

Fundamentos Avanzados de Optimización

Materia: Fundamentos de Inteligencia Artificial

Prof. D.Sc. BARSEKH-ONJI Aboud

Facultad de Ingeniería
Universidad Anáhuac México

7 de diciembre de 2025

Objetivo de la Sección

Para aplicar y evaluar eficazmente los algoritmos de búsqueda, es fundamental entender los principios de los problemas de optimización. Esta sección examina la naturaleza de estos problemas, su clasificación y los fundamentos matemáticos que definen la optimalidad.

Agenda

1. Terminología de los Problemas de Optimización
2. Tipos de Restricciones y Área Factible de Soluciones
3. Exploración y Explotación en un Espacio de Búsqueda
4. Clasificación Detallada de Problemas de Optimización
5. Formulación General y Soluciones Óptimas para NLP
6. Herramientas Matemáticas: Gradiente y Hessiana
7. Condiciones de Optimalidad para Optimización sin Restricciones
8. Convexidad en Problemas de Optimización
9. Métodos de Solución para Optimización sin Restricciones
10. Optimización de Caja Negra
11. Optimización en el Contexto del Aprendizaje Automático

Terminología de los Problemas de Optimización (Parte 1)

Función Objetivo (o de Costo/Aptitud): Es la función $f(x)$ que se desea minimizar o maximizar.

Terminología de los Problemas de Optimización (Parte 1)

Función Objetivo (o de Costo/Aptitud): Es la función $f(x)$ que se desea minimizar o maximizar.

Variables de Decisión: Son las variables $x = (x_1, \dots, x_n)$ cuyos valores se buscan para optimizar la función objetivo.

Terminología de los Problemas de Optimización (Parte 1)

Función Objetivo (o de Costo/Aptitud): Es la función $f(x)$ que se desea minimizar o maximizar.

Variables de Decisión: Son las variables $x = (x_1, \dots, x_n)$ cuyos valores se buscan para optimizar la función objetivo.

Espacio de Búsqueda: El conjunto de todos los posibles valores que pueden tomar las variables de decisión.

Terminología de los Problemas de Optimización (Parte 1)

Función Objetivo (o de Costo/Aptitud): Es la función $f(x)$ que se desea minimizar o maximizar.

Variables de Decisión: Son las variables $x = (x_1, \dots, x_n)$ cuyos valores se buscan para optimizar la función objetivo.

Espacio de Búsqueda: El conjunto de todos los posibles valores que pueden tomar las variables de decisión.

Restricciones (Constraints): Condiciones que deben satisfacer las variables de decisión y que limitan el espacio de búsqueda a una **región factible**.

Terminología de los Problemas de Optimización (Parte 2)

Solución Factible: Un conjunto de valores para las variables de decisión que satisface todas las restricciones.

Terminología de los Problemas de Optimización (Parte 2)

Solución Factible: Un conjunto de valores para las variables de decisión que satisface todas las restricciones.

Solución Óptima: Una solución factible que produce el valor óptimo (mínimo o máximo) de la función objetivo.

Terminología de los Problemas de Optimización (Parte 2)

Solución Factible: Un conjunto de valores para las variables de decisión que satisface todas las restricciones.

Solución Óptima: Una solución factible que produce el valor óptimo (mínimo o máximo) de la función objetivo.

Óptimo Local vs. Óptimo Global: Un **óptimo local** es una solución mejor que sus vecinas. Un **óptimo global** es la mejor solución en toda la región factible.

