x_k)^t d + \frac{\bar{\Delta}_k^2}{2} d^t \frac{1}{2} \nabla^2 f(x_k) d$$

O sea,

$$\psi_k(\bar{x}(\bar{\Delta}_k)) - f(x_k) \leq \bar{\Delta}_k g(x_k)^t d + \frac{\bar{\Delta}_k^2}{2} \|\nabla^2 f(x_k)\|$$

Luego como $f(x_k) = \psi_k(x_k)$,

$$\frac{\psi_k(\bar{x}(\bar{\Delta}_k)) - \psi_k(x_k)}{\bar{\Delta}_k} \leq g(x_k)^t d + \frac{\|\nabla^2 f(x_k)\|}{2} \bar{\Delta}_k.$$

Por lo tanto existe $k_3 \in \mathbb{N}$ tal que para $k \in K_4$, donde $K_4 = \{k \in K_3 / k \geq k_3\}$,

$$\frac{\psi_k(\bar{x}(\bar{\Delta}_k)) - \psi_k(x_k)}{\bar{\Delta}_k} \leq \frac{g(x_*)^t d}{2} = c_1 < 0. \quad (3.22)$$

Definimos:

$$\bar{\rho}_k = \frac{f(\bar{x}(\bar{\Delta}_k)) - f(x_k)}{\psi_k(\bar{x}(\bar{\Delta}_k)) - \psi_k(x_k)} \quad (3.23)$$

Entonces:

$$\begin{aligned} |\bar{\rho}_k - 1| &= \left| \frac{f(\bar{x}(\bar{\Delta}_k)) - f(x_k) - [\psi_k(\bar{x}(\bar{\Delta}_k)) - \psi_k(x_k)]}{\psi_k(\bar{x}(\bar{\Delta}_k)) - \psi_k(x_k)} \right| \\ &= \left| \frac{f(\bar{x}(\bar{\Delta}_k)) - f(x_k)}{\psi_k(\bar{x}(\bar{\Delta}_k)) - \psi_k(x_k)} \right| = \frac{o(\|\bar{x}(\bar{\Delta}_k) - x_k\|^2)}{-c_1 \bar{\Delta}_k^2} = o(\bar{\Delta}_k). \end{aligned}$$

Por lo tanto,

$$\lim_{k \in K_4} \bar{\rho}_k = 1$$

Lo que contradice el hecho de que las raíces $\bar{\Delta}_k$ fueron rechazadas. Luego $\nabla f(x_*) = 0$.

Vamos ahora a asumir la no valides de $\nabla^2 f(x) \geq 0$. Entonces existe $d \in \mathbb{R}^n$ tal que $\|d\|=1$ y

$$d^t \nabla^2 f(x_*) d < 0 \quad (3.24)$$

Para $k \in K_3$, definimos:

$$d_k = \begin{cases} \bar{\Delta}_k d, & \text{si } g(x_k)^t d \leq 0 \\ -\bar{\Delta}_k d, & \text{si } g(x_k)^t d > 0 \end{cases}$$

Entonces,

$$\psi_k(\bar{x}(\bar{\Delta}_k)) \leq \psi_k(x_k + d_k) \leq f(x_k) \leq + \frac{\bar{\Delta}_k^2}{2} d^t \nabla^2 f(x_k) d,$$

Luego,

$$\frac{\psi_k(\bar{x}(\bar{\Delta}_k)) - \psi_k(x_k)}{\bar{\Delta}_k^2} \leq \frac{1}{2} d^t \nabla^2 f(x_k) d.$$

Por tanto, existe $k_4 \in \mathbb{N}$ tal que para $k \in K_5$, donde $K_5 = \{k \in K_4 / k \geq k_4\}$,

$$\frac{\psi_k(\bar{x}(\bar{\Delta}_k)) - \psi_k(x_k)}{\bar{\Delta}_k^2} \leq \frac{1}{4} d^t \nabla^2 f(x_k) d =: c_2 < 0.$$

Así, usando de nuevo, una aproximación de Taylor de segundo orden, tenemos:

$$|\bar{\rho}_k - 1| = \left| \frac{f(\bar{x}(\bar{\Delta}_k)) - \psi_k(\bar{x}(\bar{\Delta}_k))}{\psi_k(\bar{x}(\bar{\Delta}_k)) - \psi_k(x_k)} \right| \leq \frac{1}{|c_2|} \frac{o\left(\|\bar{x}(\bar{\Delta}_k) - x_k\|^2\right)}{\bar{\Delta}_k^2}.$$

Por lo tanto $\lim_{k \in K_5} \bar{\rho}_k = 1$, el que contradice el hecho de $\bar{\Delta}_k$ ser un radio rechazado.

Así, $\nabla^2 f(x_*) \geq 0$, el que concluye la prueba cuando es válido (3.13).

Vamos ahora a considerar la posibilidades (3.14). $\lim_{k \in K_1} x_k = x_*$ y $\{f\{x_k\}\}_{k \in \mathbb{N}}$ y monótonamente decreciente, tenemos:

$$\lim_{k \in K_1} (f(x_{k+1}) - f(x_k)) = 0. \quad (3.25)$$

Además por el paso (3) del algoritmo 3.3.1,

$$f(x_{k+1}) \leq f(x_k) + \alpha[\psi_k(x_{k+1}) - \psi_k(x_k)]. \quad (3.26)$$

Entonces, por (3.25) y (3.26), se sigue que.

$$\lim_{k \in K_1} (\psi_k(x_{k+1}) - \psi_k(x_k)) = 0. \quad (3.27)$$

Definimos $\underline{\Delta} = \inf_{k \in K_1} \Delta_k > 0$ y llamamos \hat{x} es una solución global de

$$\begin{aligned} \text{Minimizar } g(x_*)^t(x - x_*) + \frac{1}{2}(x - x_*)^t \nabla^2 f(x_*)(x - x_*) \\ \|x - x_*\| \leq \underline{\Delta}/2 \end{aligned} \quad (3.28)$$

Sea $k_5 \in \mathbb{N}$ tal que

$$\|x_k - x_*\| \leq \underline{\Delta}/2 \quad (3.29)$$

Para todo $k \in K_6 \equiv \{k \in K_5 / k \geq k_5\}$.

Para $k \in K_6$, por (3.28) y (3.29), tenemos:

$$\|\hat{x} - x_k\| \leq \underline{\Delta} \leq \Delta_k, \quad (3.30)$$

O sea, \hat{x} es factible para el subproblema del paso 2 del Algoritmo 3.3.1. Entonces, por el hecho de x_{k+1} ser minimizador global de $\psi_k(x)$ en $\|x - x_k\| \leq \Delta_k$, se sigue que:

$$\psi_k(x_{k+1}) \leq \psi_k(\hat{x}) = f(x_k) + g(x_k)^t(\hat{x} - x_k) + \frac{1}{2}(\hat{x} - x_k)^t \nabla^2 f(x_k)(\hat{x} - x_k), \quad (3.31)$$

Es decir:

$$\psi_k(x_{k+1}) - \psi_k(x_k) = g(x_k)^t(\hat{x} - x_k) + \frac{1}{2}(\hat{x} - x_k)^t \nabla^2 f(x_k)(\hat{x} - x_k) \quad (3.32)$$

Por (3.27), pasando por (3.32) el límite para $k \in K_6$, obtenemos:

$$0 \leq g(x_*)^t(\hat{x} - x_*) + \frac{1}{2}(\hat{x} - x_*)^t \nabla^2 f(x_*)(\hat{x} - x_*),$$

Por tanto x_* es minimizador de (3.28) con restricción $\|x - x_*\| \leq \underline{\Delta}/2$ inactiva.

Luego $g(x_*) = 0$ y $\nabla^2 f(x_*) \geq 0$ por las condiciones necesarias de optimalidad de segundo orden para minimización de restricciones, lo cual completa la prueba. ■

4.1 MINIMIZACIÓN DE CUADRÁTICAS CON RESTRICCIONES:

Una importante porción del procedimiento de minimización irrestricta que se presentará en la siguiente sección será enfocado en la solución del siguiente problema dado:

$$\psi(w) = f + g^t w + \frac{1}{2} w^t B w, \quad (4.1)$$

calcular $p \in \mathbb{R}^n$, tal que $\psi(p) = \min\{\psi(w) : \|w\| \leq \Delta\}$.

Donde $B = B^t \in \mathbb{R}^{n \times n}$; $w, g \in \mathbb{R}^n$; $f, \Delta \in \mathbb{R}$ con $\Delta > 0$, y $\|\cdot\|$ euclidiana.

La finalidad de esta sección es hacer un estudio completo de los aspectos teóricos del problema (4.1) y exponer naturalmente las dificultades del cálculo que pueden estar presentes.

Varios autores han tratado el problema (4.1) a través de problemas relajados. Este problema también aparece implícitamente cuando se trata de minimización de cuadráticas por mínimos cuadrados no lineales ([16], [18]).

El problema (4.1) apareció por primera vez como una subrutina cuando se hace minimizaciones sin restricciones en la obra de Goldfeld, Quandt y Trotter [9].

Hebden [14] hizo también una importante contribución relativa a la computación práctica de una solución del problema (4.1), ver [8]. A continuación desarrollamos el trabajo:

Si el método de Lagrange es aplicado al problema equivalente (4.1):

$$\begin{aligned} \min \psi(w) \\ \text{s.a.} \\ w^t w \leq \Delta^2, \end{aligned} \tag{4.2}$$

Entonces una conclusión directa de las condiciones necesarias de primer orden, para que p resuelva (4.2) y por tanto (4.1) debe satisfacer la siguiente ecuación:

$$(B + \lambda I)p = -g \text{ con } \lambda(w^t w - \Delta^2) = 0,$$

donde $\lambda \geq 0$ es el multiplicador de Lagrange asociado a la restricción $w^t w \leq \Delta^2$.

El siguiente lema caracteriza la solución del problema (4.1).

LEMA 4.1.1: Si p es una solución de (4.1) entonces p es una solución de la ecuación de la forma:

$$(B + \lambda I)p = -g \tag{4.3}$$

Con $\lambda \geq 0$, $\lambda(w^t w - \Delta^2) = 0$ y $B + \lambda I$ semidefinida positiva.

