

# Optimización

## Optimización sin restricciones

Docente: Cristian Guarnizo Lemus

Somos Innovación Tecnológica con *Sentido Humano*

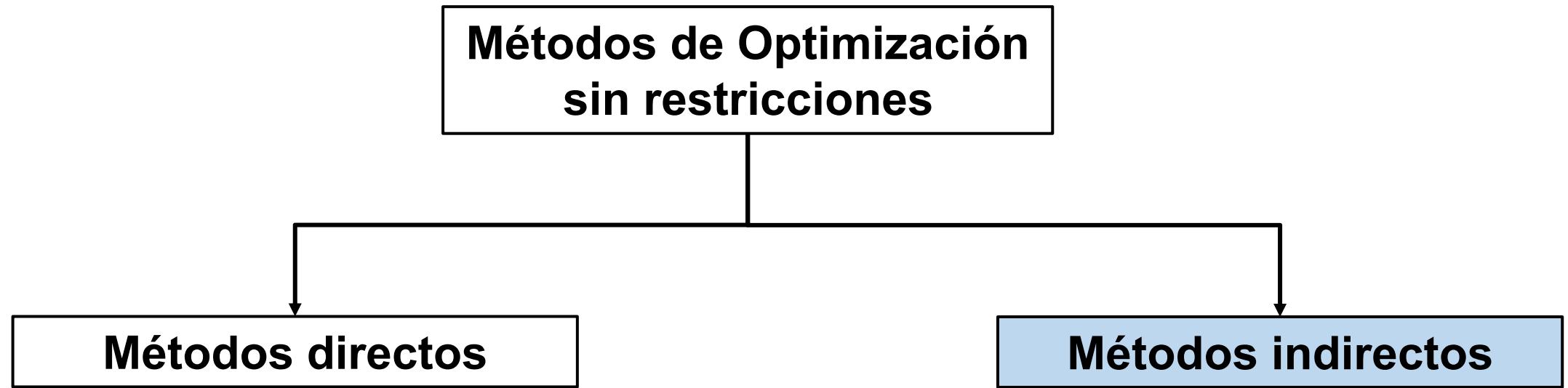


Alcaldía de Medellín

# Contenido

1. Métodos de solución para Optimización sin restricciones.
2. Búsqueda en una línea. (Condiciones de Armijo y Wolfe seleccionar paso)
3. Determinación de la dirección (Steepest, Conjugate, Newton)

# Métodos de solución para Optimización sin restricciones



# Métodos indirectos - Concepto

- Condiciones necesarias de primer orden

$$\nabla f(x) = \mathbf{0} \Leftrightarrow \begin{cases} \left. \frac{\partial f}{\partial x_1} \right|_x = 0 = g_1(x) \\ \left. \frac{\partial f}{\partial x_2} \right|_x = 0 = g_2(x) \\ \vdots \\ \left. \frac{\partial f}{\partial x_n} \right|_x = 0 = g_n(x) \end{cases} \quad \text{Sistema de ecuaciones no lineales}$$
$$g(x) = \mathbf{0}$$

- La solución optima es encontrada **solucionando el sistema de ecuaciones analíticamente o numéricamente.** (p.e. con el Método de Newton).
- Diferenciar y solucionar un sistema de ecuaciones es **difícil para sistemas complejos.**

# Métodos de solución para Optimización sin restricciones

## Métodos de Optimización sin restricciones

**Métodos directos**

**Métodos indirectos**

La solución optima se encuentra solucionando un sistema de ecuaciones:

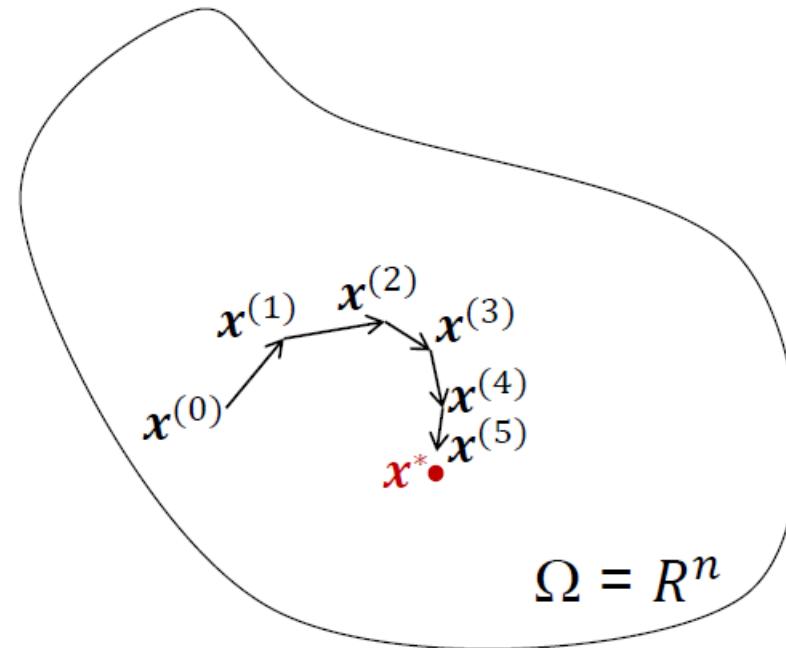
$$\nabla f(x) = \mathbf{0}$$

Analíticamente o numéricamente.