Visualización de un Problema de Optimización

Some Simple Optimization Problems and Their Solutions

$$\min_x f(\mathbf{x})$$

objective function

$$\text{s.t. } c_i(\mathbf{x}) = 0, \forall i \in E$$

equality constraints (EC)

$$c_i(\mathbf{x}) \leq 0, \forall i \in I$$

inequality constraints (IC)

Example:

$$\min_x (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2$$

$$\text{s.t. } x_2 - 2x_1 = 0$$

$$x_1^2 - x_2 \leq 0$$

$$x_1 + x_2 \leq 2$$

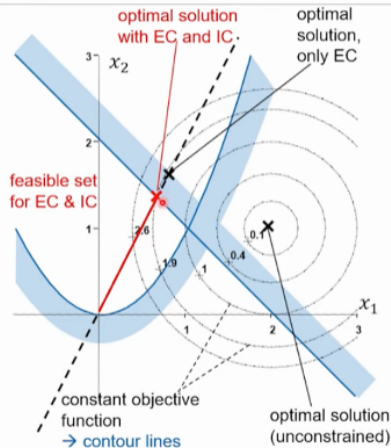


Figura 1: Ilustración de un problema simple con su función objetivo (líneas de contorno), restricciones (líneas de colores) y región factible (área sombreada).

Agenda

1. Terminología de los Problemas de Optimización
2. Tipos de Restricciones y Área Factible de Soluciones
3. Exploración y Explotación en un Espacio de Búsqueda
4. Clasificación Detallada de Problemas de Optimización
5. Formulación General y Soluciones Óptimas para NLP
6. Herramientas Matemáticas: Gradiente y Hessiana
7. Condiciones de Optimalidad para Optimización sin Restricciones
8. Convexidad en Problemas de Optimización
9. Métodos de Solución para Optimización sin Restricciones
10. Optimización de Caja Negra
11. Optimización en el Contexto del Aprendizaje Automático

Tipos de Restricciones y Área Factible

Tipos de Restricciones

Las restricciones definen la región del espacio de búsqueda donde se encuentran las soluciones válidas.

- **Restricciones de Igualdad:** De la forma $h_j(x) = 0$.
- **Restricciones de Desigualdad:** De la forma $g_i(x) \leq 0$.
- **Restricciones de Límite (Box Constraints):** Especifican rangos para las variables individuales, $x_k^{min} \leq x_k \leq x_k^{max}$.

Área Factible de Soluciones

Es el subconjunto del espacio de búsqueda que satisface todas las restricciones.

- Puede ser un conjunto convexo o no convexo, continuo o discreto.
- El manejo de restricciones (e.g., mediante funciones de penalización) es un aspecto crucial en muchos problemas de optimización.

Agenda

1. Terminología de los Problemas de Optimización
2. Tipos de Restricciones y Área Factible de Soluciones
3. Exploración y Explotación en un Espacio de Búsqueda
4. Clasificación Detallada de Problemas de Optimización
5. Formulación General y Soluciones Óptimas para NLP
6. Herramientas Matemáticas: Gradiente y Hessiana
7. Condiciones de Optimalidad para Optimización sin Restricciones
8. Convexidad en Problemas de Optimización
9. Métodos de Solución para Optimización sin Restricciones
10. Optimización de Caja Negra
11. Optimización en el Contexto del Aprendizaje Automático

El Dilema Central: Exploración vs. Explotación

Un Desafío Fundamental en la Optimización Heurística

Lograr un equilibrio adecuado entre la exploración y la explotación es clave para el éxito de un algoritmo de búsqueda.

Exploración (Exploration)

- Proceso de visitar regiones **nuevas y diversas** del espacio de búsqueda.
- **Objetivo:** Descubrir áreas potencialmente prometedoras y evitar quedar atrapado en óptimos locales.
- Implica una búsqueda más **global**.

Explotación (Exploitation)

- Proceso de **refinar las soluciones** ya encontradas en regiones prometedoras.
- **Objetivo:** Mejorar incrementalmente las buenas soluciones actuales.
- Implica una búsqueda más **local**.

Agenda

1. Terminología de los Problemas de Optimización
2. Tipos de Restricciones y Área Factible de Soluciones
3. Exploración y Explotación en un Espacio de Búsqueda
4. Clasificación Detallada de Problemas de Optimización
5. Formulación General y Soluciones Óptimas para NLP
6. Herramientas Matemáticas: Gradiente y Hessiana
7. Condiciones de Optimalidad para Optimización sin Restricciones
8. Convexidad en Problemas de Optimización
9. Métodos de Solución para Optimización sin Restricciones
10. Optimización de Caja Negra
11. Optimización en el Contexto del Aprendizaje Automático

Clasificación de Problemas de Optimización

Criterios de Clasificación

Los problemas de optimización se clasifican según las propiedades de su función objetivo, sus restricciones y sus variables.

