UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO

FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA

INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN

"EL MÉTODO DE NEWTON Y SU APLICACIÓN EN LA SOLUCIÓN DE PROBLEMAS DE OPTIMIZACIÓN IRRESTRICTOS"

(INFORME FINAL)

AUTOR: LIC. DORIS MELÉNDEZ GIL

PROF. PARTICIPANTE: LIC. CESAR AUGUSTO AVILA CELIS

(Periodo de ejecución: Del 01 de octubre del 2012 al 30 de setiembre del 2014)

(Resolución Rectoral N° N°922-2012-R)

CALLAO – PERU

I. ÍNDICE

ABSTRACT

In the research work presented Newton's method, a method very useful for unconstrained minimization problems. The theoretical framework has been developed theory down methods with exact line search and line search backdown, analyzed the convergence of the gradient method as a typical case of top-down methods, which allows us to analyze the convergence of Newton's method.

In the course of this work it has been shown that the convergence of Newton's method is fast in general and quadratic when we are close to the optimum.

It was further shown that the method can be used to Newton optimization problems constraint equations by transforming the problem into a constrained.

II. RESUMEN

En el trabajo de investigación se ha presentado el método de Newton, un método de minimización muy útil para problemas irrestrictos. En el marco teórico se ha desarrollado la teoría de métodos descendentes con línea de búsqueda exacta y línea de búsqueda con retroceso, se ha analizado la convergencia del método Gradiente como un caso típico de métodos descendentes, que nos permite analizar la convergencia del método de Newton.

En el desarrollo de este trabajo se ha demostrado que la convergencia del método de Newton es rápida en general, y cuadrática cuando estamos cerca del punto óptimo.

Se ha mostrado además que el método de Newton se puede usar para problemas de optimización con ecuaciones restricción, transformando el problema en uno sin restricciones.

III INTRODUCCIÓN

2.1. Exposición del problema de investigación

En muchos problemas de aplicación en ciencias e ingeniería se requiere usar algún método de solución numérico, el cual hace uso de algún método para resolver un problema de programación descendente para ecuaciones irrestrictas, como por ejemplo, el método del gradiente y el método de Newton.

Uno de los aspectos importantes en la elaboración de algoritmos para solucionar problemas de optimización es la convergencia y la complejidad computacional del algoritmo. Que un algoritmo sea convergente significa que a través de la iteración propuesta, esta converge al óptimo del problema. La complejidad se refiere al costo computacional o el número de pasos que se requiere para llegar a la solución del problema.

El método del gradiente es relativamente sencillo, pero requiere de un gran costo computacional a diferencia del método de Newton el cual es más manejable computacionalmente.

2.2. Planteamiento del Problema

¿Qué condiciones deben cumplirse para que el método de Newton aplicado a un problema irrestricto sea convergente con un costo computacional adecuado?

2.3. Objetivos

2.3.1. Objetivo General

Establecer las condiciones que deben cumplirse para que un problema resuelto por el método de Newton sea convergente con un costo computacional adecuado.

2.3.2. Objetivos Específicos

i) Estudiar los métodos de programación descendentes.

ii) Establecer la convergencia del método de Newton aplicado a un programa de optimización irrestricto.

iii) Mostrar las bondades del método de newton en la solución de problemas irrestrictos y concluir su costo computacional adecuado.

2.4. Importancia y justificación de la investigación

El estudio de este tema es importante desde el punto de vista teórico porque nos permite conocer las propiedades del método de Newton y su aplicación a la optimización irrestricta. Desde el punto vista práctico nos permite demostrar la convergencia del método de

Newton y su complejidad polinomial; nos permite en suma corroborar la utilidad práctica de los conceptos y teorías matemáticas en las diferentes aplicaciones, especialmente en la optimización y el diseño de algoritmos.

III. MARCO TEÓRICO

3.1 Conceptos preliminares

3.1.1. Mínimo local

Sea $f: U \to R$ una función con valores reales definida sobre un conjunto abierto $U \subset R^n$, decimos que f posee un mínimo local en un punto $P \in U$ cuando existe una vecindad V de P tal que $f(P) \leq f(x)$, para todo $x \in V$

3.1.2. Función convexa

Una función $f: R^n \to R$ es convexa si su dominio es un conjunto convexo y si para $0 \leq t \leq 1$, $x, y \in domf$

$$f(tx + (1-t)y) \leq tf(x) + (1-t)f(y)$$

Geométricamente, esta desigualdad significa que la línea que une $(x, f(x), (y, f(y))$ está sobre la gráfica de f. La función se dice que es estrictamente convexa si la desigualdad en la definición es estricta. Además una función es convexa si y solo si es convexa en cualquier línea de su dominio. Es decir, si y solo sí la función $g(t) = f(x + tv)$ es convexa. Esta propiedad es muy útil, pues nos permite trabajar en R.

3.1.3. Condición de primer orden

Supongamos que f es diferenciable (es decir, ∇f existe en cada punto del dom$f$ que es un conjunto abierto), entonces, f es convexa si y solo si dom f es convexo y para todo

$x, y \in$ dom$f$

$$f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^T (y - x)$$

Esta desigualdad muestra que si $\nabla f(x) = 0$, x es un mínimo global de f.

3.1.4. Condiciones de segundo orden

Asumiendo que f es dos veces diferenciable, es decir, que su matriz Hessiana, o derivada de segundo orden existe, en cada punto de su dominio. Entonces, f es convexa si y solamente sí su dominio es convexo y su matriz Hessiana es semidefinida positiva, es decir

$$\nabla^2 f(x) \succcurlyeq 0$$

3.1.5. Matriz definida positiva

Decimos que una matriz P es definida positiva si sus eigen valores son positivos.

Denotamos al conjunto de matrices cuadradas simétricas definidas positivas de orden n por S_+^n.

3.1.6. Función Lipschitziana

Decimos que f es Lipschitz continua sobre su dominio con constante L, si

$$|f(x) - f(y)| \leq L\|x - y\|$$

3.2. Minimización Irrestricta

3.2.1. Problemas de minimización irrestricta

En este capítulo discutiremos métodos para resolver un problema de minimización irrestricta

$$\text{Minimice } f(x) \tag{1}$$

Donde $f: R^n \to R$ es convexa y dos veces continuamente diferenciable (lo cual implica que el dominio de f es abierto). Asumiremos que el problema es soluble, es decir, existe un punto optimal x^* . (Más precisamente, la última condición implicará que x^* existe y es único) Denotamos el valor optimal, $\inf_x f(x) = p^*$.

Como f es convexa y diferenciable, una condición necesaria y suficiente para optimalidad es que

$$\nabla f(x^*) = 0 \tag{2}$$

Resolver (1) es lo mismo que resolver (2) que es un conjunto de *n* ecuaciones con *n* variables $x_1, x_2, \cdots, x_n$. En unos pocos casos podemos resolver (2) analíticamente, pero usualmente el problema puede ser resuelto por un método iterativo, es decir un algoritmo que computa una sucesión de puntos $x^{(0)}, x^{(1)}, \cdots, \in dom\, f$, con

$$f\left(x^{(k)}\right) \to p^*, k \to \infty.$$

Tal sucesión de puntos es llamada una sucesión minimizante para el problema (1). El algoritmo termina cuando

$$f\left(x^{(k)}\right) - p^* \leq \epsilon, \text{ donde } \epsilon > 0$$

es alguna tolerancia especificada.

3.2.2. Punto inicial y conjunto subnivel

El método descrito requiere un apropiado punto de inicio $x^{(0)}$. El punto inicial debe estar en el dom f, y además el conjunto subnivel

$$S = \left\{x \in dom\, f: f(x) \leq f\left(x^{(0)}\right)\right\} \tag{3}$$

debería ser cerrado. Esta condición se cumple para todo $x^{(0)} \in dom\, f$ si la función f es cerrada, es decir todos sus subconjuntos subnivel son cerrados. Las funciones continuas con $dom\, f = R^n$ son cerradas, de modo que si $dom\, f = R^n$

la condición se satisface para cualquier $x^{(0)}$. Otra clase importante de funciones cerradas son funciones continuas con dominios abiertos, para los que $f(x)$ tiende al infinito cuando x se aproxima a la frontera del dom f.

Ejemplo1:

Minimización cuadrática y mínima raíz

Un problema de minimización cuadrática convexa tiene la forma

$$\text{Minimice } (1/2)x^T Px + q^T x + r \qquad (4)$$

Donde $P \in S_+^n, q \in R^n, r \in R$. Este problema puede ser resuelto vía la condición de optimalidad, $Px^* + q = 0$, que es un conjunto de ecuaciones lineales. Cuando $P \succ 0$, existe una solución única, $x^* = -P^{-1}q$. En los casos más generales, cuando P no es definida positiva, cualquier solución de $Px^* + q = 0$ es optimal para (4). Si $Px^* + q = 0$ no tiene solución, entonces el problema (4) es no acotado inferiormente. Nuestra forma para resolver analíticamente (4) es la base del método de Newton, un método potente para minimización irrestricta.