# Métodos directos - Concepto

Idea: Construir una secuencia convergente de  $\{x^{(k)}\}_{k=1}^{\infty}$ , que satisfaga las siguientes condiciones:

$$\exists \bar{k} \geq 0: f(x^{(k+1)}) < f(x^{(k)}) \quad \forall k > \bar{k} \quad \text{y} \quad \lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} = x^* \in R^n$$



# Métodos directos - Concepto

Idea: Construir una secuencia convergente de  $\{x^{(k)}\}_{k=1}^{\infty}$ , que satisfaga las siguientes condiciones:

$$\exists \bar{k} \geq 0: f(x^{(k+1)}) < f(x^{(k)}) \quad \forall k > \bar{k} \quad \text{y} \quad \lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} = x^* \in R^n$$

## Convergencia:

- **Lineal:** Sí existe una constante  $C \in (0,1)$ , tal que para un  $k$  suficientemente largo:

$$\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \leq C \|x^{(k)} - x^*\|$$

- **Orden P:** Sí existe una constante  $M > 0$ , tal que

$$\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \leq M \|x^{(k)} - x^*\|^p$$

- **Superlineal:** Sí existe una secuencia  $c_k$  convergente a cero.

$$\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \leq c_k \|x^{(k)} - x^*\|$$

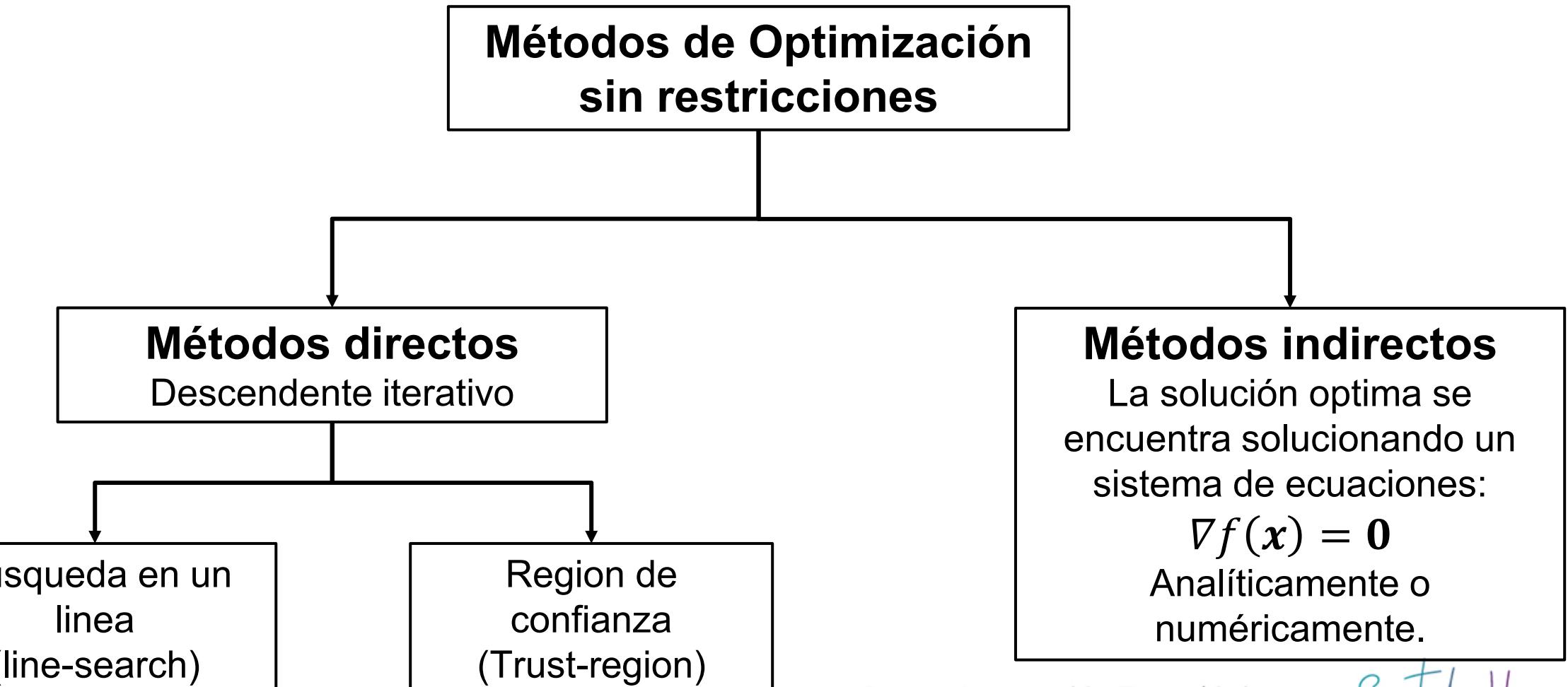
# Métodos de solución para Optimización sin restricciones

## Métodos de Optimización sin restricciones

**Métodos directos**  
La solución optima se encuentra mejorando la función objetivo por medio de **iteraciones descendentes**.

**Métodos indirectos**  
La solución optima se encuentra solucionando un sistema de ecuaciones:  
 $\nabla f(x) = \mathbf{0}$   
Analíticamente o numéricamente.