- **Por Linealidad:**

- Programas Lineales (LP) vs. Programas No Lineales (NLP).

Clasificación de Problemas de Optimización

Criterios de Clasificación

Los problemas de optimización se clasifican según las propiedades de su función objetivo, sus restricciones y sus variables.

- **Por Linealidad:**

- Programas Lineales (LP) vs. Programas No Lineales (NLP).

- **Por Tipo de Variables:**

- Continuos, Enteros (IP) o Mixtos (MIP).

Clasificación de Problemas de Optimización

Criterios de Clasificación

Los problemas de optimización se clasifican según las propiedades de su función objetivo, sus restricciones y sus variables.

- **Por Linealidad:**
 - Programas Lineales (LP) vs. Programas No Lineales (NLP).
- **Por Tipo de Variables:**
 - Continuos, Enteros (IP) o Mixtos (MIP).
- **Por Dependencia del Tiempo:**
 - Estáticos vs. Dinámicos (Control Óptimo).

Clasificación de Problemas de Optimización

Criterios de Clasificación

Los problemas de optimización se clasifican según las propiedades de su función objetivo, sus restricciones y sus variables.

- **Por Linealidad:**
 - Programas Lineales (LP) vs. Programas No Lineales (NLP).
- **Por Tipo de Variables:**
 - Continuos, Enteros (IP) o Mixtos (MIP).
- **Por Dependencia del Tiempo:**
 - Estáticos vs. Dinámicos (Control Óptimo).
- **Por Incertidumbre:**
 - Deterministas vs. Estocásticos.

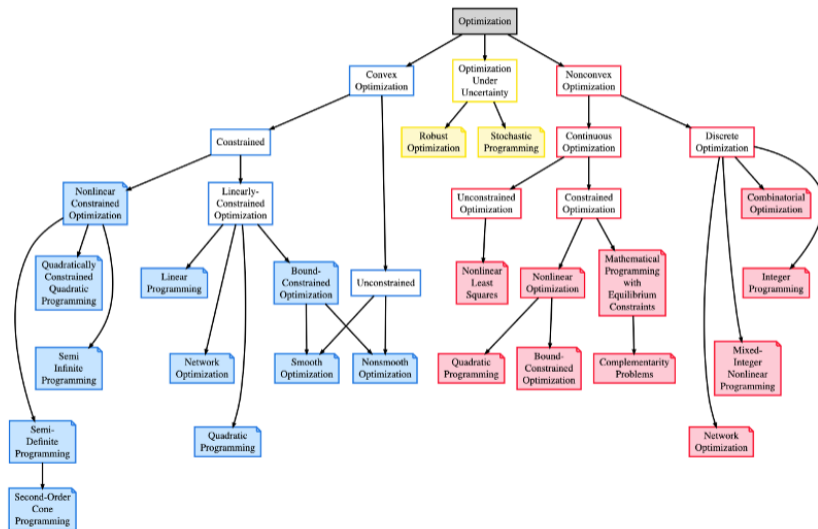
Clasificación de Problemas de Optimización

Criterios de Clasificación

Los problemas de optimización se clasifican según las propiedades de su función objetivo, sus restricciones y sus variables.

- **Por Linealidad:**
 - Programas Lineales (LP) vs. Programas No Lineales (NLP).
- **Por Tipo de Variables:**
 - Continuos, Enteros (IP) o Mixtos (MIP).
- **Por Dependencia del Tiempo:**
 - Estáticos vs. Dinámicos (Control Óptimo).
- **Por Incertidumbre:**
 - Deterministas vs. Estocásticos.
- **Por Número de Objetivos:**
 - Objetivo único vs. Multiobjetivo.