Un caso especial de minimización irrestricta que sucede muy frecuentemente es el problema cuadrado mínimo.

Minimice $\|Ax - b\|_2^2 = x^T(A^TA)x - 2(A^Tb)^Tx + b^Tb$

Las condiciones de optimalidad

$$A^TAx^* = A^Tb$$

son llamadas ecuaciones normales del problema.

Ejemplo 2.

Programación geométrica irrestricta

$$\text{Minimice } f(x) = \log\left(\sum_{i=1}^{m} \exp(a_i^Tx + b_i)\right)$$

La condición de optimalidad es

$$\nabla f(x^*) = \frac{1}{\sum_{j=1}^{m} \exp(a_i^Tx^* + b_i)} \sum_{i=1}^{m} \exp(a_i^Tx^* + b_i)a_i = 0$$

que en general no tiene solución analítica. Aquí es necesario un método iterativo. Para este problema dom $f = R^n$, de modo que cualquier punto puede ser escogido como punto de inicio $x^{(0)}$.

Ejemplo 3.

Centro analítico de desigualdades lineales

Dado el problema

$$\text{minimice } f(x) = -\sum_{i=1}^{m} \log(b_i - a_i^T x) \qquad (5)$$

donde el dominio de f es un conjunto abierto

$$dom\, f = \{x: a_i^T x < b_i; i = 1, \dots, m\}$$

La función objetivo f es llamada barrera logarítmica para las desigualdades $a_i^T x < b_i$. La solución de (5) si existe, es llamada el centro analítico de las desigualdades. El punto inicial $x^{(0)}$ debería satisfacer las desigualdades estrictas $a_i^T x < b_i, i = 1, \dots, m$. Desde que f es cerrada, los conjuntos subnivel S para cualquier punto es cerrado.

Ejemplo 4.

Centro analítico de una matriz de desigualdades lineales

Dado el problema

$$\text{minimice } f(x) = \log\det F^{-1}(x) \qquad (6)$$

Donde, $F: R^n \to S^P$ es afín, es decir

$$F(x) = F_0 + x_1 F_1 + \dots + x_n F_n$$

Donde, $F_i \in S^P, dom\, f = \{x: F(x) \succ 0\}$.

La función objetivo f es llamada barrera logarítmica para la desigualdad matricial lineal $F(x) \succcurlyeq 0$. La solución de (6) (si existe) se llama el centro analítico de la desigualdad matricial lineal. El punto inicial $x^{(0)}$ debería satisfacer la desigualdad matricial estricta $F(x) \succ 0$. Como en el ejemplo anterior, el conjunto subnivel de cualquier punto inicial será cerrado, desde que *f* es cerrada.

3.2.3. Convexidad fuerte e implicaciones

Asumiremos que la función objetivo es fuertemente convexa sobre S, es decir, existe un $m > 0$ tal que

$$\nabla^2 f(x) \succcurlyeq mI \tag{7}$$

Para todo $x \in S$. Convexidad fuerte tiene varias interesantes consecuencias. Para $x, y \in S$ se tiene.

$$f(y) = f(x) + \nabla f(x)^T (y - x) + \frac{1}{2}(y - x)^T \nabla^2 f(z)(y - x)$$

para algún z sobre el segmento $[x, y]$. Por (7) el último término sobre el lado derecho es menor que $(m/2)\|y - x\|_2^2$ de modo que tenemos la desigualdad

$$f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^T (y - x) + (m/2)\|y - x\|_2^2 \tag{8}$$

para todo $x, y \in S$. Cuando $m = 0$ se tiene la desigualdad básica que caracteriza la convexidad. Para $m > 0$ obtenemos una mejor cota inferior sobre $f(y)$ que se sigue de la convexidad únicamente.

Demostraremos que (8) puede ser usada para acotar $f(x) - p^*$, que es la suboptimalidad del punto x, en términos de $\|\nabla f(x)\|_2$. El lado derecho de (8) es una función cuadrática convexa de y (para x fijo). Haciendo el gradiente con respecto a y igual a cero, hallamos que:

$\breve{y} = x - \left(\frac{1}{m}\right) \nabla f(x)$ minimiza el lado derecho.

En efecto

$$G(y) = f(x) + \nabla f(x)^T (y - x) + (m/2)\|y - x\|_2^2$$

$$\nabla G(y) = \nabla f(x) + m(y - x)$$

$$\nabla G(y) = 0 \Rightarrow y = x - \frac{1}{m} \nabla f(x)$$

Por lo tanto se tiene

$$f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^T (y - x) + (m/2)\|y - x\|_2^2$$

$$\geq f(x) + \nabla f(x)^T (\breve{y} - x) + (m/2)\|\breve{y} - x\|_2^2$$

$$= f(x) - \frac{1}{2m} \|\nabla f(x)\|_2^2$$

Desde que esto se cumple para cualquier $y \in S$, se tiene

$$p^* \geq f(x) - \frac{1}{2m} \|\nabla f(x)\|_2^2 \tag{9}$$

Esta desigualdad demuestra que si el gradiente es pequeño en un punto, entonces el punto está cerca del optimal. La desigualdad (9) puede ser interpretado como una condición de suboptimalidad que generaliza la condición (2):

$$\|\nabla f(x)\|_2 \leq (2m\epsilon)^{1/2} \Rightarrow f(x) - p^* \leq \epsilon \tag{10}$$

Podemos tener una cota para $\|x - x^*\|_2$, la distancia entre x y cualquier punto optimal x^* en términos de $\|\nabla f(x)\|_2$:

$$\|x - x^*\|_2 \leq \frac{2}{m} \|\nabla f(x)\|_2 \tag{11}$$

Para ver esto, aplicamos (8) con $y = x^*$ para obtener

$$p^* = f(x^*) \geq f(x) + \nabla f(x)^T (x^* - x) + \frac{m}{2} \|x^* - x\|_2^2$$

$$\geq f(x) - \|\nabla f(x)\|_2 \|\mathrm{x}^* - \mathrm{x}\|_2 + \frac{m}{2} \|x^* - x\|_2^2$$

Donde usamos la desigualdad de Cauchy-Schwarz en la segunda desigualdad. Puesto que $p^* \leq f(x)$, tenemos

$$-\|\nabla f(x)\|_2 \|x^* - x\|_2 + \frac{m}{2} \|x^* - x\|_2^2 \leq 0$$

De la cual se tiene (11). Una consecuencia de (11) es que el punto optimal x^* es único.

3.2.4. Cota superior sobre $\nabla^2 f(x)$

La desigualdad (8) implica que los conjuntos subnivel contenidos en *S* son acotados, de modo que en particular, *S* es acotado. Por lo tanto el máximo eigenvalor de $\nabla^2 f(x)$, que es una función continua de *x* sobre S, es acotado superiormente sobre S, es decir, existe una constante *M* tal que

$$\nabla^2 f(x) \preccurlyeq MI \tag{12}$$

Para todo $x \in S$. La cota superior sobre la Hessiana implica, para cualquier $x, y \in S$

$$f(y) \leq f(x) + \nabla f(x)^T (y - x) + (M/2)\|y - x\|_2^2 \tag{13}$$

que es análogo a (8). Minimizando cada lado sobre *y* se tiene

$$p^* \leq f(x) - \frac{1}{2M}\|\nabla f(x)\|_2^2 \tag{14}$$

la contraparte de (9).

3.2.5. Número de condición de los conjuntos subnivel

De la desigualdad (7) y (12), tenemos

$$mI \preccurlyeq \nabla^2 f(x) \preccurlyeq MI\,, \qquad \forall\, x \in S \tag{15}$$

La razón $k = M/m$ es así una cota sobre el número de condición de la matriz $\nabla^2 f(x)$, es decir, la razón de su mayor eigen valor y su menor eigen valor. Podemos también dar una interpretación geométrica de (15) en términos de los conjuntos subnivel de *f*.

La anchura de un conjunto convexo $C \subset R^n$, en la dirección q unitario, se define por

$$W(C,q) = \sup_{z\in C} q^T z - \inf_{z\in C} q^T z$$

La mínima y máxima anchura de C están dadas por

$$W_{min} = \inf_{\|q\|_2=1} W(C,q), \qquad W_{max} = \sup_{\|q\|_2=1} W(C,q)$$

El número de condición del conjunto convexo C está definido

Por:

$$cond\ (C) = \frac{W_{max}^2}{W_{min}^2}$$

El número de condición de C da una medida de su excentricidad. Si el número de condición es pequeño (digamos, cerca de uno) el conjunto tiene la misma anchura en todas las direcciones, es decir, es casi una esfera. Si el número de condición es grande, significa que el conjunto es muy ancho en alguna dirección que en otras.