Prueba:

a) Verifiquemos si el problema (4.3) es correcto:

Si p resuelve el problema (4.1) entonces resuelve el problema (4.2).

$$\begin{aligned} \min \psi(w) = f + g^t w + \frac{1}{2} w^t B w. \\ \text{s.a.} \\ w^t w \leq \Delta^2 \end{aligned} \tag{4.4}$$

Aplicando el método de Lagrange se obtiene el problema siguiente:

$$\min L(w) = f + g^t w + \frac{1}{2} w^t B w + \lambda (w^t w - \Delta^2) \quad (4.5)$$

donde $w \in \mathbb{R}^n$

Y usando las condiciones K.K.T (ver Apéndice 1) se concluye que p es solución de (4.5) si y solo si:

- i. $\exists \lambda^* \geq 0$.
- ii. $\lambda^* (p^t p - \Delta^2) = 0$.
- iii. $\nabla L(p) = 0$.

De (iii) notamos que:

$$\nabla L(w) = g + Bw + 2\lambda^* w,$$

evaluando en p obtenemos:

$$0 = \nabla L(p) = g + Bp + 2\lambda^* p.$$

Sea $\lambda = 2\lambda^* \geq 0$, entonces:

$$0 = g + Bp + \lambda p$$

$$(B + \lambda I)p = -g.$$

b) Por demostrar que $B + \lambda I$ es semidefinida positiva.

Supongamos que $p \neq 0$. Dado que p resuelve (4.1), también resuelve

$$\begin{aligned} \min \psi(w) \\ \text{s.a. } \|w\| = \|p\| \end{aligned}$$

Debido a que $\|p\| \leq \Delta$, se deduce que:

$$\psi(w) \geq \psi(p), \text{ para todo } w \text{ tal que } \|w\| = \|p\|.$$

Esta desigualdad implica:

$$\psi(w) = f + g^t w + \frac{1}{2} w^t B w \geq f + g^t p + \frac{1}{2} p^t B p = \psi(p)$$

Y con (4.3) se obtiene:

$$f - ((B + \lambda I)p)^t w + \frac{1}{2} w^t B w \geq f - ((B + \lambda I)p)^t p + \frac{1}{2} p^t B p$$

$$f - p^t (B + \lambda I) w + \frac{1}{2} w^t B w \geq f - p^t (B + \lambda I) p + \frac{1}{2} p^t B p. \quad (4.6)$$

$$-p^t (B + \lambda I) w + \frac{1}{2} w^t B w \geq -p^t (B + \lambda I) p + \frac{1}{2} p^t B p$$

$$-p^t B w - \lambda p^t w + \frac{1}{2} w^t B w \geq -p^t B p - \lambda p^t p + \frac{1}{2} p^t B p$$

$$+\frac{\lambda}{2} w^t w - \frac{\lambda}{2} p^t p - p^t B w - \lambda p^t w + \frac{1}{2} w^t B w \geq -p^t B p - \lambda p^t p + \frac{1}{2} p^t B p + \frac{\lambda}{2} w^t w - \frac{\lambda}{2} p^t p$$

$$+\frac{\lambda}{2} w^t w - \frac{\lambda}{2} p^t p - p^t B w - \lambda p^t w + \frac{1}{2} w^t B w + p^t B p + \lambda p^t p - \frac{1}{2} p^t B p \geq \frac{\lambda}{2} (w^t w - p^t p)$$

$$\frac{1}{2} w^t B w - \frac{1}{2} p^t B w - \frac{1}{2} w^t B p + \frac{1}{2} p^t B p + \frac{\lambda}{2} w^t w - \frac{\lambda}{2} p^t w - \frac{\lambda}{2} w^t p + \frac{\lambda}{2} p^t p \geq \frac{\lambda}{2} (w^t w - p^t p)$$

$$\frac{1}{2} (w - p)^t (B + \lambda I) (w - p) \geq \frac{\lambda}{2} (w^t w - p^t p) = 0, \quad (4.7)$$

para todo w tal que $\|w\| = \|p\|$.

- Si $p \neq 0 \Rightarrow (w - p)^t (B + \lambda I) (w - p) \geq 0 \quad \forall w \in \mathbb{R}^n$, si $v = (w - p)$ entonces

$$v^t (B + \lambda I) v \geq 0 \quad \forall v \in \mathbb{R}^n \Rightarrow (B + \lambda I),$$

es semidefinida positiva $\forall v \in \mathbb{R}^n$.

- Si $p = 0$ se tiene de (4.3) que $g = 0$. Luego por hipotesis $p = 0$ resuelve

$\min \left\{ \frac{1}{2} w^t B w : \|w\| \leq \Delta \right\}$ y como:

$$\min \psi(w) = f + g^t w + \frac{1}{2} w^t B w$$

es equivalente a:

$$\min \psi(w) = g^t w + \frac{1}{2} w^t B w = \min \frac{1}{2} w^t B w.$$

Si p resuelve $\min \psi(w) = f + g^t w + \frac{1}{2} w^t B w$ entonces p también resuelve $\min \frac{1}{2} w^t B w$,

Además, si:

$$h(w) = \frac{1}{2} w^t B w \geq h(p) = \frac{1}{2} p^t B p = 0$$

$$w^t B w \geq 0,$$

entonces B es semidefinida positiva y como $\lambda \geq 0$ entonces, $B + \lambda I$ es semidefinida positiva. ■

El lema 4.1.1 establece condiciones necesarias concernientes al cálculo de λ , p donde p resuelve el problema (4.1). Nuestro siguiente resultado establece condiciones suficientes que garantizan que p es solución del problema (4.1) Estos resultados son dados en [9], sin embargo, queremos presentar una demostración de estos resultados más completos y adaptados mejor a este trabajo.

Lema 4.1.2: Sea $\lambda \in \mathbb{R}$, $p \in \mathbb{R}^n$ satisfice:

$$(B + \lambda I)p = -g \text{ con } B + \lambda I \text{ semidefinida positiva.} \quad (4.8)$$

- i. Si $\lambda = 0$ y $\|p\| \leq \Delta$ entonces p resuelve (4.1)
- ii. Si $\|p\| = \Delta$ entonces p resuelve:

$$\min \{ \psi(w) : \|w\| = \Delta \}.$$

- iii. Si $\lambda \geq 0$ y $\|p\| = \Delta$ entonces p resuelve (4.1)

Si, $B + \lambda I$ es semidefinida positiva entonces p es único en cada uno de los casos (i), (ii), (iii).

Prueba:

Si λ, p satisfacen (4.8) entonces:

$$f + g^t w + \frac{1}{2} w^t (B + \lambda I) w \geq f + g^t p + \frac{1}{2} p^t (B + \lambda I) p, \quad (4.9)$$

es válido para cualquier $w \in \mathbb{R}^n$ tal que $\|w\| \leq \Delta$.

Se deduce que:

$$f + g^t w + \frac{1}{2} w^t B w + \frac{1}{2} \lambda w^t B w \geq f + g^t p + \frac{1}{2} p^t B p + \frac{1}{2} \lambda p^t B p \quad (4.10)$$

$$f + g^t w + \frac{1}{2} w^t B w \geq f + g^t p + \frac{1}{2} p^t B p + \frac{1}{2} \lambda p^t B p - \frac{1}{2} \lambda w^t B w$$

$$\psi(w) \geq \psi(p) + \frac{\lambda}{2} (p^t p - w^t w). \quad (4.11)$$

Y de esta desigualdad, siendo resultados inmediatos verificamos:

- (i) Si $\lambda = 0$ entonces $\psi(w) \geq \psi(p)$, $\forall w$ con $\|w\| \leq \Delta$.
- (ii) Si $\|p\| = \Delta$ entonces $\psi(w) \geq \psi(p)$, donde p resuelve $\min \{ \psi(w) : \|w\| = \Delta \}$.
- (iii) Si $\lambda \geq 0$ y $\|p\| = \Delta$ entonces $\psi(w) \geq \psi(p)$, $\forall w$ con $\|w\| \leq \Delta$. ■

La solución del problema (4.1) está estrechamente relacionada con la solución de la ecuación no lineal:

$$\Phi(\alpha) = \Delta, \quad \text{donde } \Phi(\alpha) \equiv \left\| (B + \alpha I)^{-1} g \right\|. \quad (4.12)$$

Usando el autosistema de la matriz simétrica B junto con la invariancia de $\|\cdot\|$ bajo transformaciones ortogonales será fácil probar que:

Si $g \neq 0 \Rightarrow \Phi^2(\alpha)$ es una función racional de segundo orden con todos sus polos de segundo orden pertenecientes al subconjunto de los autovalores de $-B$. Luego como se tiene $\lim_{\alpha \rightarrow \infty} \Phi(\alpha) = 0$, debido a la definición de polo (ver Apéndice 3) entonces (4.12) tiene una solución cuando $\Delta > 0$ y $g \neq 0$.

Sea α solución de (4.12) entonces $p = (B + \alpha I)^{-1} g$ es solución de (4.1), debido al lema 4.1.2 (i).

Podemos construir una solución del problema (4.1):

$$\begin{aligned} & \min \psi(w), \\ & \text{s.a} \\ & \|w\| \leq \Delta \end{aligned}$$

usando una solución particular de (4.12).

Sea λ_1 el más pequeño autovalor de B ; y $S_1 = \{q \in \mathbb{R}^n : Bq = \lambda_1 q\}$; el conjunto de los autovectores asociados a λ_1 .

- Si $\hat{\alpha}$ es la mayor raíz de (4.12) cuando $g \neq 0$ entonces:

$$\Phi(\hat{\alpha}) = 0, \text{ es decir } \Phi(\hat{\alpha}) = \|(B + \hat{\alpha}I)^{-1} g\| = 0;$$

Y asumiremos

- $\hat{\alpha} = 0$ cuando $g = 0$.
- Si existiera algún $q \in S_1$ tal que $g^t q \neq 0$ entonces se cumple $Bq = \lambda_1 q$ luego:

$$-Bq = -\lambda_1 q \Rightarrow -\lambda_1 \text{ es autovalor de } -B.$$

Y como $\hat{\alpha}$ es el mayor de las raíces entonces $\hat{\alpha} > -\lambda_1$.

- Si $g \in S_1^\perp$ es decir $g^t q = 0$ para $g \neq 0$ entonces $-\lambda_1$ no es un polo de Φ . En efecto:

Si $g \in S_1^\perp \rightarrow g^t q = 0$ y $-Bq = -\lambda_1 q$ además como $\hat{\alpha}$ es el mayor de las raíces entonces $\hat{\alpha} > -\lambda_1$ debido a que $g \neq 0$, pero de (4.12) tenemos:

$$\Phi(-\lambda_1) \equiv \left\| (B + (-\lambda_1)I)^{-1} g \right\|$$

$$\Phi(-\lambda_1) \|q\| = \left\| (B + (-\lambda_1)I)^{-1} g \cdot q \right\| = 0, \text{ para } g \neq 0.$$

Por lo tanto $\Phi(-\lambda_1)$ está bien definida indicando que $-\lambda_1$ no es un polo de Φ pero si una raíz, esto implica $\hat{\alpha} \leq -\lambda_1$.