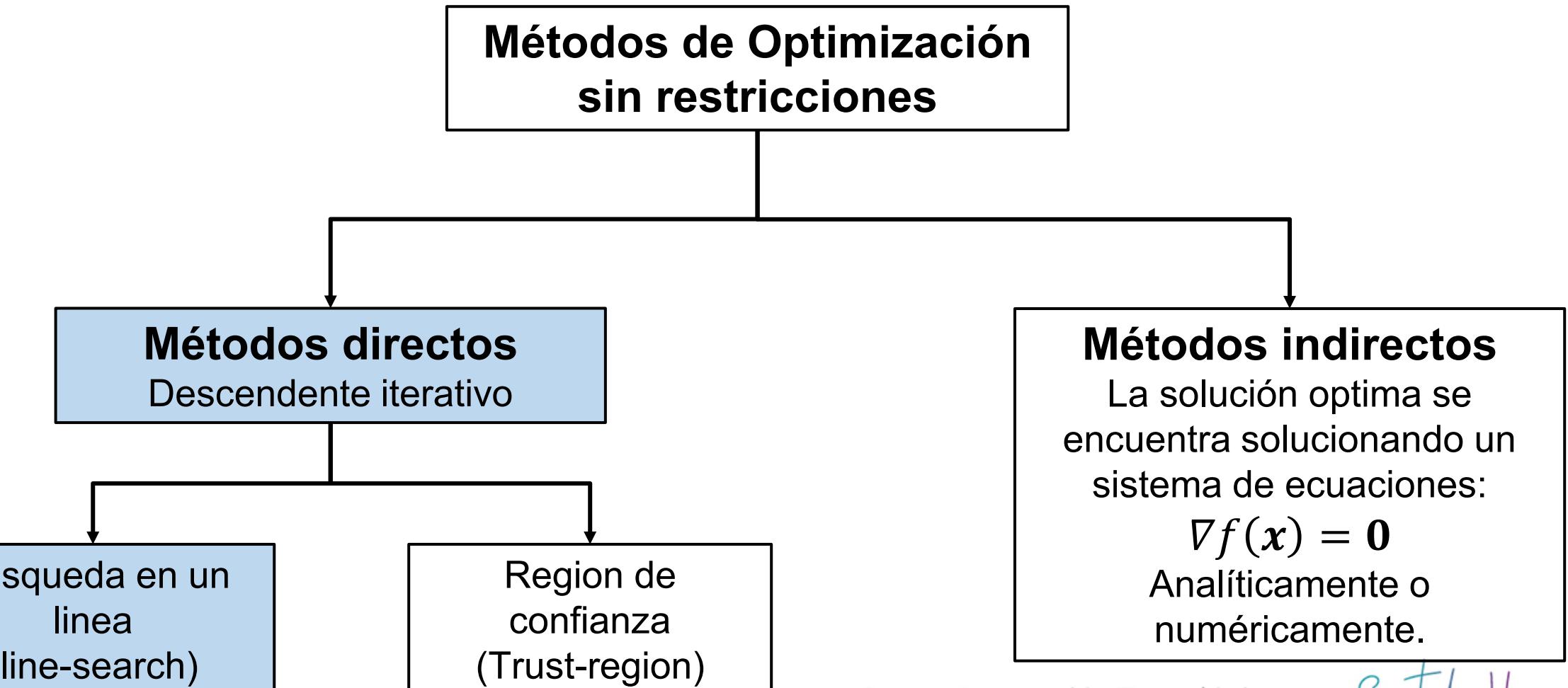
# Métodos de solución para Optimización sin restricciones



# Contenido

1. Métodos de solución para Optimización sin restricciones.
2. Búsqueda en una línea. (Condiciones de Armijo y Wolfe seleccionar paso)
3. Determinación de la dirección (Steepest, Conjugate, Newton's)

# Métodos de solución para Optimización sin restricciones



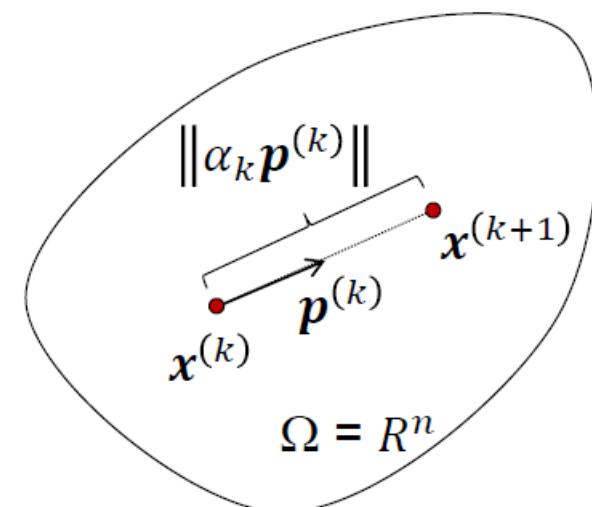
# Búsqueda en una línea

Definición (dirección descendente):

Un vector  $p$  es llamado dirección descendente en  $x^{(k)}$ , si  $\nabla f(x^{(k)})^T p < 0$  se mantiene.