Ahora supongamos que f satisface:

$mI \preccurlyeq \nabla^2 f(x) \preccurlyeq MI$, $\forall\, x \in S$. Daremos una cota para el número de condición del α -conjunto subnivel $C_\alpha = \{x: f(x) \leq \alpha\}$, donde $p^* < \alpha \leq f\big(x^{(0)}\big)$. Aplicando (13) y (8) con $x = x^*$, tenemos

$$p^* + (M/2)\|y - x^*\|_2^2 \geq f(y) \geq p^* + (m/2)\|y - x^*\|_2^2$$

Esto implica que

$$B_{nter} \subseteq C_\alpha \subseteq B_{ext}$$

Donde

$$B_{inter} = \left\{y\colon \|y - x^*\|_2 \leq (2(\alpha - p^*)/M)^{1/2}\right\}$$

$$B_{ext} = \left\{y\colon \|y - x^*\|_2 \leq (2(\alpha - p^*)/m)^{1/2}\right\}$$

Son bolas con radios

$$(2(\alpha - p^*)/M)^{1/2},\ (2(\alpha - p^*)/m)^{1/2},$$

respectivamente, la razón del radio cuadrado da una cota sobre el número de condición de C_α:

$$\text{cond}\,(C_\alpha) \leq \frac{M}{m}$$

Podemos dar una interpretación geométrica del número de condición $k(\nabla^2 f(x^*))$. De la expansión de Taylor de f alrededor de x^*

$$f(y) \approx p^* + \frac{1}{2}(y - x^*)^T \nabla^2 f(x^*)(y - x^*)$$

Vemos que, para α cerca de p^*,

$$C_\alpha \approx \{y: (y - x^*)^T \nabla^2 f(x^*)(y - x^*) \leq 2(\alpha - p^*)\}$$

Es decir, el conjunto subnivel es aproximado por un elipsoide con centro x^*, por lo tanto

$$\lim_{\alpha \to p^*} \text{cond}\ (C_\alpha) = k(\nabla^2 f(x^*))$$

Vemos que el número de condición de los conjuntos subnivel de f (que es acotado por *M/m*) tiene un fuerte efecto sobre la eficiencia de algunos métodos comunes para minimización irrestricta.

3.2.6. Constantes de convexidad fuerte

Debemos mantener en mente que las constantes *M* y *m* se conocen solamente en casos raros, de modo que (10) no puede ser usado como un criterio práctico de parada. Este puede ser considerado como un criterio conceptual de parada; esto demuestra que si el gradiente de *f* en *x* es suficientemente pequeño, entonces la diferencia entre $f(x)$ y p^* es pequeño. Si terminamos un algoritmo cuando $\|\nabla f(x^{(k)})\|_2 \leq \mu$, cuando μ se escoge suficientemente pequeño menor que $(m\epsilon)^{1/2}$, tenemos que

$$f(x^{(k)}) - p^* \leq \epsilon.$$

Daremos pruebas de convergencia para algoritmos, que incluyen cotas sobre el número de iteraciones requeridas antes que $f(x^{(k)}) - p^* \leq \epsilon$, donde ϵ es alguna tolerancia positiva. Muchas de estas cotas incluyen las constantes *M* y *m*. Estos resultados son al menos conceptualmente útiles, ellos establecen que el algoritmo converge, aun si la cota sobre el número de iteraciones requerida depende de constantes que son desconocidas.

Existe una importante excepción a esta situación, hay una clase especial de funciones convexas, llamadas autoconcordantes, para las que podemos dar un análisis completo de convergencia (para el método de Newton) que no depende de ninguna constante desconocida.

3.2.7. Métodos descendentes

Los algoritmos descritos en este capítulo producen una sucesión minimizante $x^{(k)}$, $k = 1, \ldots,$ donde

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + t^{(k)}\Delta x^{(k)}$$

$t^{(k)} > 0$ (Excepto cuando $x^{(k)}$ es optimal). Δx es un vector en R^n llamado dirección de búsqueda o paso, $k = 0,1,\ldots$ denota el número de iteraciones. El escalar $t^{(k)} \geq 0$ es llamado el tamaño de paso o la longuitud de paso en la iteración *k* (aunque este no es igual a $\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|$ a menos que $\|\Delta x^{(k)}\| = 1$). Los términos "paso de búsqueda" y "factor escalar" son más exactos, pero "dirección de búsqueda" y "longitud de paso" son usadas más ampliamente.

Todos los métodos que estudiamos son métodos descendentes, que significa

$$f(x^{(k+1)}) < f(x^{(k)})$$

excepto cuando $x^{(k)}$ es optimal. Esto implica que para todo *k* tenemos que $x^{(k)} \in S$, el conjunto subnivel inicial, y en particular tenemos $x^{(k)} \in \operatorname{dom} f$. De la convexidad conocemos que $\nabla f(x^{(k)})^T (y - x^{(k)}) \geq 0$ implica que $f(y) \geq f(x^{(k)})$, de modo que la dirección de búsqueda en un método descendente debería satisfacer

$$\nabla f(x^{(k)})^T \Delta x^{(k)} < 0$$

Es decir, este forma un ángulo agudo con el gradiente negativo, llamamos a tal dirección una dirección descendente (para f en $x^{(k)}$).

La rutina de un método descendente general es como sigue. Este alterna entre dos pasos: determinar una dirección descendente Δx, y la selección de un tamaño de paso t.

3.2.8. Algoritmo de un método descendente general

Dado un punto de inicio $x \in \mathrm{dom}\, f$.

Repetir

1. Determine una dirección descendente Δx
2. Línea de búsqueda: Escoger un tamaño de paso $t > 0$.
3. Actualizar: $x := x + t\Delta x$

Hasta que el criterio de parada se satisfaga.

El segundo paso es llamado línea de búsqueda ya que la selección del tamaño de paso t determina a lo largo de la línea $\{x + t\Delta x : t \in R_+\}$ donde el siguiente iterado estará.

Un método descendente prácticamente tiene la misma estructura general, pero podría ser organizado de forma diferente.

Por ejemplo, el criterio de parada es a menudo chequeado mientras, o inmediatamente después, que la dirección descendente Δx es calculada. El criterio de parada es a menudo de la forma $\|\nabla f(x)\|_2 \leq \mu$, donde $\mu > 0$ como se sugiere en (9).

3.2.9. Línea de búsqueda exacta

Un método línea de búsqueda algunas veces usado en la práctica es la línea de búsqueda exacta en el que *t* se escoge para minimizar *f* a lo largo del rayo $\{x + t\Delta x : t \geq 0\}$:

$$t = \underset{s \geq 0}{\operatorname{argmin}} f(x + s\Delta x) \tag{16}$$

Una línea de búsqueda exacta es usada cuando el costo del problema de minimización con una variable, requerida en (16), es bajo comparado con el costo de computar la dirección de búsqueda misma. En algunos casos especiales el minimizador a lo largo del rayo puede ser hallado analíticamente, y en otros casos puede ser computado eficientemente.

3.2.10. Línea de búsqueda con retroceso

Muchas líneas de búsqueda usadas en la práctica son inexactas: la longitud de paso es escogida para aproximar *f* a lo largo del rayo $\{x + t\Delta x : t \geq 0\}$, o incluso solo para reducir f suficientemente. Muchos métodos de línea de búsqueda inexacta han sido propuestos.

Un método de línea de búsqueda inexacta que es muy simple y efectivo es llamado línea de búsqueda exacta con retroceso, esta depende de dos constantes

$$\alpha,\ \beta,\ 0 < \alpha < 0.5;\ 0 < \beta < 1.$$

3.2.11. Algoritmo línea de búsqueda con retroceso

Dada una dirección descendente Δx para f en $x \in dom\, f, \alpha \in (0{,}0.5), \beta \in (0{,}1)$.

$t := 1,$

Mientras $f(x + t\Delta x) > f(x) + \alpha t \nabla f(x)^T \Delta x,\ t := \beta t.$

La línea de búsqueda es llamada con retroceso porque esta comienza con un tamaño de paso unitario y entonces reduce este por el factor β hasta que la condición de parada $f(x + t\Delta x) \leq f(x) + \alpha t \nabla f(x)^T \Delta x$ se cumple.