- Pero si $\lambda = \max\{0, -\lambda_1, \hat{\alpha}\}$ y hacemos:

$$\theta(\lambda) = \begin{cases} \sqrt{\Delta^2 - \Phi^2(\lambda)} & , \text{ si } \lambda = -\lambda_1 \\ 0 & , \text{ si } \lambda \neq -\lambda_1 \end{cases},$$

notando que $\lambda \geq 0$. Construiremos una solución p del problema (4.1) mediante la ecuación:

$$p = -(B + \lambda I)^+ g + \theta q, \quad (4.13)$$

donde $q \in S_1$, $\|q\| = 1$ y $(+)$ denota la pseudoinversa [29] y por el lema 4.1.2 $(B + \lambda I)$ es semi definida positiva.

Si $\lambda = -\lambda_1$, y como q es autovector de B entonces:

$$q^t (B - \lambda_1 I)^+ = q^t (B + \lambda_1 I)^+ = 0.$$

Por otro lado, si p es solución de (4.8) entonces por (i) o (iii) del lema 4.1.2 y como $\lambda \geq 0$ entonces p es solución del problema (4.1) y $\|p\| = \Delta$ cada vez que $\lambda_1 \leq 0$.

La solución dada por (4.13) muestra que p no es único cuando $g \in S_1$ y $\Phi(-\lambda_1) < \Delta$ debido a la elección arbitraria del signo en la definición de θ .

Esta discusión teórica de la resolución de (4.1) indica dificultades numéricas que pueden surgir cuando se solicite calcular la solución del problema (4.1).

El caso cuando $g \in S_1^\perp$ y $\lambda = -\lambda_1$ implicará un problema muy sensible, es decir cualquier cálculo técnico para resolver (4.8) introducirá un error de redondeo. Para estos casos sensibles, debemos tener presente pequeñas perturbaciones en las cantidades B , g , λ que pueden provocar grandes perturbaciones a la solución p debido al hecho de que $B + \lambda I$ es casi singular. Aparentemente la verdadera naturaleza de la dificultad aquí es la no unicidad de la solución p dada por (4.12). Ilustraremos este punto con un ejemplo sencillo.

Sea:

$$g^t = (1, 0), \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \eta \end{pmatrix} \quad \text{con } \eta \leq 0.$$

El caso difícil surge para valores de η tal que $1/(1-\eta)^2 \leq \Delta^2$. Para estos valores de η la solución de (4.1) son de la forma:

$$p^t = -\left(\frac{1}{1-\eta}, \theta \right) \quad \text{con} \quad \frac{1}{(1-\eta)^2} + \theta^2 = \Delta^2.$$

la perturbación $g_\varepsilon^t = (1, \varepsilon)$ da la solución:

$$p^t = -\left(\frac{1}{1+\lambda}, \frac{\varepsilon}{\eta+\lambda} \right) \quad \text{con} \quad \frac{1}{(1+\lambda)^2} + \frac{\varepsilon^2}{(\eta+\lambda)^2} = \Delta^2.$$

Es evidente que para cualquier elección del signo de θ hay una perturbación ε de signo opuesto tal que:

$$\frac{\|p - p_\varepsilon\|}{\|p\|} \quad \text{es grande.}$$

En caso que $\eta < 0$ tendremos que $\|p\| = \Delta$ que resuelve (4.1) y puede ser llevado a soluciones diferentes como resultado del error introducido por redondeo.

El análisis de convergencia dado en la sección (4.3) dependerá en gran medida del siguiente resultado técnico sobre la cantidad de disminución en el modelo cuadrático local.

Una interpretación geométrica del resultado, es que para una función cuadrática cualquiera, la solución p del problema (4.1) produce una disminución $f - \psi(p)$ que es por lo menos tanto como la disminución de una búsqueda a lo largo de la dirección de máxima pendiente $-g$.

Lema 4.1.3: Sea P una solución del problema (4.1), entonces:

$$f - \psi(p) \geq \frac{1}{2} \|g\| \min \left(\Delta, \frac{\|g\|}{\|B\|} \right).$$

La prueba de este resultado se encuentra en [23].

Esta desigualdad es el ingrediente principal que se utiliza para mostrar la sucesión de los gradientes generados que tienden a cero para el método de Newton Modificado. La razón para solucionar el problema (4.1) se hará evidente a medida que se presentan algunos resultados fuertes de convergencia en la sección (4.3).

Por el momento, suponemos que se puede obtener una solución numérica p del problema (4.1) el cual satisface:

- i. $(B + \lambda I)p = -g + \delta g$ con $B + \lambda I$ semidefinida positiva.
- ii. $\|\delta g\| \leq \begin{cases} \varepsilon_1 \|g\| & , \text{si } \|g\| \neq 0, \\ \varepsilon_1 \Delta & , \text{si } \|g\| = 0, \end{cases}$
- iii. $\begin{cases} \|p\| - \Delta \leq \varepsilon_2 \Delta & \text{cuando } \lambda > 0, \\ \|p\| \leq (1 + \varepsilon_2) \Delta & \text{cuando } \lambda = 0, \end{cases}$

algunos puntos fijos $0 < \varepsilon_1 < \varepsilon_2$ en $(0,1)$ que son consistentes con la precisión aritmética finita.

Los resultados del lema 4.1.2 implican que p resuelve el problema perturbado:

$$\min \left\{ f + \tilde{g}^t w + \frac{1}{2} w^t B w : \|w\| \leq \tilde{\Delta} \right\}, \quad (4.14)$$

donde $\tilde{\Delta}$ y \tilde{g} son pequeñas perturbaciones, además:

$$(-\varepsilon_2) \Delta \leq \tilde{\Delta} \leq (1 + \varepsilon_2) \Delta \quad \text{y} \quad \tilde{g} = g + \delta g \quad \text{con} \quad \|\delta g\| \leq \varepsilon_1 \|g\| \quad \text{cuando} \quad g \neq 0.$$

En nuestro análisis asumiremos $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$. Una trivial pero tediosa modificación del análisis podría ser aplicable para el cálculo de p el cual satisface los criterios anteriores. Usando el lema 4.1.3 se puede deducir una importante desigualdad:

$$f - \psi(p) \geq \frac{1}{2} \|\tilde{g}\| \min\left(\tilde{\Delta}, \frac{\|\tilde{g}\|}{\|B\|}\right)$$

$$f - \psi(p) \geq \frac{1}{2} \|g + \delta g\| \min\left(\tilde{\Delta}, \frac{\|g + \delta g\|}{\|B\|}\right)$$

$$f - \psi(p) \geq \frac{1}{2} \|g\| - \|\delta g\| \min\left(\tilde{\Delta}, \frac{\|g\| - \|\delta g\|}{\|B\|}\right)$$

Por (ii)

$$f - \psi(p) \geq \frac{1}{2} (1 - \varepsilon_1) \|g\| \min\left(\tilde{\Delta}, \frac{(1 - \varepsilon_1) \|g\|}{\|B\|}\right)$$

y por (iii) se convertirá en:

$$f - \psi(p) \geq \frac{1}{2} \|\tilde{g}\| \min\left(\tilde{\Delta}, \frac{\|\tilde{g}\|}{\|B\|}\right) \geq \frac{1}{2} (1 - \varepsilon_1) \|g\| \min\left((1 - \varepsilon_2) \Delta, \frac{(1 - \varepsilon_1) \|g\|}{\|B\|}\right). \quad (4.15)$$

Es fácil ver que la desigualdad (4.15) es suficiente para los propósitos subsiguientes, pero queremos que se abstengan de incluir esta expresión complicada en cada etapa del análisis.

4.2 MÉTODO MODIFICADO DE NEWTON:

Un método para resolver el problema de minimización sin restricción es el Método de Newton aplicada a la búsqueda de un cero del gradiente de la función objetivo, sin embargo, esta iteración no es adecuada como un algoritmo general.

La interacción básica es:

$$x_{k+1} = x_k - G_k^{-1} \nabla f(x_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (4.16)$$

donde la iteración inicial x_0 debe ser específica, $\nabla f(x_k)$ es la gradiente f , $G_k = \nabla^2 f(x_k)$ es una matriz Hessiana de $n \times n$ (simétrica) de segundas derivadas parciales mixtas de f . El algoritmo de acuerdo con lo discutido requiere que f sea dos veces diferenciable en cualquier punto x en el dominio de f y que estas derivadas se pueden evaluar de forma explícita.

Hay tres razones fundamentales por las que este método básico deberá ser modificado:

- I. En primer lugar, la iteración inicial debe estar muy "cerca" de un minimizador local a fin de estar seguro de que la iteración converja
- II. En segundo lugar, incluso si la iteración converge a un valor estacionario x^* es decir $(\nabla f(x^*) = 0)$ no hay garantía de que x^* será un minimizador local.
- III. En tercer lugar, la iteración x_{k+1} puede no estar bien definida por (4.16), si la Hessiana G_k es singular o puede que no sea una medida correcta si G_k es indefinida.

Nuestro propósito es discutir ciertas propiedades teóricas de la modificación de la iteración (4.16). Nuestro enfoque no es nuevo, sin embargo, parece que las propiedades teóricas y numéricas del método propuesto deben ser tratadas por completo el cual es el principal objetivo de este trabajo. El método que consideramos se apoya en el método del modelo región de confianza. Antes de definir la iteración vamos a exponer algunas de las propiedades deseadas de una iteración modificada de nuestro método al cual llamaremos Método de Newton Modificado:

- a) Para una clase suficientemente general de las funciones la iteración debe ser definida y convergente para alguna iteración inicial x_0 .
- b) Cuando la iteración converge a un punto x^* este debe satisfacer algunas condiciones necesarias para una posible minimización.

c) La modificación no debe perder la propiedad de convergencia ganada por el método de Newton.

d) El método debe ser invariante bajo transformaciones lineales afines con las variables, es decir si sustituimos $f(x)$ por $\hat{f}(w) = f(Jw+z)$ donde $J \in \mathbb{R}^{n \times n}$ es no singular y $w, z \in \mathbb{R}^n$, entonces aplicaremos la iteración a \hat{f} con un valor inicial w_0 satisfaciendo $x_0 = Jw_0 + z$ el cual debe producir una sucesión $\{w_k\}$ relacionado a la sucesión $\{x_k\}$ por $x_k = Jw_k + z$, donde $\{x_k\}$ es producido por la aplicación del algoritmo de f con un valor inicial x_0 .