Algoritmo básico (line-search):

1. Seleccionar ya dirección descendente,  $p^{(k)}$ , tal que  
$$\nabla f(x^{(k)})^T p^{(k)} < 0$$
2. Determinar el tamaño el paso  $\alpha_k$
3. Calcular  $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}$



Problemas abiertos:

1. Determinar la dirección del descendente  $p^{(k)}$ ?
2. Calcular el tamaño el paso  $\alpha_k$ .

# Calculo del paso $\alpha_k$

Algoritmo básico (line-search):

1. Definir una función de una dimensión sobre la dirección descendente  $p^{(k)}$

$$\phi(\alpha) = f(x^{(k)} + \alpha p^{(k)})$$

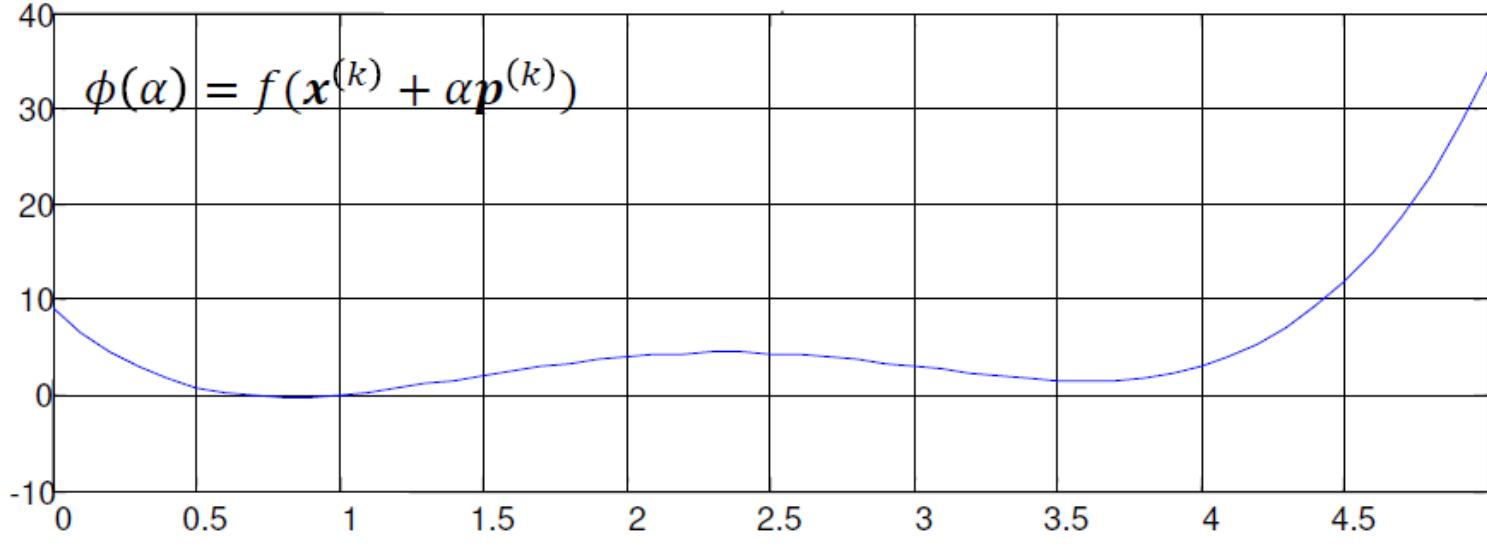
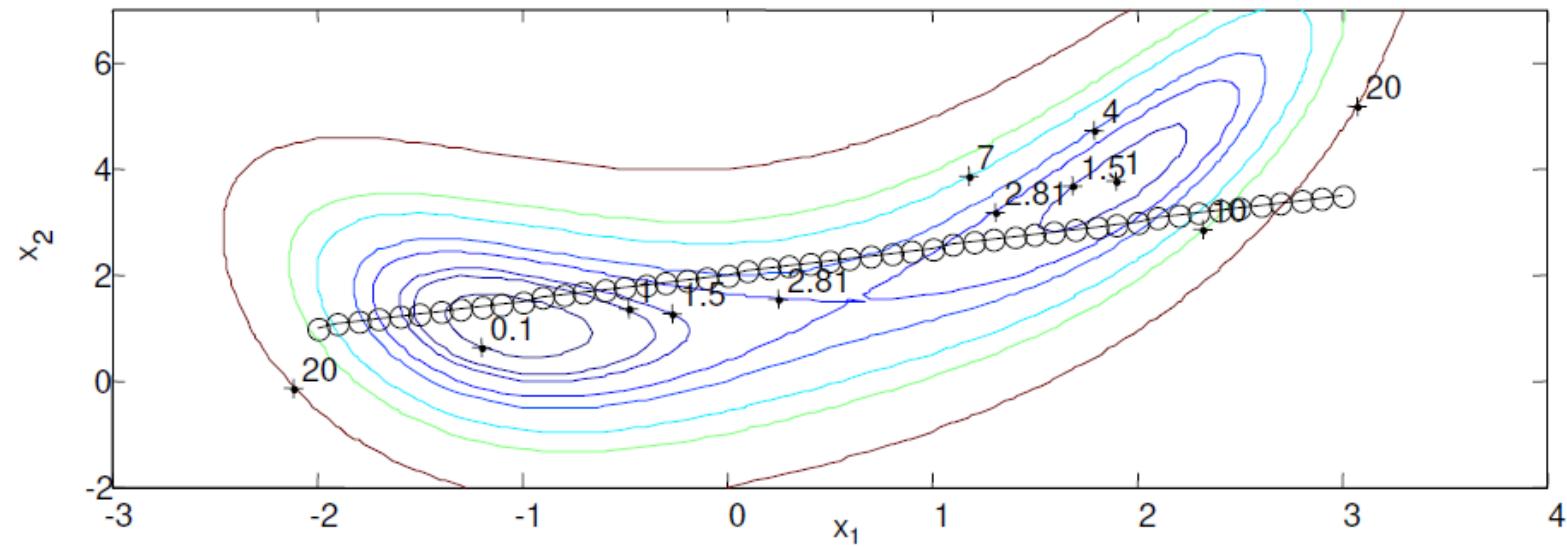
2. Solucionar el problema de minimización de una dimensión

$$\min_{\alpha > 0} \phi(\alpha)$$

Observaciones:

1. De manera ingenua sería ideal minimizar globalmente  $\phi(\alpha)$ . Generalmente, es muy costoso encontrar esta solución. No es necesariamente una buena idea buscar en una dimensión.
2. Se podría buscar alguna solución local. Pero esto es a menudo costoso (se necesita evaluar la función y/o gradientes en un numero de puntos).
3. Estrategias prácticas (también llamadas **LS no exacto**): encontrar  $\alpha$  tal que  $\nabla f(x^{(k+1)})$  se vuelva lo más posible pequeño con el esfuerzo mínimo.

# Estrategias de búsqueda en una línea

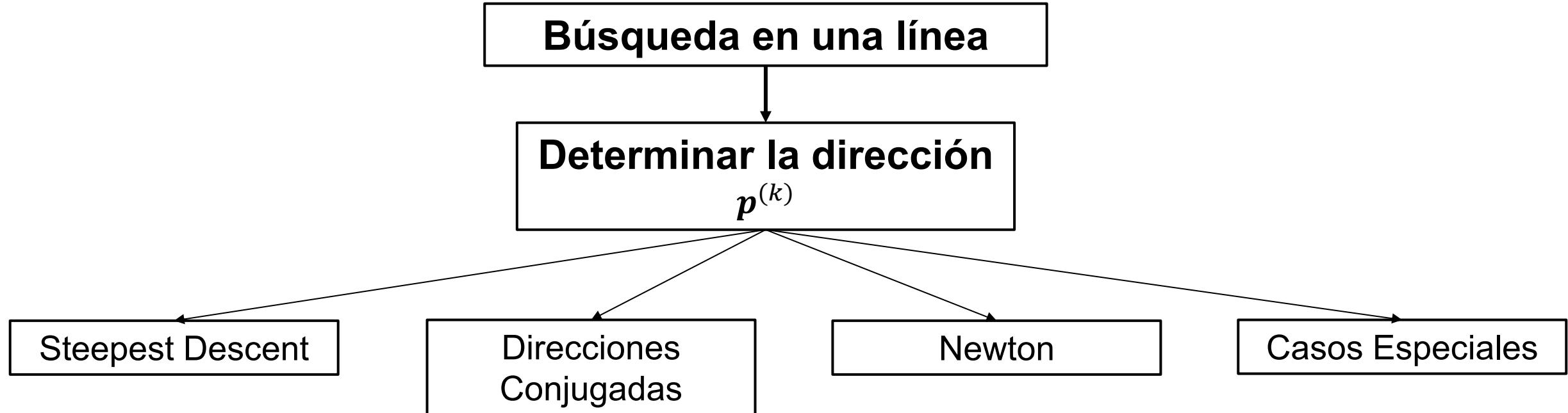


# Contenido

1. Métodos de solución para Optimización sin restricciones.
2. Búsqueda en una línea.
3. Determinación de la dirección (Steepest, Newton, Quasi-Newton)

# Determinación de la dirección

Los métodos de búsqueda en una línea difieren el uno del otro con respecto a la determinación de la dirección del descendente y el tamaño del paso.



Muchos métodos de gradiente usan matrices definidas positivas  $\mathbf{D}^{(k)}$  y calculan

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

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{D}^{(k)} \underline{\mathbf{p}^{(k)}}$$

# Steepest-Descent

Series de Taylor:  $f(\mathbf{x}^{(k)} + \alpha \mathbf{p}^{(k)}) = f(\mathbf{x}^{(k)}) + \alpha \nabla f(\mathbf{x}^{(k)})^T \mathbf{p}^{(k)} + O(\alpha^2)$

La razón del cambio de  $f$  en  $\mathbf{x}^{(k)}$  en la dirección  $\mathbf{p}^{(k)}$  es el coeficiente en expresión lineal

$$\nabla f(\mathbf{x}^{(k)})^T \mathbf{p}^{(k)}$$

La dirección unitaria con el mayor cambio es la solución del siguiente problema

$$\min_{\mathbf{p}^{(k)} \in R^n} \nabla f(\mathbf{x}^{(k)})^T \mathbf{p}^{(k)} \quad \text{s. t. } \|\mathbf{p}^{(k)}\| = 1$$

Note que  $\nabla f(\mathbf{x}^{(k)})^T \mathbf{p}^{(k)} = \|\nabla f(\mathbf{x}^{(k)})\| \|\mathbf{p}^{(k)}\| \cos(\theta)$

La solución del problema se alcanza para  $\cos(\theta) = -1 \Rightarrow \theta = \pi$

$$\Rightarrow \mathbf{p}^{(k)} = -\nabla f(\mathbf{x}^{(k)}) / \|\nabla f(\mathbf{x}^{(k)})\|$$

La selección de  $D^{(k)}$  es la matriz identidad  $I$ .