Desde que Δx es una dirección descendente, tenemos $\nabla f(x)^T \Delta x < 0$, de modo que para t suficientemente pequeño tenemos

$$f(x + t\Delta x) \approx f(x) + t\nabla f(x)^T \Delta x < f(x) + \alpha t \nabla f(x)^T \Delta x$$

Lo que demuestra que la línea de búsqueda con retroceso eventualmente termina. La constante α puede ser interpretada como la fracción del decrecimiento en f predicho por extrapolación lineal que será aceptada.

3.3. Método descendente Gradiente

Una natural elección para la línea de búsqueda es el negativo del gradiente $\Delta x = -\nabla f(x)$. El algoritmo resultante es llamado el método descendente gradiente.

3.3.1. Algoritmo método descendente Gradiente

Dado un punto de inicio $x \in domf$

Repetir

1. $\Delta x = -\nabla f(x)$
2. Línea de búsqueda: Escoger un tamaño de paso t vía una línea de búsqueda exacta o con retroceso.
3. Actualizar: $x := x + t\Delta x$

Hasta que el criterio de parada se cumpla.

El criterio de parada es usualmente de la forma: $\|\nabla f(x)\|_2 \leq \mu$, donde μ es pequeño y positivo. En muchas implementaciones, esta condición es chequeda después del paso 1, en lugar de después de la actualización.

3.3.2. Análisis de convergencia

Aligeremos nuestra notación haciendo $x^+ = x + t\Delta x$ en lugar de $x^{(k+1)} = x^{(k)} + t^{(k)}\Delta x^{(k)}$, donde $\Delta x = -\nabla f(x)$. Asumiremos que f es fuertemente convexa sobre S, de modo que hay constantes m, M tal que

$$mI \preccurlyeq \nabla^2 f(x) \preccurlyeq MI, \text{ para todo } x \in S.$$

Definamos la función $\tilde{f}: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ por $\tilde{f}(t) = f(x - t\nabla f(x))$, en la siguiente discusión consideraremos t para los que $x - t\nabla f(x) \in S$. De la desigualdad (13), con $y = x - t\nabla f(x)$, obtenemos una cota superior cuadrática para $\tilde{f}$:

$$\tilde{f}(t) \leq f(x) - t\|\nabla f(x)\|_2^2 + \frac{Mt^2}{2}\|\nabla f(x)\|_2^2 \qquad (17)$$

A. Análisis para línea de búsqueda exacta

Asumiremos que una línea de búsqueda exacta es usada, y minimiza sobre t ambos lados de (17). Para el lado izquierdo tenemos $\tilde{f}(t_{ex})$ donde t_{ex} es la longitud del paso que minimiza $\tilde{f}$. El lado derecho es una cuadrática que es minimizada por $t = 1/M$, y tiene valor mínimo

$$f(x) - (\frac{1}{2M})\|\nabla f(x)\|_2^2$$

Por lo tanto tenemos

$$f(x^{+}) = \tilde{f}(t_{ex}) \leq f(x) - \frac{1}{2M}\|\nabla f(x)\|_2^2$$

Restando p^*en ambos lados, tenemos

$$f(x^{+}) - p^* \leq f(x) - p^* - \frac{1}{2M}\|\nabla f(x)\|_2^2$$

Combinando esto con $\|\nabla f(x)\|_2^2 \geq 2m(f(x) - p^*)$ concluimos que

$$f(x^{+}) - p^* \leq (1 - m/M)(f(x) - p^*)$$

Aplicando esta desigualdad recursivamente, hallamos que

$$f\left(x^{(k)}\right) - p^* \leq c^k\left(f\left(x^{(0)}\right) - p^*\right) \tag{18}$$

Donde $c = 1 - \frac{m}{M} < 1$, que demuestra que $f\left(x^{(k)}\right) \to p^*$ cuando $k \to \infty$.

En particular, deberíamos tener $f\left(x^{(k)}\right) - p^* \leq \epsilon$ después de no mas

$$\frac{\log\left(\left(f\left(x^{(0)}\right) - p^*\right)/\epsilon\right)}{\log\frac{1}{c}} \tag{19}$$

iteraciones del método gradiente con línea de búsqueda exacta.

Esta cota sobre el número de iteraciones requeridas, aunque cruda, puede dar alguna idea del método gradiente. El numerador puede ser interpretado como el log de la razón de la sub optimalidad inicial y la suboptimalidad final. Este término sugiere que el número de iteraciones depende de cuan bueno es el punto de inicio, y cuan exacta es la exactitud requerida.

El denominador en (19) es una función de M/m, que hemos visto es una cota sobre el número de condición de $\nabla^2 f(x)$ sobre S, o el número de condición de los conjuntos subnivel $\{z: f(z) \leq \alpha\}$. Para el número de condición grande M/m, tenemos

$$log\frac{1}{c} = -\log(1 - m/M) \approx m/M$$

Así, nuestra cota sobre el número de iteraciones requeridas se incrementa aproximadamente linealmente con incremento M/m.

Veremos que el método del gradiente en efecto requiere un número grande de iteraciones cuando la Hessiana de f, cerca de x^*, tiene un número de condición grande.

Recíprocamente, cuando los conjuntos subnivel de f son relativamente isotrópicos, de modo que el número de condición puede ser escogido relativamente pequeño, la cota en (18) muestra que la convergencia es rápida, desde que c es pequeña, o al menos no tan cerca de uno. La cota (18) muestra que el error $f(x^{(k)}) - p^*$ converge a cero al menos tan rápido como una serie geométrica. En el contexto de métodos numéricos iterativos, esta es llamada convergencia lineal, puesto que el error está bajo una recta o un gráfico log-lineal de error versus el número de iteraciones.

B. Análisis para línea de búsqueda con retroceso

Ahora consideramos el caso cuando se usa una línea de búsqueda con retroceso en el método descendente del Gradiente. Demostraremos que la condición de salida con retroceso

$$\tilde{f}(t) \leq f(x) - \alpha \|\nabla f(x)\|_2^2$$

Se satisface cuando $0 \leq t \leq 1/M$.

Primero note que

$$0 \leq t \leq \frac{1}{M} \Longrightarrow -t + \frac{Mt^2}{2} \leq -t/2$$

Que se sigue de la convexidad de $-t + \frac{Mt^2}{2}$. Usando este resultado y la cota (17) tenemos, para $-t + \frac{Mt^2}{2}$

$$\tilde{f}(t) \leq f(x) - t\|\nabla f(x)\|_2^2 + \frac{Mt^2}{2}\|\nabla f(x)\|_2^2$$

$$\leq f(x) - (\frac{t}{2})\|\nabla f(x)\|_2^2$$

$$\leq f(x) - \alpha t\|\nabla f(x)\|_2^2$$

puesto que $\alpha < 1/2$. Por lo tanto la línea de búsqueda con retroceso termina cuando $t = 1$ ó $t \geq \beta/M$. Esto nos da una cota inferior sobre el decrecimiento de la función objetivo. En el primer caso tenemos

$$f(x^+) \leq f(x) - \alpha\|\nabla f(x)\|_2^2$$

Y en el segundo caso se tiene

$$f(x^+) \leq f(x) - (\frac{\beta\alpha}{M})\|\nabla f(x)\|_2^2$$

Por lo tanto se tiene

$$f(x^+) \leq f(x) - \min\{\alpha, \beta\alpha/M\}\|\nabla f(x)\|_2^2$$

Ahora podemos proceder exactamente como en el caso de la línea de búsqueda exacta, restamos p^* en ambos lados para tener

$$f(x^+) - p^* \leq f(x) - p^* - \min\{\alpha, \beta\alpha/M\} \,\|\nabla f(x)\|_2^2$$

Y combinando esto con $\|\nabla f(x)\|_2^2 \geq 2m(f(x) - p^*)$ obtenemos:

$$f(x^+) - p^* \leq (1 - \min\{2m\alpha, 2\beta\alpha m/M\})(f(x) - p^*)$$

De esto se concluye que

$$f(x^+) - p^* \leq c^k\big(f\big(x^{(0)}\big) - p^*\big)$$

Donde $c = 1 - \min\{2m\alpha, 2\beta\alpha m/M\} < 1$

En particular, $f(x^{(k)})$ converge a p^* al menos tan rápido como una serie geométrica con un exponente que depende (al menos en parte) de la cota para el número de condición M/m. En la terminología de métodos iterativos, la convergencia es al menos lineal.

Ejemplo 6.