El algoritmo que vamos a proponer satisface los criterios a), b), c) para todos los efectos prácticos. Para empezar introduciremos una factorización de la matriz de Hessiana donde para cada k tenemos:

$$B_k = J_k^t G_k J_k$$

una factorización de G_k con $B_k = B_k^t \in \mathbb{R}^{n \times n}$ y J_k no singular. Sea ρ, η, ξ el número de valores propios positivos, negativos y cero, respectivamente, de la matriz simétrica G_k . Donde (ρ, η, ξ) es llamado la inercia de G_k y por el teorema de Sylvester (Ver Apéndice 2) nos muestra que B_k tiene la misma inercia que G_k .

Para cada k , tomaremos $\Phi_k(w) = f(x_k + J_k w)$, esta función $\Phi_k(w)$ puede ser considerada como una función objetivo localmente escala. Los tres primeros términos de la serie de Taylor de Φ_k sobre $\tilde{w} = 0$ define un modelo cuadrático local:

$$\psi_k(w) = f_k + g_k^t w + \frac{1}{2} w^t B_k w,$$

donde $g_k^t = \nabla f(x_k)^t J_k$ y $f_k = f(x_k) = \Phi_k(0)$. Junto con el modelo cuadrático local mantendremos un parámetro de control $\Delta_k > 0$ que define una región local de confianza $\{w : \|w\| \leq \Delta_k\}$ donde el modelo será considerado válido. Este parámetro Δ_k se analizara durante la iteración de acuerdo con las

normas específicas que fuerzan la convergencia de la sucesión $\{x_k\}$. Estamos considerando potencialmente cualquier factorización simétrica de la matriz G_k , pero ciertos requisitos deben tomarse en cuenta. Por ejemplo, $g_k^t = \nabla f(x_k)^t J_k$ debe ser fácilmente calculado ya sea explícitamente o por resolución de $\nabla f(x_k)^t = g_k^t J_k^{-1}$. Además, será una ventaja si el autosistema de B_k es relativamente de bajo costo para calcularlo o si el más pequeño autovalor y su correspondiente autovector (s) son fáciles de obtener. La razón para esto es que la solución al problema (4.1) jugará un papel importante en esta iteración y como hemos visto, la información de su autosistema puede ser requerida. Esto es especialmente en ciertos puntos x_k donde G_k es indefinida o singular. Ahora estamos listos para definir la iteración.

Algoritmo 4.2.1:

- (1) Sea $k = 1$, y sea $0 < \eta_1 < \eta_2 < 1$, $0 < \gamma_1 < 1 < \gamma_2$ constantes fijas;
- (2) Sea $x_1 \in \mathbb{R}^n$, $\Delta_1 > 0$ dados;
- (3) Si "converge" entonces PARAR;
- (4) Evaluar $f_k := f(x_k)$; $G_k := \nabla^2 f(x_k)$;
Factorizar $B_k := J_k^t G_k J_k$; Evaluar $g_k^t = \nabla f(x_k)^t J_k$;
- (5) Calcular una solución w_k del problema $\min\{\psi_k(w) : \|w\| \leq \Delta_k\}$; fin;
donde: $\psi_k(w) = f_k + g_k^t w + \frac{1}{2} w^t B_k w$;
- (6) Hacemos $ared := \Phi_k(0) - \Phi_k(w)$; $pred := \Phi_k(0) - \psi_k(w)$;
donde: $\Phi_k(w) = f(x_k + J_k w)$;
- (7) Si $\frac{ared}{pred} < \eta_1$ entonces hacer $\Delta_k := \gamma_1 \Delta_k$; retornar a 5;
- (8) Si $\eta_1 \leq \frac{ared}{pred}$ entonces
 1. $x_{k+1} := x_k + J_k w$;

2. Si $\frac{\text{ared}}{\text{pred}} > \eta_2$ entonces $\Delta_k := \gamma_2 \Delta_k$;

3. $\Delta_{k+1} := \Delta_k$; $k := k + 1$;

(9) Ir a 3;

fin.

Hay formas de actualizar el valor de Δ en el paso (7) y el paso (8.2) que hacen mejor el uso de la información disponible en la iteración x_k . Por ejemplo, el polinomio cúbico que ajusta $\Phi(\alpha) = \Phi_k(\alpha w_k)$ mediante la interpolación de $\Phi(0)$, $\Phi'(0)$, $\Phi''(0)$ y $\Phi(1)$ tiene un mínimo $\hat{\alpha}$ en $(0, 1)$ cuando pasa la prueba en el paso 7. La región se contrajo estableciendo $\gamma_1 = \hat{\alpha}$, si $\hat{\alpha}$ no está "demasiado cerca" de 0 ó 1. Aparecen detalles de este tipo de idea en [5], [6], [10], [18]. Otras variaciones que implican el paso 7 incluyen la

aceptación del minimizar si $0 < \eta_0 \leq \frac{\text{ared}}{\text{pred}} \leq \eta_1$ pero reduciendo la región de confianza.

El análisis que vamos a realizar para el algoritmo 4.2.1 se puede adaptar a cubrir estas posibilidades de una manera bastante sencilla. La iteración está bien definida debido al paso 7 que va a producir un entorno suficientemente pequeño Δ_k para obtener $\frac{\text{ared}}{\text{pred}} > \eta_1$ después de un número finito de pasos, desde la función cuadrática $\psi_k(w)$ que se define por los tres primeros términos de la serie de Taylor de $\Phi_k(w)$. Nuestra estrategia es ligeramente diferente a la descripción clásica en el cual x_{k+1} es siempre diferente de x_k . De esta manera se evita distinguir entre "éxito" y "no-éxito" en el análisis. Con esta excepción, la explicación del algoritmo y el análisis que sigue están en el espíritu del documento presentado por Powell [28].

4.3 CONVERGENCIA DE LA ITERACIÓN DE NEWTON MODIFICADO:

En esta sección establecemos algunas propiedades muy fuertes de convergencia que posee el algoritmo 4.2.1. El primer resultado es una ligera modificación del resultado de Powell en [27]. Nuestra prueba es mucho más simple debido al hecho de que la información de segundo orden es explícitamente disponible. A lo largo del análisis la notación para un conjunto de nivel de f es:

$$L(z) = \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leq f(z)\}.$$

TEOREMA 4.3.1: Sea $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ acotada inferiormente y sea $G(x) = \nabla^2 f(x)$ continua y satisface $\|G(x)\| \leq \beta$ para todo $x \in L(x_0)$. Sea $\{x_k\} \subset \mathbb{R}^n$ una sucesión producida por el Algoritmo 4.2.1 aplicada a f dado un valor inicial x_0 . Supongamos $\|J_k\|, \|J_k^{-1}\| \leq \sigma$, $k = 0, 1, 2, \dots$ para algún $\sigma \geq 1$. Entonces no hay una constante $\varepsilon > 0$ tal que $\|\nabla f(x)\| \geq \varepsilon$ para todo k .

Prueba:

Supongamos que existe un $\varepsilon > 0$ tal que $\|\nabla f(x)\| \geq \varepsilon$ para todo k . Donde $g_k = J_k^t \nabla f(x)$, tenemos:

$$\|g_k\| \geq \frac{\|\nabla f(x)\|}{\|J_k^{-1}\|} \geq \frac{\varepsilon}{\sigma} = \gamma > 0.$$

A partir del paso 8 del Algoritmo 4.2.1 y del Lema 4.1.3 tenemos:

$$f_k - f_{k+1} \geq \eta_1 (f_k - \psi_k(w_k)) \geq \frac{\eta_1}{2} \|g_k\| \min\left(\Delta_k, \frac{\|g_k\|}{\|B_k\|}\right), \quad (4.17)$$

donde $\|B_k\| = \|J_k^t G_k J_k\| \leq \beta \sigma^2$. Dado que f es acotada inferiormente y $f_{k+1} < f_k$, $k=0, 1, 2, \dots$, tenemos $f_k - f_{k+1} \rightarrow 0$. Donde:

$$\frac{\|g_k\|}{\|B_k\|} \geq \frac{\gamma}{\beta \sigma^2}, \text{ y se deduce que } \Delta_k \rightarrow 0, \text{ de (4.17).}$$

Sin embargo,

$$\Delta_k \geq \frac{\|g_k\|}{\beta \sigma^2 + \lambda^{(k)}} \quad (4.18)$$

es obtenido a partir de la desigualdad:

$$\|g_k\| = \|(B_k + \lambda^{(k)} I) w_k\| \leq \|w_k\| (\|B_k\| + \lambda^{(k)}),$$

donde $\lambda^{(k)}$ es un multiplicador asociado con la solución del paso 5 del Algoritmo 4.2.1