# Steepest-Descent

Algorithm:

choose  $x^{(0)}$

for  $k=0, 1, \dots$

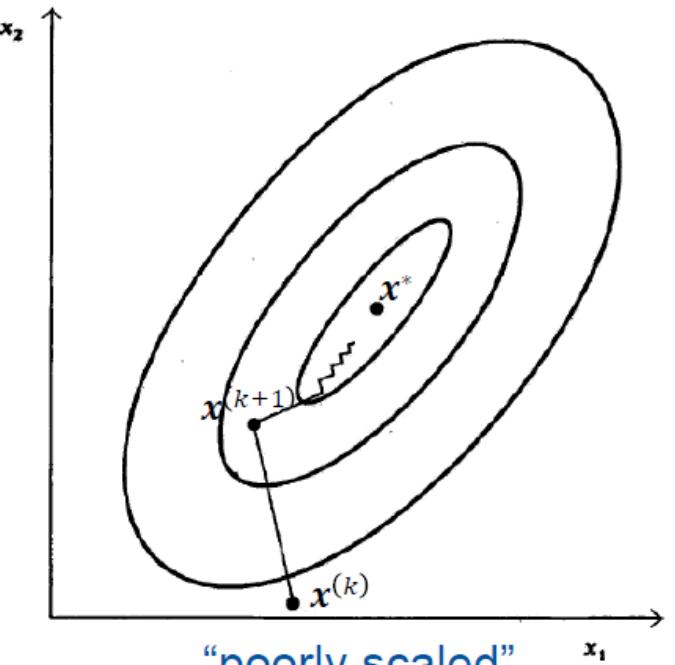
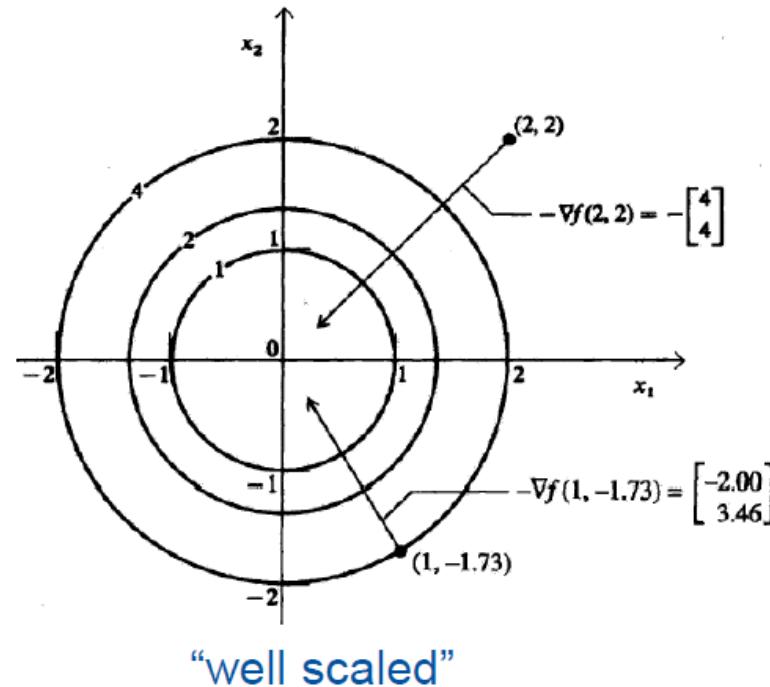
if  $\|\nabla f(x^{(k)})\| \leq \varepsilon$  stop, else

set  $p^{(k)} = -\nabla f(x^{(k)})$

determine the step length  $\alpha_k$  (e.g.  
using the Armijo rule)

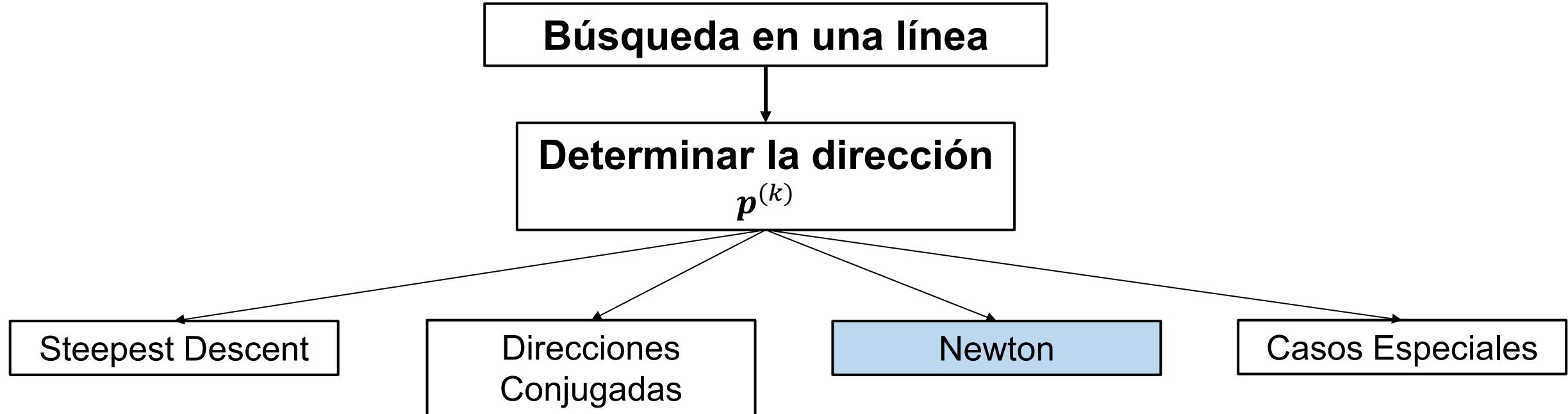
set  $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}$

end for



# Determinación de la dirección

Los métodos de búsqueda en una línea difieren el uno del otro con respecto a la determinación de la dirección del descendente y el tamaño del paso.