Un problema cuadrático en $\mathbb{R}^2$

Considere la función objetivo

$$f(x, y) = \frac{1}{2}(x^2 + by^2), \qquad b > 0$$

Calculemos la matriz Hessiana de f

$$Hf(x, y) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & b \end{bmatrix}$$

Claramente el punto optimal es (0,0) y el valor optimal es 0. La Hessiana de f es constante, y tiene eigen valores 1 y b, de modo que el número de condición de los conjuntos subnivel de f son exactamente

$$\frac{\max\{1,b\}}{\min\{1,b\}} = \max\{b, 1/b\}$$

La elección más ajustada para las constantes de convexidad fuerte m y M son

$$m = \min\{1,b\}, \qquad M = \max\{1,b\}$$

Aplicamos el método del gradiente descendente con línea de búsqueda exacta, comenzando en el punto $x^{(0)} = (b,1)$. En este caso tenemos las siguientes expresiones para los iterados

$$x^{(k)} = b\left(\frac{b-1}{b+1}\right)^k, \quad y^{(k)} = \left(-\frac{b-1}{b+1}\right)^k$$

$$f\left(x^{(k)}\right) = \frac{b(b+1)}{2}\left(\frac{b-1}{b+1}\right)^{2k} = \left(\frac{b-1}{b+1}\right)^{2k} f\left(x^{(0)}\right)$$

En este ejemplo, la convergencia es exactamente lineal, es decir, el error es exactamente una serie geométrica, reducida por un factor $|(b-1)/(b+1)|^2$ en cada iteración. Para $b = 1$ la solución exacta se halla en una iteración; para b no lejos de uno (digamos entre 1/3 y 3) la convergencia es rápida. La convergencia es muy baja para $b \gg 1$ó $b \ll 1$.

Podemos comparar la convergencia con la cota dada en (18) se garantiza que el error en cada iteración es reducida al menos por el factor $c = 1 - m/M$. Se ve que el error esta reducido por el factor

$$\left(\frac{1 - m/M}{1 + m/M}\right)^2$$

En cada iteración. Para m/M pequeño, que corresponde a un número de condición grande, la cota superior en (19) implica que el número de iteraciones requerida para obtener un nivel dado de exactitud de crecimiento al menos igual a M/m. Para este ejemplo, el número de iteraciones requerida crece aproximadamente igual a $(M/m)/4$.

Ejemplo 7.

Sea la función

$$f(x) = c^T x - \sum_{i=1}^{m} \log(b_i - a_i^T)$$

Con $m = 500$ términos y $n = 100$ variables.

El progreso del método gradiente con línea de búsqueda con retroceso, con parámetros $\alpha = 0.1$, $\beta = 0.5$. es aproximadamente lineal y convergencia bastante rápida para cerca de 20 iteraciones, seguida por una convergencia lineal baja. El error total está reducida por un factor de alrededor de 10^6en 175 iteraciones, que da un error promedio de reducción de alrededor de $10^{-6/175} \approx 0.92$ por iteración. La razón de convergencia inicial, para las primeras 20 iteraciones, es alrededor de un factor de 0.8 por iteración; la razón de convergencia final después de las primeras 20 iteraciones, es alrededor de 0.94 por iteración.

La convergencia del método del gradiente con línea de búsqueda exacta es de nuevo lineal, con un error total de reducción de aproximadamente $10^{-6/140} \approx 0.91$ por iteración. La diferencia es mínima con la línea de búsqueda con retroceso.

Finalmente, examinamos la influencia de los parámetros $\alpha\ y\,\beta$ en la razón de convergencia, por determinar el número de iteraciones requeridas para obtener

$$f(x^{(k)}) - p^* \leq 10^{-5}$$

En el primer experimento, fijamos $\beta = 0.5$ y variamos α entre 0.05 y 0.5. El número de iteraciones requeridas varía desde 80, para valores grandes de α, en el rango 0.2 – 0.5, alrededor de 170 para valores pequeños de α. Este y otros experimentos, sugieren que el método del gradiente trabaja mejor con α bastante grande, en el rango 0.2 – 0.5.

Similarmente, podemos estudiar el efecto de escoger β fijando $\alpha = 0.1$ y variando β entre 0.05 a 0.95. De nuevo la variación en el número total de iteraciones no es grande, en el rango de 80 (cuando $\beta \approx 0.5$) a 200 (para β pequeño, o cerca de 1). Este experimento, y otros, sugieren que $\beta = 0.5$ es una buena elección. Estos experimentos sugieren que el efecto de los parámetros de retroceso sobre la convergencia no es grande, no más que un factor de dos o menos.

Conclusiones

1. El método del gradiente a menudo exhibe aproximadamente convergencia lineal, es decir el error $f(x^{(k)}) - p^*$ converge a cero aproximadamente como una serie geométrica.

2. La escogencia en los parámetros de retroceso tienen un notable pero no dramático efecto sobre la convergencia. Una línea exacta algunas veces mejora la convergencia del método gradiente, pero el efecto no es grande.

3. La razón de convergencia depende gratamente del número de condición de la Hessiana, o de los conjuntos subnivel. La convergencia puede ser muy baja, siempre para los problemas que son moderadamente bien condicionados (digamos, con número de condición en los 100s). cuando el número de condición es grande (digamos 100 o más) el método del gradiente es bajo e inútil en la práctica.

La principal ventaja del método gradiente es su simplicidad. Su principal desventaja es que su razón de convergencia depende críticamente del número de condición de la Hessiana o los conjuntos subnivel.

3.4. Método de Newton

El método de Newton es un método iterativo descendente

3.4.1. El paso de Newton

Para $x \in dom\, f$, el vector

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

Es llamado el paso de Newton para f en x. Que $\nabla^2 f(x)$ sea definida positiva implica que

$$\nabla^2 f(x)^T N = -\nabla f(x)^T \nabla^2 f(x)^{-1} \nabla f(x) < 0$$

A menos que $\nabla f(x) = 0$. De modo que el paso de Newton es una dirección descendente (a menos que x sea optimal)

El método de Newton puede ser motivado en varias formas.

3.4.2. Minimizador de una aproximación de segundo orden

La aproximación de segundo orden de f en x es

$$\hat{f}(x+v) = f(x) + \nabla f(x)^T v + \frac{1}{2} \nabla^2 f(x) v$$

La cual es una función cuadrática convexa de v, y es minimizada cuando $v = N$. Así, el paso de Newton N es el que debería ser añadido al punto x para minimizar la aproximación de segundo orden de f en x.

Si la función f es cuadrática, entonces $x + N$ es el minimizador exacto de f. Si la función es casi cuadrática, la intuición sugiere que $x + N$ debería ser una buena estimación del minimizador de f en x.

3.4.3. Mínima Dirección descendente en la norma definida por la Hessiana

El paso de Newton es también la mínima dirección descendente en x, para la norma cuadrática definida por la Hessiana, $\nabla^2 f(x)$, es decir

$$\|u\|_{\nabla^2 f(x)} = (u^T \nabla^2 f(x) u)^{1/2}$$

Esto da otra razón del porque el paso de Newton debe ser una buena dirección de búsqueda, y una muy buena dirección de búsqueda cuando x está cerca de x^*.

3.4.4. Solución de condición de optimalidad linealizada

Si linealizamos la condición de optimalidad $\nabla f(x^*) = 0$ cerca de x obtenemos

$$\nabla f(x + v) = \nabla f(x) + \nabla^2 f(x) v = 0$$

que es una ecuación lineal en v, con solución $v = N$. De modo que el paso de Newton N es el que debería ser añadido a x de modo que la condición de optimalidad linealizada se cumpla. Esto sugiere que cuando x está cerca de x^* , la actualización $x + N$ debería ser una buena aproximación de x^*.

3.4.5. Afín invarianza del paso de Newton

Una importante propiedad del paso de Newton es que este es independiente de cambios de coordenadas lineales (o afines).

Supongamos que $T \in R^{n \times n}$ es no singular, y define:

$F(y) = f(Ty)$. Entonces tenemos

$$\nabla F(y) = T^T \nabla f(x), \quad \nabla^2 F(y) = T^T \nabla^2 f(x) T$$

Cuando $x = Ty$. El paso de Newton para F en y es por lo tanto

$$M = (T^T \nabla^2 f(x) T)^{-1} T^T \nabla f(x)$$

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

$$= T^{-1} N$$

Entonces el paso de Newton de f y F están relacionados por la misma transformación lineal, y

$$x + N = T(y + M)$$

3.4.6. El decremento de Newton

La cantidad

$$\lambda(x) = (\nabla f(x)^{\mathrm{T}} \nabla^2 f(x)^{-1} \nabla f(x))^{1/2}$$

se llama el decremento de Newton en x. Veremos que el decremento de Newton juega un rol importante en el análisis del método de Newton, y es también útil como un criterio de parada. Podemos relacionar el decremento de Newton a la cantidad $f(x) - \inf_y \hat{f}(y)$,

$$f(x) - \inf_y \hat{f}(y) = f(x) - \hat{f}(x+N) = \frac{1}{2}\lambda(x)^2$$

Así, $\lambda^2/2$ es una estimación de $f(x) - p^*$, basado en la aproximación cuadrática de f en x.