Así, la desigualdad (4.18) muestra que $\lambda^{(k)} \rightarrow \infty$. Ahora del teorema de Taylor y el Lema 4.1.1 se deduce fácilmente (para k suficientemente grande) que:

$$\begin{aligned} \left| \frac{\text{ared}(k)}{\text{pred}(k)} - 1 \right| &= \left| \frac{\Phi_k(0) - \Phi_k(w_k)}{\Phi_k(0) - \Psi_k(w_k)} - 1 \right| = \left| \frac{f(x_k) - f(x_k + J_k w_k)}{f(x_k) - \left[f(x_k) + g_k^t w_k + \frac{1}{2} w_k^t B_k w_k \right]} - 1 \right| \\ &= \left| \frac{\Psi_k(w_k) - \Phi_k(w_k)}{-g_k^t w_k - \frac{1}{2} w_k^t B_k w_k} \right| = \left| \frac{\Psi_k(w_k) - \Phi_k(w_k)}{w_k^t (B_k + \lambda^{(k)} I) w_k - \frac{1}{2} w_k^t B_k w_k} \right| \\ &= \left| \frac{\Psi_k(w_k) - \Phi_k(w_k)}{w_k^t B_k w_k + w_k^t \lambda^{(k)} w_k - \frac{1}{2} w_k^t B_k w_k} \right| \\ &= \left| \frac{\Psi_k(w_k) - \Phi_k(w_k)}{\frac{1}{2} w_k^t \lambda^{(k)} w_k + \left(\frac{1}{2} w_k^t \lambda^{(k)} w_k + \frac{1}{2} w_k^t B_k w_k \right)} \right| \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= 2 \left| \frac{\psi_k(w_k) - \Phi_k(w_k)}{w_k^t \lambda^{(k)} w_k + (w_k^t (B_k + \lambda^{(k)} I) w_k)} \right| \\
&\leq 2 \left| \frac{w_k^t \int_0^1 (B_k(\theta) - B_k) (1-\theta) d\theta w_k}{w_k^t \lambda^{(k)} w_k + w_k^t \lambda^{(k)} w_k} \right| \\
&\leq \frac{1}{\lambda^{(k)}} \sup_{0 \leq \theta \leq 1} \|B_k(\theta) - B_k\|, \tag{4.19}
\end{aligned}$$

donde $[\psi_k(w_k) - \Phi_k(w_k)]$ es la perturbación de la serie de Taylor, $B_k(\theta) = J_k^t [G(x_k + \theta s_k)] J_k$ con $s_k = x_{k+1} - x_k$, dado $\lambda^{(k)} \rightarrow \infty$, obtenemos $\text{ared}(k)/\text{pred}(k) \rightarrow 1$, y por lo tanto, la prueba en el paso 8 del Algoritmo 4.2.1 para todos los k suficientemente grande implica la existencia de un $K > 0$ tal que $\Delta_k \geq \Delta_K$ para todo $k \geq K$. Por lo tanto, la hipótesis $\|\nabla f(x)\| \geq \varepsilon$ para todo k ha llevado a una contradicción. ■

Se insiste que la continuidad de $G(x)$ sólo se usa para obtener el numerador en el lado derecho de (4.19), y que el teorema también se puede establecer sin esta suposición. Este resultado ha demostrado que al menos una subsucesion de $\{x_k\}$ converge a algún punto crítico de f . El siguiente teorema, establece un hecho más fuerte, de que cualquier punto de acumulación de la sucesión $\{x_k\}$ es un punto crítico de f .

TEOREMA 4.3.2: Dada la hipótesis del Teorema 4.3.1. válida, entonces $\lim_{k \rightarrow \infty} \|\nabla f(x)\| = 0$.

Prueba:

Supongamos que hay una subsucesión $\{x_{k_j}\} \subset \{x_k\}$ tal que $\|\nabla f(x)\| \geq \varepsilon > 0$, para todo $j = 1, 2, \dots$. Debido al Teorema 4.3.1, implicamos que $\|g_{k_j}\| \geq \gamma > 0$. Además podemos seleccionar un entero l_j correspondiente a cada j tal que:

$$l_j = \max \left\{ l \in \left[k_j, k_{j+1} : \|g_l\| \geq \frac{\gamma}{2\sigma^2}, k_j \leq l \leq k_{j+1} \right] \right\}. \quad (4.20)$$

De la desigualdad (4.17) se obtiene que:

$$f_l - f_{l+1} \geq \frac{\eta_1 \gamma}{4\sigma^2} \min \left(\Delta_l, \frac{\gamma}{2\beta\sigma^4} \right) \quad (4.21)$$

para todo $k_j \leq l \leq l_j$, $j = 1, 2, \dots$. A partir de (4.21) se deduce que

$$f_{k_j} - f_{l_{j+1}} = \sum_{l=k_j}^{l_j} f_l - f_{l-1} \geq \frac{\eta_1 \gamma}{4\sigma^2} \min \left(\sum_{l=k_j}^{l_j} \Delta_l, \frac{\gamma}{2\beta\sigma^4} \right). \quad (4.22)$$

De la desigualdad (4.22) se deduce que:

$$\|x_{k_j} - x_{l_{j+1}}\| \rightarrow 0 \text{ cuando } j \rightarrow \infty,$$

porque

$$\|x_{k_j} - x_{l_{j+1}}\| \leq \sum_{l=k_j}^{l_j} \|s_l\| \leq \sigma \sum_{l=k_j}^{l_j} \Delta_l, \quad (4.23)$$

y el lado derecho de (4.23) se tiende a cero debido a (4.22). La continuidad de $G(\cdot)$ implica la continuidad uniforme de $\nabla f(x)$ en $L(x_0)$, y se deduce que:

$$\|\nabla f(x_{k_j}) - \nabla f(x_{l_{j+1}})\| < \frac{\gamma}{4\sigma}$$

para todo j suficientemente grande. Por lo tanto,

$$\begin{aligned} \|g_{k_j}\| &\leq \sigma \|\nabla f(x_{k_j})\| \leq \sigma \left(\|\nabla f(x_{k_j}) - \nabla f(x_{l_{j+1}})\| + \|\nabla f(x_{l_{j+1}})\| \right) \\ &\leq \sigma \left(\frac{\gamma}{4\sigma} + \sigma \|g_{l_{j+1}}\| \right) \leq \sigma \left(\frac{\gamma}{4\sigma} + \frac{\gamma}{2\sigma} \right) \leq \frac{3\gamma}{4} < \gamma, \end{aligned}$$

para todo j suficientemente grande. La suposición de que $\|\nabla f(x)\| \geq \varepsilon > 0$ ha dado lugar a una contradicción y debemos concluir que $\lim_{k \rightarrow \infty} \|\nabla f(x)\| = 0$. ■

Este resultado ha establecido que todos los puntos límite de la sucesión $\{k_k\}$ satisface la condición necesaria de primer orden para un mínimo. Ahora vamos a probar los resultados que dan una justificación para el uso de la información de segundo orden cuando esté disponible. Varios autores [11], [20], [22], [23] han propuesto el método de Newton modificado que garantiza la convergencia a un punto crítico x^* con la característica adicional de que la Hessiana $G(x^*)$ sea semidefinida positiva. Por lo tanto cumple la condición necesaria de segundo orden para un mínimo en x^* . Los siguientes resultados muestran que el Algoritmo 4.2.1 comparte esta propiedad.

LEMA 4.3.3: Dada la hipótesis del teorema 4.3.1 válida. Si $G(x)$ es uniformemente continua en $L(x_0)$, entonces no hay un número positivo $\lambda > 0$ tal que $\lambda^{(k)} \geq \lambda$ para $k \geq k_0$.

Prueba:

Si $\lambda^{(k)} \geq \lambda$, entonces $\|w_k\| = \Delta_k$, debido al Lema 4.1.1, concluimos de la desigualdad (4.19) que:

$$\left| \frac{\text{ared}(k)}{\text{pred}(k)} - 1 \right| \leq \frac{1}{\lambda^{(k)}} \sup_{0 \leq \theta \leq 1} \|B_k(\theta) - B_k\|,$$

donde $B_k(\theta) = J_k^t [G(x_k + \theta s_k)] J_k$, dado que:

$$\begin{aligned} \text{pred}(k) &= \Phi_k(0) - \psi_k(w_k) = -g_k^t w_k - \frac{1}{2} w_k^t B_k w_k \\ &= w_k^t (B_k + \lambda^{(k)} I) w_k - \frac{1}{2} w_k^t B_k w_k = \frac{1}{2} w_k^t B_k w_k + \lambda^{(k)} w_k \cdot w_k \quad \dots (4.24) \end{aligned}$$

$$\text{pred}(k) \geq \lambda^{(k)} w_k \cdot w_k \geq \lambda^{(k)} \Delta_k^2 \geq \lambda \Delta_k^2,$$

se deduce que $\Delta_k \rightarrow 0$ porque $\text{pred}(k) \rightarrow 0$. Ahora las acotaciones de $\|J_k\|, \|J_k^{-1}\|$, junto con la continuidad uniforme de $G(x)$ en $L(x_0)$ se obtiene:

$$\begin{aligned} \left| \frac{\text{ared}(k)}{\text{pred}(k)} - 1 \right| &\leq \frac{1}{\lambda^{(k)}} \sup_{0 \leq \theta \leq 1} \|B_k(\theta) - B_k\| = \frac{1}{\lambda} \|B_k(\theta_0) - B_k\|, \\ &= \frac{1}{\lambda} \|J_k^t [G(x_k + \theta_0 s_k)] J_k - J_k^t G_k(x_k) J_k\| \leq \frac{1}{\lambda} \|J_k^t [G(x_k + \theta_0 s_k) - G_k(x_k)] J_k\| \\ &\leq \frac{1}{\lambda} \|J_k^t\| \|G(x_k + \theta_0 s_k) - G_k(x_k)\| \|J_k\| \leq \frac{1}{\lambda} \sigma^2 \|G(x_k + \theta_0 s_k) - G_k(x_k)\| \\ &\leq \frac{1}{\lambda} \sigma^2 \|\varepsilon_0\| \rightarrow 0, \end{aligned}$$

Por lo tanto:

$$\frac{\text{ared}(k)}{\text{pred}(k)} \rightarrow 1 \quad \text{cuando } k \rightarrow +\infty.$$

Debemos concluir, como en la demostración del Teorema 4.3.1, que existe una $K > 0$ tal que $\Delta_k \geq \Delta_K$ para algún $K > 0$. Esta contradicción establece el resultado. ■

TEOREMA 4.3.4: Suponiendo válida la hipótesis del teorema 4.3.1, además asumimos que $L(x_0)$ es limitado y de que existe un número finito de puntos críticos de f en $L(x_0)$. Si x^* es cualquier punto límite de la sucesión $\{x_k\}$ entonces $\nabla f(x^*) = 0$ y $G(x^*)$ es semidefinida positiva.

Prueba:

- Por hipótesis x^* es un punto límite de la sucesión $\{x_k\}$ entonces por el teorema 4.3.2 :

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|\nabla f(x_k)\| = 0. \quad \dots(1)$$

y por la continuidad de la norma :

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|\nabla f(x_k)\| = \|\lim_{k \rightarrow \infty} \nabla f(x_k)\| = \|\nabla f(x^*)\| \quad \dots(2)$$

De (1) y (2) tenemos:

$$\|\nabla f(x^*)\| = 0 \Leftrightarrow \nabla f(x^*) = 0.$$

- Probemos ahora que $G(x^*)$ es semidefinida positiva. En efecto:

Sea x^* un punto límite de $\{x_k\} \Rightarrow$ sea x_{k_j} una subsucesion entonces $x_{k_j} \rightarrow x^*$.

sea $\{x_{k_{j+1}}\}$ otra subsucesión tal que $x_{k_{j+1}} \rightarrow z^*$, $j \rightarrow \infty$ con $s^* = z^* - x^* \neq 0$.