Muchos métodos de gradiente usan matrices definidas positivas  $\mathbf{D}^{(k)}$  y calculan

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

# Dirección del descendente de Newton

Aproximación cuadrática de  $f$  en  $\mathbf{x}^{(k+1)}$ :

$$m(\mathbf{x}^{(k+1)}) = f(\mathbf{x}^{(k)}) + \nabla f(\mathbf{x}^{(k)})^T (\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}) + (\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)})^T \nabla^2 f(\mathbf{x}^{(k)}) (\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)})$$

Primera condición necesaria para  $m$

$$\begin{aligned} 0 &= \nabla m(\mathbf{x}^{(k+1)}) = \nabla f(\mathbf{x}^{(k)}) + \nabla^2 f(\mathbf{x}^{(k)}) (\underline{\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}}) \Rightarrow -\nabla f(\mathbf{x}^{(k)}) = \nabla^2 f(\mathbf{x}^{(k)}) (\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k) \\ \Rightarrow \mathbf{x}^{(k+1)} &= \mathbf{x}^{(k)} - [\nabla^2 f(\mathbf{x}^{(k)})]^{-1} \nabla f(\mathbf{x}^{(k)}) \end{aligned}$$

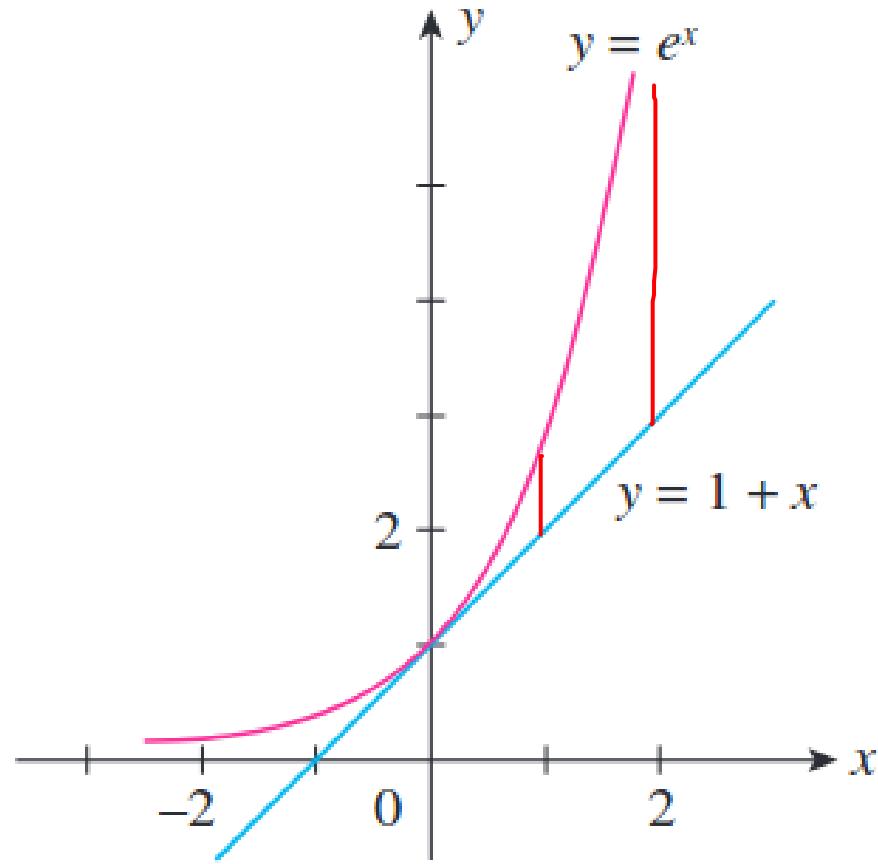


$$\Rightarrow \mathbf{p}^{(k)} = -[\nabla^2 f(\mathbf{x}^{(k)})]^{-1} \nabla f(\mathbf{x}^{(k)})$$