Podemos expresar el decremento de Newton también en la forma

$$\lambda(x) = (N^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(x)\mathrm{N})^{1/2}$$

Esto demuestra que λ es la norma del paso de Newton, en la norma cuadrática definida por la Hessiana.

El decremento de Newton viene en una línea de búsqueda con retroceso también, puesto que tenemos

$$\nabla f(x)^{\mathrm{T}}\mathrm{N} = -\lambda(x)^2 \qquad (20)$$

Esta es la constante usada en una línea de búsqueda con retroceso, y puede ser interpretada como la derivada direccional de f en x en la dirección del paso de Newton:

$$-\lambda(x)^2 = \nabla f(x)^{\mathrm{T}}\mathrm{N} = \frac{d}{dt} f(x + tN)\bigg|_{t=0}$$

Notemos también que el decremento de Newton es, al igual que el paso de Newton, afín invariante.

3.4.7. Formulación del método de Newton

El método de Newton a describir, es algunas veces llamado, el método de Newton amortiguado, para distinguirlo del método de Newton puro, que usa un tamaño de paso fijo $t = 1$.

Algoritmo

Dado un punto de inicio $x \in dom\, f$, una tolerancia $\epsilon > 0$.

Repetir

1. Compute el paso y el decremento de Newton

   $$N = -\nabla^2 f(x)^{-1}\nabla f(x),\ \ \lambda(x) = (\nabla f(x)^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(x)^{-1}\nabla f(x))^{1/2}$$

2. Criterio de parada. Salir si $\lambda^2/2 \leq \epsilon$
3. Línea de búsqueda. Escoger el tamaño de paso t para una línea de búsqueda con retraso.
4. Actualizar $x = x + tN$

3.5. Minimización con ecuaciones restricción

3.5.1. Problema de minimización con ecuaciones restricción

Es de la forma

Minimice $f(x)$ (21)

Sujeto a: $Ax = b$

Donde $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ es convexa y dos veces continuamente diferenciable, $A \in \mathbb{R}^{p \times n}$ con rango de $A = p < n$. La condición impuesta sobre A indica que hay menos ecuaciones restricción que variables, y que las ecuaciones restricción son independientes. Asumiremos que una solución optimal x^* existe, y usamos p^* para denotar el valor óptimo,

$$p^* = \inf\{f(x): Ax = b\} = f(x^*)$$

Recalcamos que $x^* \in dom\, f$ es optimal para (21) si y solamente si existe un $x^* \in \mathbb{R}^n$ tal que

$$Ax^* = b, \ \ \nabla f(x^*) + A^T v^* = 0 \tag{22}$$

Resolver el problema (21) es equivalente a hallar una solución de (22), que es un conjunto de $n + p$ ecuaciones con $n + p$ variables x^*, v^*. El primer conjunto de ecuaciones, $Ax^* = b$, se llaman ecuaciones de factibilidad primal, que son lineales.

El segundo conjunto de ecuaciones, $\nabla f(x^*) + A^T v^* = 0$, se llaman ecuaciones de factibilidad dual, que son en general no lineales.

Cualquier problema de minimización con ecuaciones restricción puede ser reducido a un problema irrestricto al eliminar las restricciones y resolver usando el método de Newton.

3.5.2. Minimización cuadrática con ecuación restricción

Consideremos el problema

Minimice $f(x) = \frac{1}{2}x^T P x + q^T x + r$

Sujeto a: $Ax = b$

Donde $P \in S^n$ y $A \in \mathbb{R}^{p\times n}$. Las condiciones de optimalidad son

$$Ax^* = b,\ \mathrm{P}x^* + q + A^T v^* = 0$$

Que se puede reescribir como

$$\begin{bmatrix} P & A^T \\ A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x^* \\ v^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -q \\ b \end{bmatrix}$$

Este conjunto de $n + p$ ecuaciones lineales en las $n + p$ variables x^*, v^* es llamado el sistema de KKT para el problema de optimización cuadrático con ecuaciones restricción. La matriz de los coeficientes se llama la matriz KKT.

Cuando la matriz de KKT es no singular, existe una única solución optimal primal dual x^*, v^*. Si la matriz de KKT es singular, pero el sistema KKT es soluble, cualquier solución nos lleva a un par optimal x^*, v^*. Si el sistema KKT no tiene solución, el problema de optimización cuadrático es no acotado inferiormente o infactible. En verdad, en este caso existe $v \in R^n, w \in R^p$ tal que

$$Pv + A^T w = 0, \ \ Av = 0, -q^T v + b^T w > 0.$$

Sea $\tilde{x}$ cualquier punto factible. El punto $x = \tilde{x} + tv$ es factible para todo t y

$$f(\tilde{x} + tv) = f(\tilde{x}) + t(v^T P\tilde{x} + q^T v) + \frac{1}{2}t^2 v^T P v$$

$$= f(\tilde{x}) + t(-\tilde{x}^T A^T w + q^T v) - \frac{1}{2}t^2 w^T A w$$

$$= f(\tilde{x}) + t(-b^T w + q^T v)$$

Que decrece ilimitadamente cuando $t \to \infty$.

3.5.3. Eliminación de las restricciones

Un procedimiento general para resolver el problema (21) es la eliminación de las restricciones, y resolver el problema irrestricto usando el método de Newton para problemas irrestrictos.

Primeramente, hallamos una matriz $F \in \mathbb{R}^{n\times(n-p)}$ y un vector $\tilde{x} \in \mathbb{R}^n$ que parametrice el conjunto factible afín.

$$\{x/Ax = b\} = \{Fz + \tilde{x} \,/\, z \in \mathbb{R}^{n-p}\}.$$

Aquí, $\tilde{x}$ puede ser escogido como una solución particular de $Ax = b$ y $F \in \mathbb{R}^{n\times(n-p)}$ es cualquier matriz cuyo rango es el espacio nulo de A. Formamos así el problema de optimización

$$\text{Minimice } \tilde{f}(z) = f(Fz + \tilde{x})$$

Que es un problema irrestricto con variable $z \in \mathbb{R}^{n-p}$. De estas soluciones z^*, podemos hallar la solución del problema (21), $x^* = z^* + \tilde{x}$.

También podemos construir una variable optimal dual v^* para el problema con ecuaciones restricción,

$$v^* = -(AA^T)^{-1}A\nabla f(x^*).$$

Para demostrar que esta expresión es correcta, deberíamos verificar la condición de factibilidad dual

$$\nabla f(x^*) + A^T\left(-(AA^T)^{-1}A\nabla f(x^*)\right) = 0 \qquad (23)$$

Notemos que

$$\begin{bmatrix} F^T \\ A \end{bmatrix}\left(\nabla f(x^*) - A^T(AA^T)^{-1}A\nabla f(x^*)\right) = 0$$

Donde en bloque superior hemos usado que:

$F^T\nabla f(x^*) = \nabla \tilde{f}(z^*) = 0$ y $AF = 0$. Como la matriz en el lado izquierdo es no singular, implica (23).

3.6 Método de Newton con ecuaciones restricción

Describiremos una extensión del método de Newton para incluir ecuaciones restricción. El método es el mismo salvo dos diferencias. El punto inicial debe ser factible (es decir, satisfacer:

$x \in dom f, Ax = b$), y la definición del paso de Newton es modificado tomando en cuenta la ecuación restricción en ella. En particular, aseguramos que el paso de Newton Δx_{nt} es una dirección factible, es decir $A\Delta x_{nt} = 0$.

3.6.1. El paso de Newton

Para deducir el paso de Newton para el problema (21) en el punto factible x, reemplazamos la función objetivo por su aproximación de Taylor de segundo orden cerca de x, para formar el problema

Minimice

$$\tilde{f}(x+v) = f(x) + \nabla f(x)^T v + \frac{1}{2} v^T \nabla^2 f(x) v \qquad (24)$$

Sujeto a $A(x+v) = b$

con variable v. Este problema puede ser resuelto analíticamente. Definimos el paso de newton Δx_{nt} como la solución del problema (24), asumiendo que la matriz de KKT es no singular. En otras palabras, el paso de newton Δx_{nt} es el que debería sea añadido a x para resolver el problema cuando la aproximación cuadrática es usada en lugar de f.

El paso de Newton está caracterizado por

$$\begin{bmatrix} \nabla^2 f(x) & A^T \\ A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_{nt} \\ w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\nabla f(x) \\ 0 \end{bmatrix} \qquad (25)$$

Donde w es la variable optimal dual asociado para el problema cuadrático. El paso de Newton está definido solamente en los puntos en que la matriz de KKT es no singular.