Debido al paso 5 del algoritmo 4.2.1 se obtiene la sucesión $\lambda^{(k_j)}$ que converge, donde los $\lambda^{(k_j)} \rightarrow \infty$ no puede ser cierto pues lleva a una contradicción y debido al lema 4.3.3 $\lambda^{(k_j)} \rightarrow 0$ para cada k . Además del paso 8 del algoritmo 4.2.1 y (4.24):

$$\text{ared}(k) \geq \eta_1 \text{pred}(k) = \frac{\eta_1}{2} \left[w_k^t (B_k + \lambda^{(k)} I) w_k + \lambda^{(k)} \|w_k\|^2 \right],$$

La desigualdad anterior muestra que cuando $k \rightarrow \infty$ se cumple $\lambda^{(k_j)} \rightarrow 0$ entonces $B_{k_j} + \lambda^{(k_j)} I \rightarrow B^*$, donde $J^{*t} G(x^*) J^* = B^*$ y como $B_{k_j} + \lambda^{(k_j)} I$ es definida positiva entonces B^* es semidefinida positiva, luego como $J^{*t} G(x^*) J^* = B^*$

entonces $G(x^*)$ es semidefinida positiva por poseer el mismo conjunto de inercia.

- Probemos ahora que $G(x^*)$ es singular. En efecto:

Por tener dos soluciones en el gradiente y tomando en cuenta la discusión que se realizó de la pseudo inversa luego del Lema 4.1.2 entonces B^* debe ser una matriz singular, es decir:

$$0 = w^{*t} B^* w^* = w^{*t} J^{*t} G(x^*) J^* w^* = s^{*t} G(x^*) s^*, \text{ donde } J^* w^* = s^* \neq 0.$$

Por lo tanto $s^{*t} G(x^*) s^* = 0 \Rightarrow G(x^*)$ es singular.

- Ahora, sea $x_1^* = x^*$ y $x_i^*, 2 \leq i \leq m$ un número finito de puntos límite de la sucesión $\{x_k\}$. Dado que existe un número finito de puntos críticos x_i^* y de ser la sucesión $\{x_k\}$ acotada, es posible hacer una partición disjunta tal que $A_i = \{x_{k(i,j)}\}$, para $1 \leq i \leq m$ tal que:

- (1) $x_{k(i,j)} \rightarrow x_i^*$
- (2) $k(i, j+1) > k(i, j)$, para $1 \leq i \leq m$;
- (3) $\{x_k\} = \bigcup_{i=1}^m A_i$;
- (4) $A_i \cap A_l = \emptyset$ para $i \neq l$.

Se define $X_i = \{j : x_{k(i,j)+1} \in A_i\}$, $2 \leq i \leq m$.

Los $x_{k(i,j)}$ son términos que pertenecen a A_1 y $x_{k(i,j)+1}$ también pertenecen a A_1 . Si X_i es un conjunto infinito entonces por la primera parte de la prueba es semidefinida positiva y singular. Por otro lado si cada X_i es finito entonces existe un N tal que $j > N$ implica que $x_{k(1,j)+1} \in A_1$. Por lo tanto, $x_{k(1,j+1)} = x_{k(1,j)+1}$. Y por una simple inducción $x_{k(1,j+l)} = x_{k(1,j)+l}$ para todos los enteros l positivos. Se prueba que $x_k \rightarrow x^*$, y que $G(x^*)$ es semidefinida

positiva por el lema 4.3.1. ■

Corolario 4.3.5: Supóngase la hipótesis del teorema 4.3.4 válida. Si x^* es un punto límite de $\{x_k\}$ y $G(x^*)$ es definida positiva entonces toda la sucesión $\{x_k\}$ converge a x^* .

Prueba:

La prueba del teorema 4.3.4 muestra que si existe más de un punto límite de la sucesión $\{x_k\}$ entonces $G(x^*)$ debe ser singular. ■

Sería más deseable obtener un resultado que asegure la convergencia de la sucesión $\{x_k\}$ sin asumir una subsucesión convergente a un mínimo local fuerte. Sin embargo, sólo se extiende este argumento para el caso de un mínimo local aislado con la Hessiana singular que sería difícil de calcular, ya que no puede realizar el paso de Newton. El resultado final muestra, junto con el corolario 4.3.5, que si hay una subsucesión que converge a un mínimo local fuerte, entonces la secuencia converge, y en última instancia, la convergencia es cuadrática.

TEOREMA 4.3.6: De la hipótesis del teorema 4.3.1 válida y considerando además, que $x_k \rightarrow x^*$ con $G(x^*)$ definida positiva y

$$\|G(x) - G(x^*)\| \leq L \|x - x^*\| \quad (4.25)$$

para todo x en alguna vecindad de x^* . Entonces, hay una constante $\mathcal{H} > 0$ tal que:

$$\|x_{k+1} - x^*\| \leq \mathcal{H} \|x_k - x^*\|^2,$$

para todo k suficientemente grande.

Prueba:

Como $x_k \rightarrow x^*$ y $G(x^*)$ es definida positiva, entonces $G(x^*)$ es no singular y por lo tanto $G(x_k)^{-1}$ existe, por la continuidad de la norma se cumple:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|G(x_k)^{-1}\| = \|G^{-1}(\lim_{k \rightarrow \infty} x_k)\| = \|G(x^*)^{-1}\|.$$

Entonces por ser una sucesión convergente se cumple que es acotada. Luego para k suficientemente grande se tiene:

$$\beta_1 \leq \|G(x_k)^{-1}\| \leq \beta_2.$$

Donde β_1, β_2 constantes positivas. Así:

$$\begin{aligned} |\text{pred}(k)| &\leq s_k^t G(x_k) s_k \leq |s_k^t G(x_k) s_k| \leq \frac{|s_k^t G(x_k) \cdot G^{-1}(x_k) s_k|}{\|G^{-1}(x_k)\|} \\ &\leq \frac{\|s_k^t\| \|G(x_k) \cdot G^{-1}(x_k)\| \|s_k\|}{\|G^{-1}(x_k)\|} \leq \|s_k\|^2 / \beta_1, \end{aligned} \quad (4.26)$$

y por (4.19)

$$|\text{ared}(k) - \text{pred}(k)| \leq \|s_k\|^2 \int_0^1 \|G_k(\theta) - G_k\| (1-\theta) d\theta,$$

donde $G_k(\theta) = G(x_k + \theta s_k)$ con $s_k = x_{k+1} - x_k$.

$$\begin{aligned} |\text{ared}(k) - \text{pred}(k)| &\leq \|s_k\|^2 \int_0^1 \|G(x_k + \theta s_k) - G(x^*) + G(x^*) - G_k\| (1-\theta) d\theta \\ &\leq \|s_k\|^2 \int_0^1 \|G(x_k + \theta s_k) - G(x^*)\| + \|G(x^*) - G_k\| (1-\theta) d\theta \\ &\leq \|s_k\|^2 \int_0^1 (L \|x_k + \theta s_k - x^*\| + L \|x_k - x^*\|) (1-\theta) d\theta, \end{aligned}$$

De ello se deduce fácilmente a partir de (4.25) y (4.26) que

$$\left| \frac{\text{ared}(k)}{\text{pred}(k)} - 1 \right| \rightarrow 0 \quad \text{para } k \rightarrow \infty,$$

y concluimos que hay algún $K > 0$ tal que $\Delta_k \geq \Delta_K$ para todo $k \geq K$.

Desde $x_k \rightarrow x^*$ con $\nabla f(x^*) = 0$, se deduce que $\|G(x_k)^{-1} \nabla f(x)\| < \sigma \Delta_k$, por lo que el paso de Newton es aceptada para todos los k suficientemente grande. Por lo tanto la sucesión $\{x_k\}$ generada por el método es en realidad generada por el método de Newton clásico y como $G(x^*)$ es definida positiva [25], entonces $\{x_k\}$ converge cuadráticamente a x^* . ■

Mientras que estos resultados validan un poco el significado computacional en presencia de error de redondeo, estos establecen resultados fuertes sobre la iteración. Esto concuerda con la parte intuitiva del método. Nuestro objetivo principal en esta sección ha sido el establecimiento de estos resultados teóricos en un marco suficientemente general para abarcar muchas implementaciones posibles.

MATERIALES Y MÉTODOS

Para la realización del trabajo de tesis se reviso y recopilo gran cantidad de bibliografía relacionada con el Método de Newton, Modelo de Región de Confianza, Minimización de Cuadráticas, destacando los artículos mencionados en las revisión de la bibliografía, además se hizo la búsqueda en internet con el fin de hallar lemas o teoremas que apoyen en las demostraciones relacionadas con la investigación, donde se utilizó discos compactos, y USB para guardar la información encontrada.

Para la elaboración y digitación de la tesis se utilizó el procesador de texto Microsoft Word 2007.

Terminada la digitación se entregó un ejemplar al profesor asesor para las correcciones y sugerencias, errores de redacción, correcciones de ortografía y para que realice las correcciones de fondo y forma.

Para presentar los resultados de la tesis se entregó 4 ejemplares para lo cual se necesito el siguiente material: hojas bond, cartuchos de impresora, material de anillado y thoner.

RESULTADOS

En este trabajo se ha presentado la teoría de optimización de cuadráticas y la teoría de modelos de región de confianza, para poder proponer el método de Newton modificado que resuelve el problema de minimización de funciones.

Los principales resultados son:

- Un algoritmo bajo el esquema Newton utilizando región de confianza para minimizar cuadráticas.
- Se caracteriza la solución de una cuadrática con restricciones.
- Se construye una solución del problema (4.1) a partir de una solución del problema (4.12).
- Se prueba que el punto de acumulación satisface la condición de segundo orden.

DISCUSION

Podemos notar que en la fórmula que se tiene para calcular "p" la solución del problema (4.1) aparece la pseudo inversa debido a que se presenta la siguiente dificultad:

- Cuando $g \in S_1^\perp$ implica que λ escogido es el $\lambda = -\lambda_1$ y esto indica que la matriz $B + \lambda I$, es "próxima a ser" singular es decir es muy sensible, lo que implica a nivel computacional que a pequeñas perturbaciones en las cantidades B , g , λ nos pueden conducir a grandes perturbaciones en el cálculo de "p".