Diagrama de Clasificación



Agenda

1. Terminología de los Problemas de Optimización
2. Tipos de Restricciones y Área Factible de Soluciones
3. Exploración y Explotación en un Espacio de Búsqueda
4. Clasificación Detallada de Problemas de Optimización
5. **Formulación General y Soluciones Óptimas para NLP**
6. Herramientas Matemáticas: Gradiente y Hessiana
7. Condiciones de Optimalidad para Optimización sin Restricciones
8. Convexidad en Problemas de Optimización
9. Métodos de Solución para Optimización sin Restricciones
10. Optimización de Caja Negra
11. Optimización en el Contexto del Aprendizaje Automático

Formulación General de un Problema No Lineal (NLP)

Formulación Matemática

Un Problema de Optimización No Lineal (NLP) se formula generalmente como:

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

Sujeto a:

$$c_i(\mathbf{x}) = 0, \quad \forall i \in E \quad (\text{restricciones de igualdad})$$

$$c_i(\mathbf{x}) \leq 0, \quad \forall i \in I \quad (\text{restricciones de desigualdad})$$

Conjunto Factible (Ω)

Las restricciones definen el **conjunto factible** Ω , que es el universo de todas las soluciones posibles. El problema es, entonces, encontrar el punto \mathbf{x} dentro de Ω que minimice $f(\mathbf{x})$.

Tipos de Soluciones Óptimas

- **Solución local:** Un punto \mathbf{x}^* es un mínimo local si es mejor que todos sus puntos **vecinos** inmediatos.

Tipos de Soluciones Óptimas

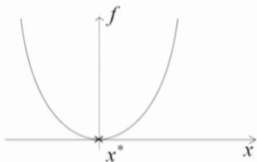
- **Solución local:** Un punto \mathbf{x}^* es un mínimo local si es mejor que todos sus puntos **vecinos** inmediatos.
- **Solución global:** Un punto \mathbf{x}^* es un mínimo global si es la **mejor solución en todo el conjunto factible**.

Tipos de Soluciones Óptimas

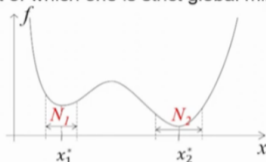
Optimal Solution – Some Examples

$$\min_{x \in R} f(x)$$

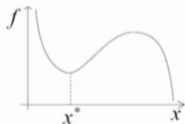
a) strict global minimum



b) Two strict local minima, out of which one is strict global minimum



c) a strict local minimum, no global minimum



d) each $x^* \in [a, b]$ is a local and global minimum no strict minima

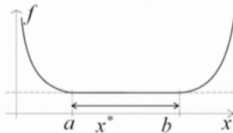


Figura 3: Ilustraciones de (a) mínimo global, (b) dos mínimos locales (uno global), (c) un mínimo local sin mínimo global, y (d) un intervalo de mínimos no estrictos.