3.6.2. Solución de las condiciones de optimalidad linealizada

Podemos interpretar el paso de Newton Δx_{nt}, y el vector asociado w, como la solución de la aproximación linealizada de las condiciones de optimalidad

$$Ax^* = b, \quad \nabla f(x^*) + A^T v^* = 0.$$

Sustituimos $x + \Delta x_{nt}$ por x^* y w por v^* y reemplazamos el gradiente en la segunda ecuación por su aproximación linealizada cerca de x, para obtener las ecuaciones

$$A(x + \Delta x_{nt}) = b,$$

$$\nabla f(x + \Delta x_{nt}) + A^T w \approx \nabla f(x) + \nabla^2 f(x) \Delta x_{nt} + A^T w = 0$$

Usando $Ax = b$, se tiene

$$A\Delta x_{nt} = 0, \quad \nabla^2 f(x) \Delta x_{nt} + A^T w = -\nabla f(x),$$

Que son precisamente las ecuaciones (25) que definen el paso de Newton.

3.6.3. El decremento de Newton

Definimos el decremento de Newton para el problema (21) como

$$\lambda(x) = (\Delta x_{nt}^T \nabla^2 f(x) \Delta x_{nt})^{1/2}$$

Que es la misma expresión usado en el caso irrestricto, y la misma interpretación se cumple.

IV. MATERIALES Y MÉTODOS

Se trata de una investigación Básica, por lo tanto los materiales a usar son los conceptos y resultados del Algebra lineal, la teoría de optimización, etc. Que nos permiten mostrar la hipótesis del trabajo, la convergencia del método de Newton.

Asumiremos, como antes, que f es dos veces continuamente diferenciable, y fuertemente convexa, es decir, $\nabla^2 f(x) \succcurlyeq mI,$ para todo $x \in S$. Hemos visto que esto implica también que existe un $M > 0$ tal que $\nabla^2 f(x) \preccurlyeq MI,$ para todo $x \in S$.

Además asumiremos que la Hessiana de f es Lipschitz continua sobre S con constante L, es decir

$$\|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(y)\|_2 \leq L\|x - y\|_2, \forall x, y \in S$$

El coeficiente L puede ser interpretado como una cota de la tercera derivada de f , que podemos tomarla como cero para la función cuadrática. Más generalmente, L mide como f puede ser aproximada por un modelo cuadrático, de modo que podemos esperar que la constante L juegue un rol crítico en el rendimiento del método de newton. La intuición sugiere que el método de Newton trabaja muy bien para una función cuyo modelo cuadrático varía muy poco (es decir, L es pequeño).

V. RESULTADOS

5.1. Análisis de convergencia

Demostraremos que existen números η, γ tal que $0 < \eta \leq \frac{m^2}{L}$, $\gamma > 0$ de modo que se cumple

1) Si $\left\|\nabla f(x^{(k)})\right\|_2 \geq \eta$, entonces

$$f\left(x^{(k+1)}\right) - f\left(x^{(k)}\right) \leq -\gamma \tag{26}$$

2) Si $\left\|\nabla f(x^{(k)})\right\|_2 < \eta$, entonces la línea de búsqueda con retroceso selecciona $t^{(k)} = 1$, y

$$\frac{L}{2m^2}\left\|\nabla f\left(x^{(k+1)}\right)\right\|_2 \leq \left(\frac{L}{2m^2}\left\|\nabla f\left(x^{(k)}\right)\right\|_2\right)^2 \tag{27}$$

Analicemos las implicaciones de la segunda condición. Supongamos que esta se satisface para la iteración k, es decir,

$$\left\|\nabla f(x^{(k)})\right\|_2 < \eta.$$

Como $\eta \leq \frac{m^2}{L}$ tenemos que

$$\left\|\nabla f(x^{(k+1)})\right\|_2 < \eta,$$

es decir, la segunda condición también se cumple para la iteración $k+1$. Continuando recursivamente, concluimos que si la segunda condición se cumple, esta se cumplirá para los futuros iterados, es decir, para todo $l \geq k$, tenemos $\|\nabla f(x^{(l)})\|_2 < \eta$, por lo tanto, para todo $l \geq k$, el algoritmo toma un paso de Newton completo $t = 1$, y

$$\frac{L}{2m^2}\|\nabla f(x^{(l+1)})\|_2 \leq \left(\frac{L}{2m^2}\|\nabla f(x^{(l)})\|_2\right)^2$$

Aplicando esta desigualdad recursivamente, tenemos que para $l \geq k$,

$$\frac{L}{2m^2}\|\nabla f(x^{(l)})\|_2 \leq \left(\frac{L}{2m^2}\|\nabla f(x^{(k)})\|_2\right)^{2^{l-k}} \leq \left(\frac{1}{2}\right)^{2^{l-k}}$$

Y entonces

$$f(x^{(l)}) - p^* \leq \frac{1}{2m^2}\|\nabla f(x^{(l)})\|_2^2 \leq \frac{2m^3}{L^2}\left(\frac{1}{2}\right)^{2^{l-k+1}} \tag{28}$$

La última desigualdad demuestra que la convergencia es extremadamente rápida una vez que la segunda condición se cumple. Este fenómeno se llama convergencia cuadrática. Estrictamente hablando, la desigualdad (28) significa que, después de un número suficientemente grande de iteraciones el número de dígitos correctos se duplica en cada iteración.

Las iteraciones en el método de Newton naturalmente se dividen en dos etapas. La segunda etapa, que ocurre una vez que la condición $\|\nabla f(x^{(k)})\|_2 \leq \eta$ se cumple, se llama etapa de convergencia cuadrática. Nos referimos a la primera etapa como la fase Newton amortiguado, puesto que el algoritmo puede escoger un paso $t < 1$. La etapa de convergencia cuadrática es también llamada la fase del método puro de Newton, puesto que en estas iteraciones siempre se escoge un paso de Newton $t = 1$.

Ahora podemos estimar la complejidad total. Primeramente deducimos una cota superior sobre el número de iteraciones en la fase del método de Newton amortiguado. Como f decrece en al menos γ en cada iteración, el número de pasos de Newton amortiguado no puede exceder

$$\frac{f(x^{(0)}) - p^*}{\gamma}$$

De lo contrario, f podría ser menor que p^*, que es imposible.

Podemos acotar el número de iteraciones en la fase de convergencia cuadrática usando (17). Esto implica que podemos tener $f(x) - p^* \leq \epsilon$ después de no mas $log_2 log_2(\epsilon_0/\epsilon)$ iteraciones en la fase de convergencia cuadrática, donde

$$\epsilon_0 = \frac{2m^3}{L^2}$$

En general, entonces, el número de iteraciones hasta que $f(x) - p^* \leq \epsilon$ es acotado superiormente por

$$\frac{f(x^{(0)}) - p^*}{\gamma} + log_2 log_2(^{\epsilon_0}/_{\epsilon})$$

El término $log_2 log_2(^{\epsilon_0}/_{\epsilon})$, que acota el número de iteraciones en la fase de convergencia cuadrática, crece muy poco con exactitud ϵ, y puede ser considerada como una constante para propósitos prácticos, por ejemplo cinco o seis. Es decir, el número de iteraciones requeridas para minimizar f es acotado superiormente por

$$\frac{f(x^{(0)}) - p^*}{\gamma} + 6 \qquad (29)$$

Más precisamente, esta es una cota sobre el número de iteraciones para computar una muy buena aproximación de la solución.