Aparentemente esta dificultad implicaría, la no unicidad del cálculo de "p" debido a la fórmula (4.13)

CONCLUSIONES

- El principal objetivo de esta investigación ha sido la discusión y análisis de la teoría de región de confianza para obtener una técnica de minimización para problemas sin restricciones.
- Para alcanzar dicho objetivo se ha desarrollado el marco teórico con suficiente generalidad para ser aplicado a un amplio espectro de problema cuadrático.
- Finalmente, espero que este trabajo de tesis sirva como referencia para futuros trabajos de investigación que se puedan realizar, ya que este es un tema sobre el cual hay mucho más que decir y que ha sido poco trabajado en las universidades del país.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] BAZARAA M., SHERALI H., SHETTY. *Nonlinear Programming. Theory and Algorithms*. John Wiley & Sons, 2ª edición, 1993.
- [2] J. V. BURKE, A sequential *Quadratic Programming method For Potentially Infeasible Mathematical Problems*, Journal of Mathematical Analysis and Applications 139, pp. 319 – 351 (1989).
- [3] CHÁVEZ VEGA, Carlos. *Algebra Lineal* – Publicación: Lima Moshera 2005. 361p.
- [4] I. I. DIKIN, *Iterative Solution of Problems of linear and Quadratic Programming*, Soviet Math, Dokl 8, pp. 674 – 675 (1967).
- [5] A. V. FIACCO AND G. P. MCCORMICK, *Nonlinear Programming: Sequential Unconstrained Minimization Techniques*, John Wiley, New York, 1968.
- [6] G. E. FORSYTHE AND G. H. GOLUB, *On the stationary values of a second-degree polynomial on the unit sphere*, J. Soc. Indust. Appl. Math., 13 (1965), pp. 1050-1068.
- [7] W. GANDER, *On the linear least squares problem with a quadratic constraint*, Dept. Comp Sci. Rept., STAN-CS-78-697, Stanford University, Stanford, CA, 1978.
- [8] D. M. GAY, *Computing optimal locally constrained steps*, MRC Rept. #2013, Mathematics Research Center, Univ. of Wisconsin, Madison, October 1979.
- [9] —, *On solving robust and generalized linear regressions problems*, MRC Rept. # 2000, Mathematics Research Center, Univ. of Wisconsin, Madison, September 1979.
- [10] P. E. GILL AND W. MURRAY, *Newton type methods for unconstrained and linearly constrained optimization*, Math. Prog., 7 (1974), pp. 311-350.
- [11] D. GOLDFARB, *Curvilinear path steplength algorithms for minimization which use directions of negative curvature*, Math. Prog., 18 (1980), pp. 31-40.
- [12] S. M. GOLDFELD, R. E. QUANDT AND H. F. TROTTER, *Maximization by quadratic hill-climbing*, Econometrica, 34 (1966), pp. 541-551.

- [13] GROSSMAN, STANLEY- *Algebra Lineal*, 6ta Edición Editorial Mc Graw Hill – 2008.
- [14] M. D. HEBDEN, *An algorithm for minimization using exact second derivatives*, Atomic Energy Research Establishment report TP515, Harwell, England, 1973.
- [15] IZMAILOV ALEXEY. *Optimizacao volumen 2. Métodos Computacionais*, Rio de Janeiro: IMPA 2007.
- [16] K. LEVENBERG, *A method for the solution of certain nonlinear problems in least squares*, Quart. Appl. Math., 2 (1944), pp. 164-168.
- [17] LUENBERGER, David. *Programación Lineal y No lineal*. Addison-Wesley 1989.
- [18] D. W. MARQUARDT, *An algorithm for least squares estimation of nonlinear parameters*, SIAM J. Appl. Math., 11 (1963), pp. 431-441.
- [19] J. M. MARTÍNEZ – S. A. SANTOS, *Métodos Computacionais de Otimização*, 20° Coloquio Brasileiro de Matemática, IMPA- (1995)
- [20] G. MCCORMICK, *A modification of Armijo's step-size rule for negative curvature*, Math. Prog., 13 (1977), pp.111-115.
- [21] J. J. MORE, *The Levenberg-Marquardt algorithm: implementation and theory*, Lecture Notes in Mathematics 630, G. A. Watson, ed., Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York, 1978, pp. 105-116.
- [22] J. J. MORE AND D. C. SORENSEN, *On the use of directions of negative curvature in a modified Newton method*, Math. Prog. 16 (1979), pp. 1-20.
- [23] H. MUKAI AND E. POLAK, *A second order method for unconstrained optimization*, J. Optim. Theory Appl., 26 (1978), pp. 501-513.
- [24] NIEVES H., Antonio. *Métodos Numéricos Aplicados a la Ingeniería* – Academia de Matemática Aplicada ESRIEIPN, México 1985.
- [25] J. M. ORTEGA AND W. C. RHEINBOLDT, *Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables*, Academic Press, New York, 1970.
- [26] J. F. PIERCE – W. B. CROWSTON, *Tree – Search Algorithms for quadratic assignment problems* , Naval Research Logistic Quarterly , Volumen 18, Isswe 1, pp. 1 – 36, Date March (1971).

[27] M. J. D. POWELL, *A hybrid method for nonlinear equations*, in Numerical Methods for Nonlinear Algebraic Equations, P. Rabinowitz, ed., Gordon and Breach, London, 1970, pp. 87-114.

[28] —, *Convergence properties of a class of minimization algorithms*, in Nonlinear Programming 2, O. L. Mangasarian, R. R. Meyer and S. M. Robinson, eds., Academic Press, New York, 1975.

[29] G. W. STEWART, *Introduction to Matrix Computations*, Academic Press, New York, 1973.

[30] S. W. THOMAS, *Sequential estimation techniques for quasi-Newton algorithms*, Ph.D. thesis, Department of Computer Science, Cornell University, Report TR75-227, January 1975.

APENDICES

1. CONDICIONES DE OPTIMALIDAD KKT

$$\begin{aligned} \min & f(x) \\ \text{s.a.} & \\ & g(x) \leq 0 \\ & h(x) = 0, \end{aligned}$$

La idea fundamental en el desarrollo de las condiciones KKT parte de la Lagrangiana, considerando que, si una restricción de desigualdad está activa en el óptimo, entonces puede tratarse como una de igualdad asignándosele un multiplicador de Lagrange μ , y si no está activa entonces puede ignorarse con lo que su multiplicador μ debe hacerse cero. De esta forma μ o g deben ser cero.

$$\begin{aligned} L(x, \lambda, \mu) &= f(x) + \sum_j \lambda_j h_j(x) + \sum_i u_i g_i(x) \\ \text{s.a.} \quad & u_i g_i(x) = 0 \end{aligned}$$

Por otra parte si aumentamos el lado derecho de $g(x) \leq 0$ la región factible aumenta y, por tanto, $f(x)$ puede tener un valor menor, de forma que la sensibilidad, medida por $-\mu$, debe ser negativa, o sea $\mu \geq 0$.

$$\begin{aligned} \nabla_x f(x) + \sum_j \lambda_j \nabla_x h_j(x) + \sum_i u_i \nabla_x g_i(x) &= 0 \\ g(x) &\leq 0 \\ h(x) &= 0 \\ u_i g_i(x) &= 0 \\ u_i &\geq 0 \end{aligned}$$

2. LEY DE INERCIA DE SYLVESTER:

Todas las matrices diagonales asociadas a una misma forma cuadrática real tiene el mismo número de elementos positivos, negativos y nulos.

Prueba:

Sean dos matrices diagonales congruentes con una misma matriz A , que expresaremos de la siguiente manera, siendo todos los α_j y β_j positivos:

$$D = \text{diag}(\alpha_1, \dots, \alpha_p, -\alpha_{p+1}, \dots, -\alpha_r, 0, \dots, 0) \quad D' = \text{diag}(\beta_1, \dots, \beta_q, -\beta_{q+1}, \dots, -\beta_r, 0, \dots, 0),$$

donde r representa el rango de A . Queremos demostrar que $p = q$.

Sean (u_1, \dots, u_n) y (v_1, \dots, v_n) las bases en las que la forma cuadrática de A se expresa, respectivamente, mediante D y D' . Tenemos que:

$$f(u_j) = \alpha_j > 0 \text{ para } j = 1, \dots, p; \quad f(u_j) = -\alpha_j < 0 \text{ para } j = p+1, \dots, r;$$

$$f(v_j) = \beta_j > 0 \text{ para } j = 1, \dots, q; \quad f(v_j) = -\beta_j < 0 \text{ para } j = q+1, \dots, r;$$

Consideramos los subespacios de \mathbb{R}^n

$$L = \mathcal{L}(u_1, \dots, u_p) \quad \text{y} \quad M = \mathcal{L}(v_{q+1}, \dots, v_n)$$

Para todo $x \in L \setminus \{0\}$, se verifica que $f(x) > 0$; para todo $x \in M$, se tiene que $f(x) \leq 0$; por tanto, el único elemento común a ambos es el 0, luego $L \cap M = \{0\}$ y, por consiguiente,

$$\dim(L \oplus M) = \dim L + \dim M = p + n - q.$$

Ahora bien, como esta dimensión no puede ser mayor que n , se deduce que $p - q = 0$, es decir, $p \leq q$. Intercambiando los papeles de D y D' , se deduce que $q \leq p$, y se concluye que $p = q$.

3. TEORIA DE POLOS Y CEROS

La función de transferencia proporciona una base para determinar respuestas importantes de un sistema sin solucionar su ecuación diferencial. Como sabemos, la función de transferencia es una función racional con variable compleja $s = \sigma + j\omega$, tal que:

$$H(s) = \frac{b_m s^m + b_{m-1} s^{m-1} + \dots + b_1 s + b_0}{a_n s^n + a_{n-1} s^{n-1} + \dots + a_1 s + a_0} \quad (1)$$

Es conveniente factorizar los polinomios en el numerador y el denominador, y escribir la función de transferencia en términos de aquellos factores:

$$H(s) = \frac{N(s)}{D(s)} = K = \frac{(s-z_1)(s-z_2)\dots(s-z_{m-1})(s-z_m)}{(s-p_1)(s-p_2)\dots(s-p_{n-1})(s-p_n)} \quad (2)$$

donde los polinomios del numerador y denominador, $N(s)$ y $D(s)$, tienen verdaderos coeficientes definidos por la ecuación diferencial del sistema y $K = b_m/a_n$. Como enunciamos en la ecuación (2) los z_i representan las raíces de la ecuación:

$$N(s) = 0, \quad (3)$$

y son definidos como los **ceros** del sistema, y los p_i son las raíces de la ecuación:

$$D(s) = 0, \quad (4)$$

y son definidos como los **polos** del sistema. En la ecuación (2) los factores en el numerador y el denominador son escritos de modo que cuando la $s = z_i$, el numerador $N(s) = 0$ y la función de transferencia desaparece, es decir:

$$\lim_{s \rightarrow z_i} H(s) = 0.$$

y de modo similar cuando la $s = p_i$, el denominador $D(s) = 0$ y el valor de la función de transferencia se hace ilimitada, es decir:

$$\lim_{s \rightarrow p_i} H(s) = \infty.$$

Todos los coeficientes de los polinomios $N(s)$ y $D(s)$ son reales, por lo tanto los polos y ceros deben ser reales, o aparecer en pares complejos conjugados.