Tipos de Soluciones Óptimas

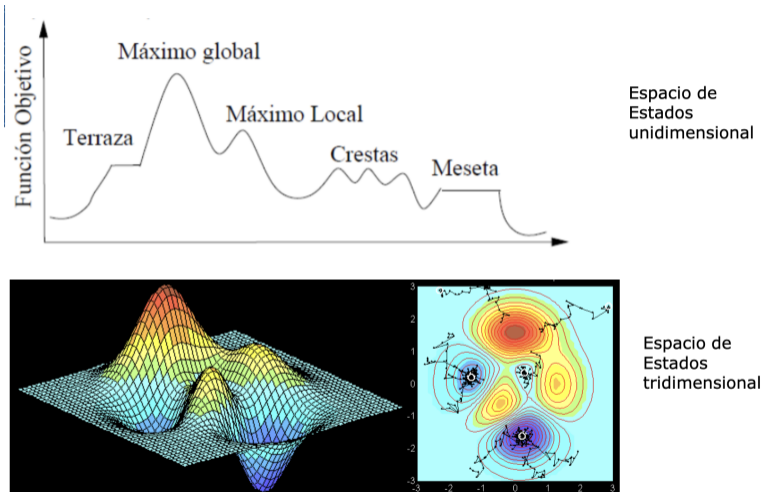


Figura 4: Espacio de Estados unidimensionales y tridimensionales

Agenda

1. Terminología de los Problemas de Optimización
2. Tipos de Restricciones y Área Factible de Soluciones
3. Exploración y Explotación en un Espacio de Búsqueda
4. Clasificación Detallada de Problemas de Optimización
5. Formulación General y Soluciones Óptimas para NLP
- 6. Herramientas Matemáticas: Gradiente y Hessiana**
7. Condiciones de Optimalidad para Optimización sin Restricciones
8. Convexidad en Problemas de Optimización
9. Métodos de Solución para Optimización sin Restricciones
10. Optimización de Caja Negra
11. Optimización en el Contexto del Aprendizaje Automático

Gradiente (Primera Derivada)

El **gradiente** de una función f en un punto \mathbf{x} es el vector de sus primeras derivadas parciales.

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \partial f / \partial x_1 \\ \vdots \\ \partial f / \partial x_n \end{bmatrix}_{\mathbf{x}}$$

Intuición: El gradiente apunta en la dirección de máximo crecimiento de la función en ese punto.

Matriz Hessiana (Segunda Derivada)

La **Matriz Hessiana**, $H(\mathbf{x})$, es la matriz de las segundas derivadas parciales de la función f .

$$H(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{bmatrix}_{\mathbf{x}}$$

Intuición: La Hessiana describe la curvatura local de la función (si se parece a un cuenco hacia arriba o hacia abajo).

Agenda

1. Terminología de los Problemas de Optimización
2. Tipos de Restricciones y Área Factible de Soluciones
3. Exploración y Explotación en un Espacio de Búsqueda
4. Clasificación Detallada de Problemas de Optimización
5. Formulación General y Soluciones Óptimas para NLP
6. Herramientas Matemáticas: Gradiente y Hessiana
7. Condiciones de Optimalidad para Optimización sin Restricciones
8. Convexidad en Problemas de Optimización
9. Métodos de Solución para Optimización sin Restricciones
10. Optimización de Caja Negra
11. Optimización en el Contexto del Aprendizaje Automático

Condiciones de Optimalidad para Mínimos Locales

Condiciones Necesarias de 1er Orden (CNPO)

Teorema: Si \mathbf{x}^* es un minimizador local de f , entonces el gradiente en ese punto debe ser cero.

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

Intuición: En un mínimo, la función es 'plana'; no está ni aumentando ni disminuyendo.

Condiciones Necesarias de 2º Orden (CNSO)

Teorema: Si \mathbf{x}^* es un minimizador local, entonces:

1. $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$.
2. La Hessiana, $\nabla^2 f(\mathbf{x}^*)$, es **semidefinida positiva**.

Intuición: La curvatura en el punto es como un 'cuenco' hacia arriba (o plano).

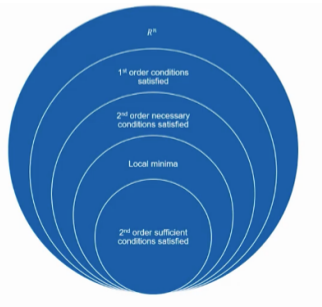
Condiciones Suficientes de Optimalidad (CSO)

Garantizando un Mínimo Local Estricto

Teorema: Si en un punto \mathbf{x}^* se cumple que:

1. El gradiente es cero: $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$.
2. La Hessiana es **definida positiva**.

Entonces, podemos asegurar que \mathbf{x}^* es un **minimizador local estricto** de f .