5.2. Fase Newton amortiguado.

Ahora estableceremos la desigualdad (4.1). Asumiendo

$\|\nabla f(x)\|_2 \geq \eta$, primeramente deducimos una cota inferior para el tamaño de paso seleccionado por la línea de búsqueda. Convexidad fuerte implica que $\nabla^2 f(x) \preccurlyeq MI$ sobre S, y por lo tanto

$$f(x + tN) \leq f(x) + t\nabla f(x)^T N + \frac{M}{2}\|N\|_2^2 t^2$$

$$\leq f(x) - t\lambda(x)^2 + \frac{M}{2m} t^2 \lambda(x)^2$$

Donde hemos usado (20) y

$$\lambda(x)^2 = N^T \nabla^2 f(x) N \geq m\|N\|_2^2$$

El tamaño de paso $t = m/M$ satisface la condición de salida de la línea de búsqueda, puesto que

$$f(x + tN) \leq f(x) - \frac{m}{2M}\lambda(x)^2 \leq f(x) - \alpha t \lambda(x)^2$$

Por lo tanto la línea de búsqueda retorna un tamaño de paso $t \geq \frac{\beta m}{M}$ resultando en un decrecimiento de la función objetivo

$$f(x^+) - f(x) \leq -\alpha t \lambda(x)^2$$

$$\leq -\alpha \frac{\beta m}{M} \lambda(x)^2$$

$$\leq -\alpha \frac{\beta m}{M^2} \|\nabla^2 f(x)\|_2^2$$

$$\leq -\alpha\frac{\beta m}{M}(\eta)^2$$

Donde usamos

$$\lambda(x)^2 = \nabla f(x)^T \nabla^2 f(x)^{-1} \nabla f(x) \geq (1/M)\|\nabla f(x)\|_2^2$$

Por lo tanto, (26) se cumple con

$$\gamma = \alpha\beta\eta^2 \frac{m}{M^2} \tag{30}$$

5.3. Fase convergencia cuadrática

Asumiendo que $\|\nabla f(x)\|_2 < \eta$, demostremos que la línea de búsqueda con retroceso selecciona un paso unitario, probado que

$$\eta \leq 3(1-2\alpha)\frac{m^2}{L}$$

Por la condición de Lipschitz, tenemos para $t \geq 0$,

$$\|\nabla^2 f(x+tN) - \nabla^2 f(x)\|_2 \leq tL\|N\|_2$$

Y por lo tanto

$$|N^T(\nabla^2 f(x+tN) - \nabla^2 f(x))N| \leq tL\|N\|_2^3$$

Haciendo $\tilde{f}(t) = f(x+tN)$, tenemos $\tilde{f}''(t) = N^T\big(\nabla^2 f(x+tN)\big)N$, de modo que:

$$\left|\tilde{f}''(t) - \tilde{f}''(0)\right| \leq tL\|N\|_2^3$$

Usando esta desigualdad tendremos una cota superior para $\tilde{f}(t)$.

Comenzamos con

$$\tilde{f}''(t) \leq \tilde{f}''(0) + tL\|N\|_2^3 \leq \lambda(x)^2 + t\frac{L}{m^{3/2}}\lambda(x)^3$$

Donde $\tilde{f}''(0) = \lambda(x)^2$ y $\lambda(x)^2 \geq m\|N\|_2^2$. Integrando la desigualdad anterior tenemos

$$\tilde{f}'(t) \leq \tilde{f}'(0) + t\lambda(x)^2 + t^2\frac{L}{2m^{3/2}}\lambda(x)^3$$

$$= -\lambda(x)^2 + t\lambda(x)^2 + t^2\frac{L}{2m^{3/2}}\lambda(x)^3$$

Integrando una vez más se tiene

$$\tilde{f}(t) \leq \tilde{f}(0) - t\lambda(x)^2 + \frac{1}{2}\lambda(x)^2 + t^3\frac{L}{6m^{3/2}}\lambda(x)^3$$

Finalmente tomando $t = 1$ obtenemos

$$f(x + tN) \leq f(x) - \frac{t^2}{2}\lambda(x)^2 + \frac{L}{6m^{3/2}}\lambda(x)^3$$

Ahora supongamos que

$$\|\nabla f(x)\|_2 < \eta \leq \frac{3(1-2\alpha)m^{\frac{3}{2}}}{L}$$

Por convexidad fuerte tenemos

$$\lambda(x) \leq \frac{3(1-2\alpha)\mathrm{m}^{\frac{3}{2}}}{\mathrm{L}}$$

Luego,

$$f(x+tN) \leq f(x) - \lambda(x)^2\left(\frac{1}{2} - \frac{L\lambda(x)}{6m^{3/2}}\right)$$

$$\leq f(x) - \alpha\lambda(x)^2$$

$$= f(x) + \alpha\nabla f(x)^T N$$

Lo cual demuestra que el paso unitario $t = 1$ es aceptado por la línea de búsqueda con retroceso.

Ahora examinamos el radio de convergencia. Aplicando la condición de Lipshitz tenemos

$$\|\nabla f(x^+)\|_2 = \|\nabla f(x+tN) - \nabla f(x) - \nabla^2 f(x)N\|_2$$

$$= \left\|\int_0^1 (\nabla^2 f(x+tN) - \nabla^2 f(x))N dt\right\|_2$$

$$\leq \tfrac{L}{2}\|N\|_2^2$$

$$= \tfrac{L}{2}\|\nabla^2 f(x)^{-1}\nabla f(x)\|_2^2$$

$$\leq \tfrac{L}{2m^2}\|\nabla f(x)\|_2^2$$

Con lo cual se verifica (27)

En conclusión, el algoritmo selecciona un paso unitario y satisface la condición (27) si $\|\nabla f(x)\|_2 < \eta$, donde

$$\eta = \min\{1{,}3(1-2\alpha)\}\frac{m^2}{L}$$

Sustituyendo esta cota en (29) y (30), tenemos que el número de iteraciones es acotado por

$$6 + \frac{M^2L^2/m^5}{\alpha\beta\min\{1{,}9(1-2\alpha)^2\}}\left(f(x^{(0)}) - p^*\right)$$

VI. DISCUSIÓN DE RESULTADOS

El método de Newton tiene varias ventajas sobre el método Gradiente y métodos de pasos descendentes:

6.1. La convergencia del método de Newton es rápida en general, y cuadrática cerca de x^*.. Una vez que la fase de convergencia cuadrática se alcanza, a lo más 6 o menos iteraciones se requieren para producir una solución de alta exactitud.

6.2. El método de Newton es afín invariante. Este es independiente a cambio de coordenadas, o al número de condición de los conjuntos subnivel de la función objetivo.

6.3. La buena performance del método de Newton no depende de la escogencia de los parámetros del algoritmo. En contraste, la escogencia de la norma para el paso descendente juega un rol crítico en su performance.

6.4. La principal desventaja del método de Newton es el costo de formar y guardar la Hessiana, y el costo de computar el paso de Newton, que requiere resolver un conjunto de ecuaciones lineales. Se puede en muchos casos explotar la estructura del problema para reducir sustancialmente el costo de computar el paso de Newton.

6.5. Otra alternativa es proveer una familia de algoritmos para optimización irrestricta llamada métodos cuasi Newton. Estos métodos requieren menos esfuerzo computacional para formar direcciones de búsqueda, pero comparten algunas de las fuertes ventajas del método de Newton, tales como rápida convergencia cerca de x^*.

VII. REFERENCIALES

1. DENNIS G. ZILL MICHAEL R. CULLEN, Matemáticas Avanzadas para Ingeniería, Vol. 1 , Mc Graw Hill 2008, Tercera edición.
2. STEPHEN J. WRIGHT, Primal dual interior point methods, Society for industrial and applied Mathematics, Philadelphia, 1997.
3. J.B.HIRIART URRUTY Y C. LEMARECHAL, Convex Analysis and Minimization Algorithms, Fundamental Principles of Mathematical Sciences, Springler-Verlag, Berlin, 1993.
4. DE LA FUENTE O'CONNOR JOSE LUIS, Técnicas de Cálculo para Sistemas de Ecuaciones, Programación Lineal y Programación Entera, Ed. Reverté S.A., Barcelona-Bogotá-Buenos Aires-Caracas-México, 1998, Segunda Edición.
5. YURII NESTEROV AND ARKADII NEMIROVSKII, Interior- Point Polynomial Algoritms in Convex Programming, SIAM, USA, 1994.
6. MAGNUS R. HESTENES, Conjugate direction methods in optimization, Springer-Verlag, New York Inc, 1980.
7. PENG, J., ROOS, C. AND TERLAKY, T., Self-regularity: A new paradigm for Primal-Dual interior point algorithms, Princeton University Press, 2002.

VIII. APÉNDICE

Matriz de consistencia

Problema	Objetivo general	Hipótesis
¿Qué condiciones deben cumplirse para que el método de Newton aplicado a un problema irrestricto sea convergente con un costo computacional adecuado?	Establecer las condiciones que deben cumplirse para que un problema resuelto por el método de Newton sea convergente con un costo computacional adecuado.	La convergencia del método de Newton es rápida en general, y cuadrática cerca del punto óptimo. La principal desventaja del método de Newton es el costo de formar y almacenar la Hessiana, y el costo de computar el paso de newton, que requiere resolver un conjunto de ecuaciones lineales.

	Objetivos específicos	
	i) Estudiar los métodos de programación descendentes. ii) Establecer la convergencia del método de Newton aplicado a un programa de optimización irrestricto. iii) Mostrar las bondades del método de newton en la solución de problemas irrestrictos y concluir su costo computacional adecuado.	

X. APÉNDICE

En el presente trabajo, por ser un trabajo de investigación básica, no presenta anexos.