4. EJEMPLO

- Sea la función:

$$f(x_1, x_2) = \frac{1}{2}(x_1 - 2x_2)^2 + x_1^4, \text{ donde } X = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2.$$

Halle el punto que minimiza a la función.

Solución:

Mediante el algoritmo 4.2.1, encontraremos el valor que minimiza la función f .

Paso (1)

Sea $k = 1$, y $0 < \eta_1 = 0,4 < \eta_2 = 0,7 < 1$; $0 < \gamma_1 = 0,5 < 1 < \gamma_2 = 1,2$ dados.

Paso (2)

Sea $X_1 = (2, 1)^t \in \mathbb{R}^2$, $\Delta_1 = 0,8 > 0$ dados. Ir al Paso (4)

Paso (3)

Si $|f(X_{k+1}) - f(X_k)| < 10^{-3}$ entonces PARAR.

Paso (4)

Evaluar:

$$f_1 := f(X_1) = 16; \nabla f(X_1) = (x_1 - 2x_2 + 4x_1^3; -2x_1 + 4x_2)$$

$$G_1 := \nabla^2 f(X_1) = \begin{pmatrix} 1 + 12x_1^2 & -2 \\ -2 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 49 & -2 \\ -2 & 4 \end{pmatrix};$$

Factorizar:

$$B_1 := J_1^t G_1 J_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0,041 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 49 & 0 \\ 0 & 3,9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0,041 \\ 0 & 1 \end{pmatrix};$$

$$\text{Evaluar } g_1 := J_1^t \nabla f(X_1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0,041 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 32 \\ 0 \end{pmatrix};$$

Paso (5)

Calcular una solución w_1 para el problema: $\min\{\psi_1(w_1) : \|w_1\| \leq \Delta_1\}$;

donde: $\psi_1(w_1) = f_1 + g_1^t w_1 + \frac{1}{2} w_1^t B_1 w_1$; tenemos:

$$\psi_1(w_1) = 16 + 32\omega_1 + 1,3\omega_2 + 24,5\omega_1^2 + 1,95\omega_2^2,$$

calculando $w_1 = (\omega_1, \omega_2)$;

$$\nabla \psi_1(w_1) = (32 + 49\omega_1; 1,3 + 3,9\omega_2) = (0, 0);$$

entonces $\omega_1 = -0,65$ y $\omega_2 = -0,3$

Paso (6)

Hacer $\text{ared} := \Phi_1(0) - \Phi_1(w_1) = 13,14$; $\text{pred} := \Phi_1(0) - \psi_1(w_1) = 10,66$;

donde: $\Phi_1(w_1) = f(X_1 + J_1 w_1) = 2,86$;

Paso (7)

Si $\frac{\text{ared}}{\text{pred}} < \eta_1$ entonces hacer $\Delta_1 := \gamma_1 \Delta_1$; ir a Paso (5), fin.

Paso (8)

Si $\eta_1 \leq \frac{\text{ared}}{\text{pred}}$ entonces:

1) $X_2 := X_1 + J_1 w_1 = (1,3; 0,7)^t$;

2) Si $\frac{\text{ared}}{\text{pred}} > \eta_2$ entonces $\Delta_1 := \gamma_2 \Delta_1$;

3) $\Delta_2 := \Delta_1 = 1,2$;

Paso (9)

Ir al Paso (3); y tenemos: $|f(X_2) - f(X_1)| = 13,14 < 10^{-3}$ (falso).

Fin.

Nuevamente:

Paso (1)

Sea $k = 2$, y $0 < \eta_1 = 0,4 < \eta_2 = 0,7 < 1$; $0 < \gamma_1 = 0,5 < 1 < \gamma_2 = 1,2$ dados.

Paso (2)

Sea $X_2 = (1,3; 0,7)^t \in \mathbb{R}^2$, $\Delta_2 = 1,2 > 0$ dados. Ir al Paso (4)

Paso (3)

Si $|f(X_{k+1}) - f(X_k)| < 10^{-3}$ entonces PARAR.

Paso (4)

Evaluar:

$$f_2 := f(X_2) = 2,86; \nabla f(X_2) = (x_1 - 2x_2 + 4x_1^3; -2x_1 + 4x_2)$$

$$G_2 := \nabla^2 f(X_2) = \begin{pmatrix} 1 + 12x_1^2 & -2 \\ -2 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 21,28 & -2 \\ -2 & 4 \end{pmatrix};$$

Factorizar :

$$B_2 := J_2^t G_2 J_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 2/21,28 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 21,28 & 0 \\ 0 & 3,8 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2/21,28 \\ 0 & 1 \end{pmatrix};$$

$$\text{Evaluar } g_2 := J_2^t \nabla f(X_2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 2/21,28 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 11,32 \\ 0,2 \end{pmatrix};$$

Paso (5)

Calcular una solución w_2 para el problema: $\min\{\psi_2(w_2) : \|w_2\| \leq \Delta_2\}$;

donde: $\psi_2(w_2) = f_2 + g_2^t w_2 + \frac{1}{2} w_2^t B_2 w_2$; tenemos :

$$\psi_2(w_2) = 2,86 + 11,32\omega_1 + 1,26\omega_2 + 10,64\omega_1^2 + 1,9\omega_2^2 ,$$

calculando $w_2 = (\omega_1, \omega_2)$;

$$\nabla \psi_2(w_2) = (11,32 + 21,28\omega_1; 1,26 + 3,8\omega_2) = (0,0);$$

entonces $\omega_1 = -0,53$ y $\omega_2 = -0,33$

Paso (6)

Hacer $\text{ared} := \Phi_2(0) - \Phi_2(w_2) = 2,56$; $\text{pred} := \Phi_2(0) - \psi_2(w_2) = 3,219$;

donde: $\Phi_2(w_2) = f(X_2 + J_2 w_2) = 0,29$;

Paso (7)

Si $\frac{\text{ared}}{\text{pred}} < \eta_1$ entonces hacer $\Delta_2 := \gamma_1 \Delta_2$; ir a (5), fin.

Paso (8)

Si $\eta_1 \leq \frac{\text{ared}}{\text{pred}}$ entonces :

1) $X_3 := X_2 + J_2 w_2 = (0,74; 0,37)^t$;

2) Si $\frac{\text{ared}}{\text{pred}} > \eta_2$ entonces $\Delta_2 := \gamma_2 \Delta_2$;

3) $\Delta_3 := \Delta_2 = 1,8$;

Paso (9)

Ir al Paso (3); y tenemos: $|f(X_3) - f(X_2)| = 2,57 < 10^{-3}$ (falso).

Fin.

Nuevamente:

Paso (1)

Sea $k = 3$, y $0 < \eta_1 = 0,4 < \eta_2 = 0,7 < 1$; $0 < \gamma_1 = 0,5 < 1 < \gamma_2 = 1,2$ dados.

Paso (2)

Sea $X_3 = (0,74; 0,37)^t \in \mathbb{R}^2$, $\Delta_3 = 1,8 > 0$ dados. Ir al Paso (4)

Paso (3)

Si $|f(X_{k+1}) - f(X_k)| < 10^{-3}$ entonces PARAR.

Paso (4)

Evaluar:

$$f_3 := f(X_3) = 0,29; \nabla f(X_3) = (x_1 - 2x_2 + 4x_1^3; -2x_1 + 4x_2)$$

$$G_3 := \nabla^2 f(X_3) = \begin{pmatrix} 1 + 12x_1^2 & -2 \\ -2 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7,57 & -2 \\ -2 & 4 \end{pmatrix};$$

Factorizar:

$$B_3 := J_3^t G_3 J_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 2/7,57 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 7,57 & 0 \\ 0 & 3,47 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2/7,57 \\ 0 & 1 \end{pmatrix};$$

$$\text{Evaluar } g_3 := J_3^t \nabla f(X_3) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 2/7,57 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1,62 \\ 0 \end{pmatrix};$$

Paso (5)

Calcular una solución w_3 para el problema: $\min\{\psi_3(w_3) : \|w_3\| \leq \Delta_3\}$;

donde: $\psi_3(w_3) = f_3 + g_3^t w_3 + \frac{1}{2} w_3^t B_3 w_3$; tenemos:

$$\psi_3(w_3) = 0,29 + 1,62\omega_1 + 0,42\omega_2 + 3,785\omega_1^2 + 1,735\omega_2^2,$$

calculando $w_3 = (\omega_1, \omega_2)$;

$$\nabla \psi_3(w_3) = (1,62 + 7,57\omega_1; 0,42 + 3,47\omega_2) = (0, 0);$$

entonces $\omega_1 = -0,21$ y $\omega_2 = -0,12$

Paso (6)

Hacer $\text{ared} := \Phi_3(0) - \Phi_3(w_3) = 0,232$; $\text{pred} := \Phi_3(0) - \psi_3(w_3) = 0,256$;

donde: $\Phi_3(w_3) = f(X_3 + J_3 w_3) = 0,0576$;

Paso (7)

Si $\frac{\text{ared}}{\text{pred}} < \eta_1$ entonces hacer $\Delta_3 := \gamma_1 \Delta_3$; ir a (5), fin.

Paso (8)

Si $\eta_1 \leq \frac{\text{ared}}{\text{pred}}$ entonces:

1) $X_4 := X_3 + J_3 w_3 = (0,49; 0,25)^t$;

2) Si $\frac{\text{ared}}{\text{pred}} > \eta_2$ entonces $\Delta_3 := \gamma_2 \Delta_3$;

3) $\Delta_4 := \Delta_3 = 2,7$;

Paso (9)

Ir al Paso (3); y tenemos: $|f(X_4) - f(X_3)| = 0,232 < 10^{-3}$ (falso).

Fin.

Si continuamos con la iteración encontraremos que el punto que resuelve el problema es (0,0).