Agenda

1. Terminología de los Problemas de Optimización
2. Tipos de Restricciones y Área Factible de Soluciones
3. Exploración y Explotación en un Espacio de Búsqueda
4. Clasificación Detallada de Problemas de Optimización
5. Formulación General y Soluciones Óptimas para NLP
6. Herramientas Matemáticas: Gradiente y Hessiana
7. Condiciones de Optimalidad para Optimización sin Restricciones
8. **Convexidad en Problemas de Optimización**
9. Métodos de Solución para Optimización sin Restricciones
10. Optimización de Caja Negra
11. Optimización en el Contexto del Aprendizaje Automático

¿Qué es la Convexidad?

La Propiedad Clave de la Convexidad

La convexidad es una propiedad muy importante en optimización porque para problemas convexos, se garantiza que **cualquier mínimo local es también un mínimo global**.

Conjunto Convexo

Un conjunto es convexo si el segmento de línea que une dos puntos cualesquiera del conjunto está completamente contenido en el conjunto.

Función Convexa

Una función es convexa si el segmento de línea que une dos puntos cualesquiera de su gráfica se encuentra por encima de la gráfica. Intuitivamente, tiene forma de "cuenca".

$$f(\alpha \mathbf{x}_1 + (1 - \alpha) \mathbf{x}_2) \leq \alpha f(\mathbf{x}_1) + (1 - \alpha) f(\mathbf{x}_2)$$

Convexidad y la Matriz Hessiana

Condición para Funciones Diferenciables

Podemos determinar si una función es convexa analizando su Matriz Hessiana (la matriz de sus segundas derivadas):

- Una función f es **convexa** si y sólo si su matriz Hessiana $H(\mathbf{x})$ es **semidefinida positiva**.
- Si $H(\mathbf{x})$ es **definida positiva**, entonces f es estrictamente convexa.

Problema de Optimización Convexa

Un problema de optimización se considera convexo si se cumplen dos condiciones:

1. La función objetivo f es convexa.
2. El conjunto factible Ω es un conjunto convexo.

Agenda

1. Terminología de los Problemas de Optimización
2. Tipos de Restricciones y Área Factible de Soluciones
3. Exploración y Explotación en un Espacio de Búsqueda
4. Clasificación Detallada de Problemas de Optimización
5. Formulación General y Soluciones Óptimas para NLP
6. Herramientas Matemáticas: Gradiente y Hessiana
7. Condiciones de Optimalidad para Optimización sin Restricciones
8. Convexidad en Problemas de Optimización
9. **Métodos de Solución para Optimización sin Restricciones**
10. Optimización de Caja Negra
11. Optimización en el Contexto del Aprendizaje Automático

Métodos de Solución para Optimización sin Restricciones

Métodos Directos (Descenso Iterativo)

Estos métodos comienzan en un punto y se mueven iterativamente hacia una mejor solución. Los enfoques principales son:

- **Búsqueda Lineal (Line-Search):** En cada paso, se elige una dirección de descenso y se determina qué tan largo dar el paso en esa dirección.
- **Región de Confianza (Trust-Region):** Se aproxima la función con un modelo más simple en una pequeña región y se minimiza ese modelo.

Métodos Indirectos

Estos métodos intentan encontrar la solución óptima resolviendo directamente el sistema de ecuaciones que surge de las condiciones de optimalidad.

El objetivo es encontrar el punto \mathbf{x} que satisface:

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$$

Métodos de Solución para Optimización sin Restricciones

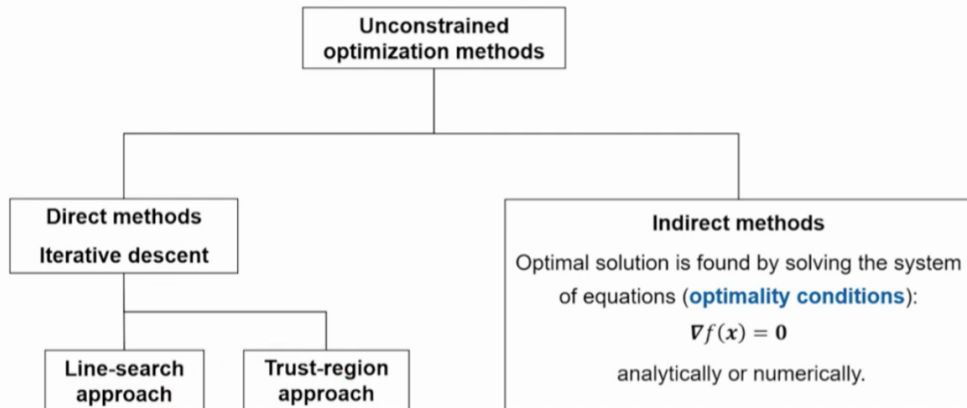


Figura 6: Los métodos directos e indirectos para resolver un problema de optimización

Agenda

1. Terminología de los Problemas de Optimización
2. Tipos de Restricciones y Área Factible de Soluciones
3. Exploración y Explotación en un Espacio de Búsqueda
4. Clasificación Detallada de Problemas de Optimización
5. Formulación General y Soluciones Óptimas para NLP
6. Herramientas Matemáticas: Gradiente y Hessiana
7. Condiciones de Optimalidad para Optimización sin Restricciones
8. Convexidad en Problemas de Optimización
9. Métodos de Solución para Optimización sin Restricciones
10. Optimización de Caja Negra
11. Optimización en el Contexto del Aprendizaje Automático

Optimización de Caja Negra (Black-Box)

Definición

Se refiere a problemas donde **no se tiene información de los gradientes** (primera derivada) de la función objetivo. Solo se pueden obtener evaluaciones numéricas de la función (se le da una entrada \mathbf{x} y devuelve una salida $f(\mathbf{x})$).

Enfoque de Solución

El algoritmo de optimización trata la función objetivo como una "caja negra". Debe encontrar la solución óptima basándose únicamente en el muestreo de diferentes puntos de entrada y observando sus correspondientes valores de salida. Las **metaheurísticas**, como los algoritmos evolutivos, son comunes para este tipo de problemas.

Agenda

1. Terminología de los Problemas de Optimización
2. Tipos de Restricciones y Área Factible de Soluciones
3. Exploración y Explotación en un Espacio de Búsqueda
4. Clasificación Detallada de Problemas de Optimización
5. Formulación General y Soluciones Óptimas para NLP
6. Herramientas Matemáticas: Gradiente y Hessiana
7. Condiciones de Optimalidad para Optimización sin Restricciones
8. Convexidad en Problemas de Optimización
9. Métodos de Solución para Optimización sin Restricciones
10. Optimización de Caja Negra
11. Optimización en el Contexto del Aprendizaje Automático

Optimización en el Aprendizaje Automático

El Corazón del Aprendizaje

Muchos problemas de aprendizaje automático son, en esencia, problemas de optimización. Por ejemplo, el entrenamiento de una red neuronal implica **minimizar una función de error (o pérdida)** ajustando los pesos y sesgos de las neuronas.

Terminología Cruzada

- Entrenamiento \leftrightarrow Ajuste de modelo
- Función de pérdida \leftrightarrow Función objetivo
- Pesos, sesgos \leftrightarrow Variables de decisión
- Retropropagación \leftrightarrow Método basado en gradiente

Optimización en el Aprendizaje Automático

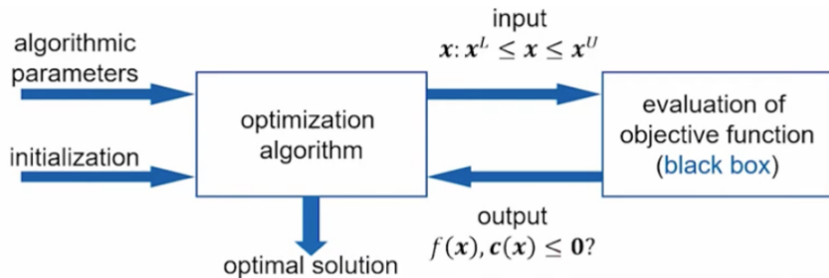


Figura 7: Entrenamiento de una red neuronal como un problema de optimización.