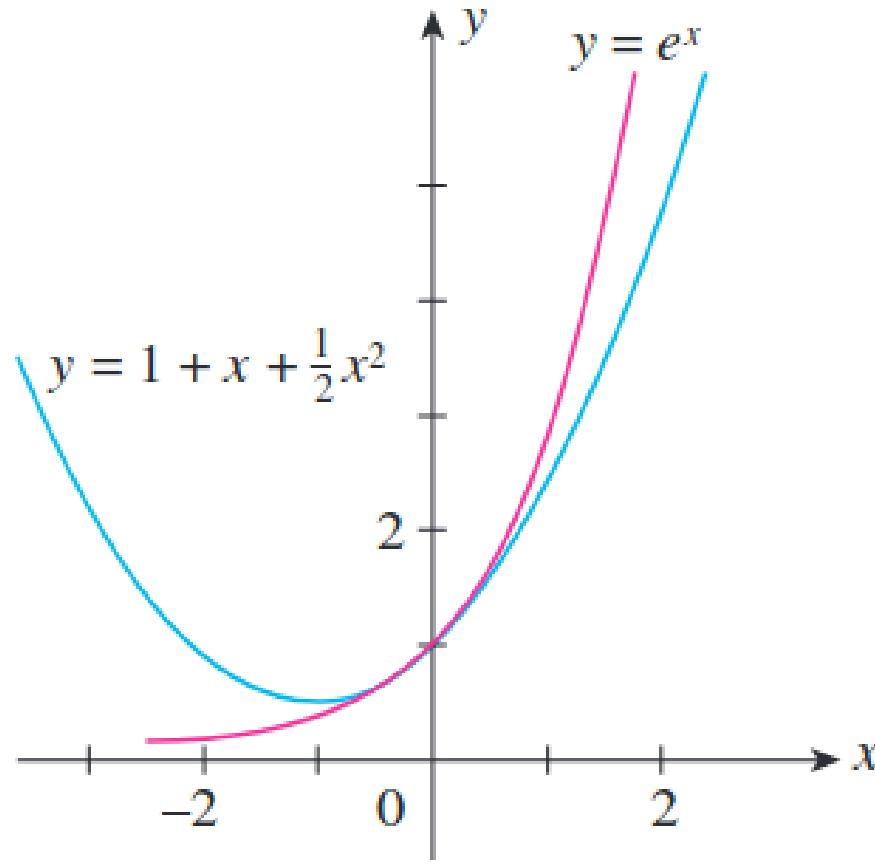
$$\Rightarrow \alpha_k = 1$$

Se selecciona  $\mathbf{D}^{(k)}$  como la inversa de la Hessiana.

# Dirección del descendente de Newton

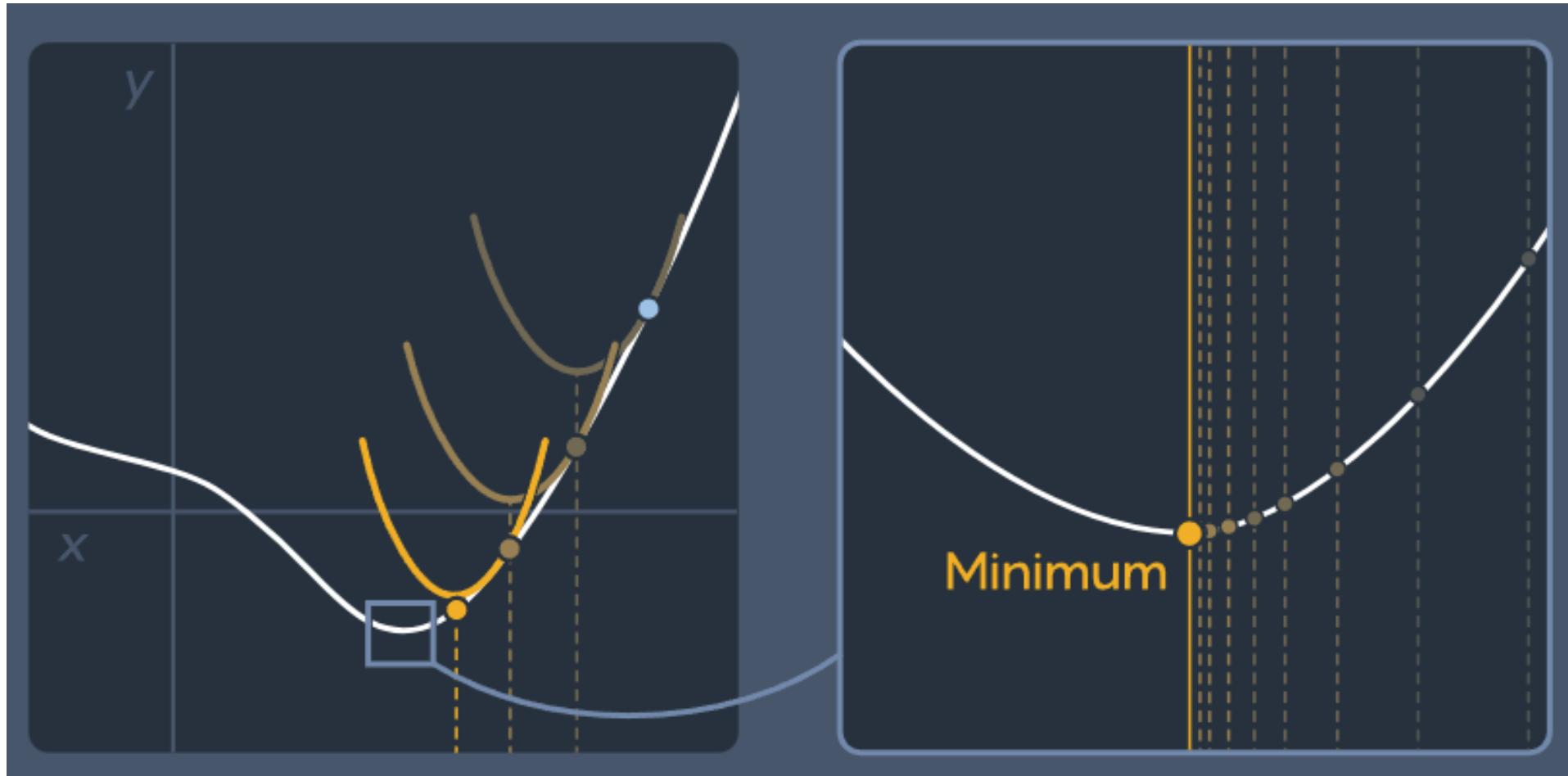


Serie Taylor primer orden



Serie Taylor segundo orden

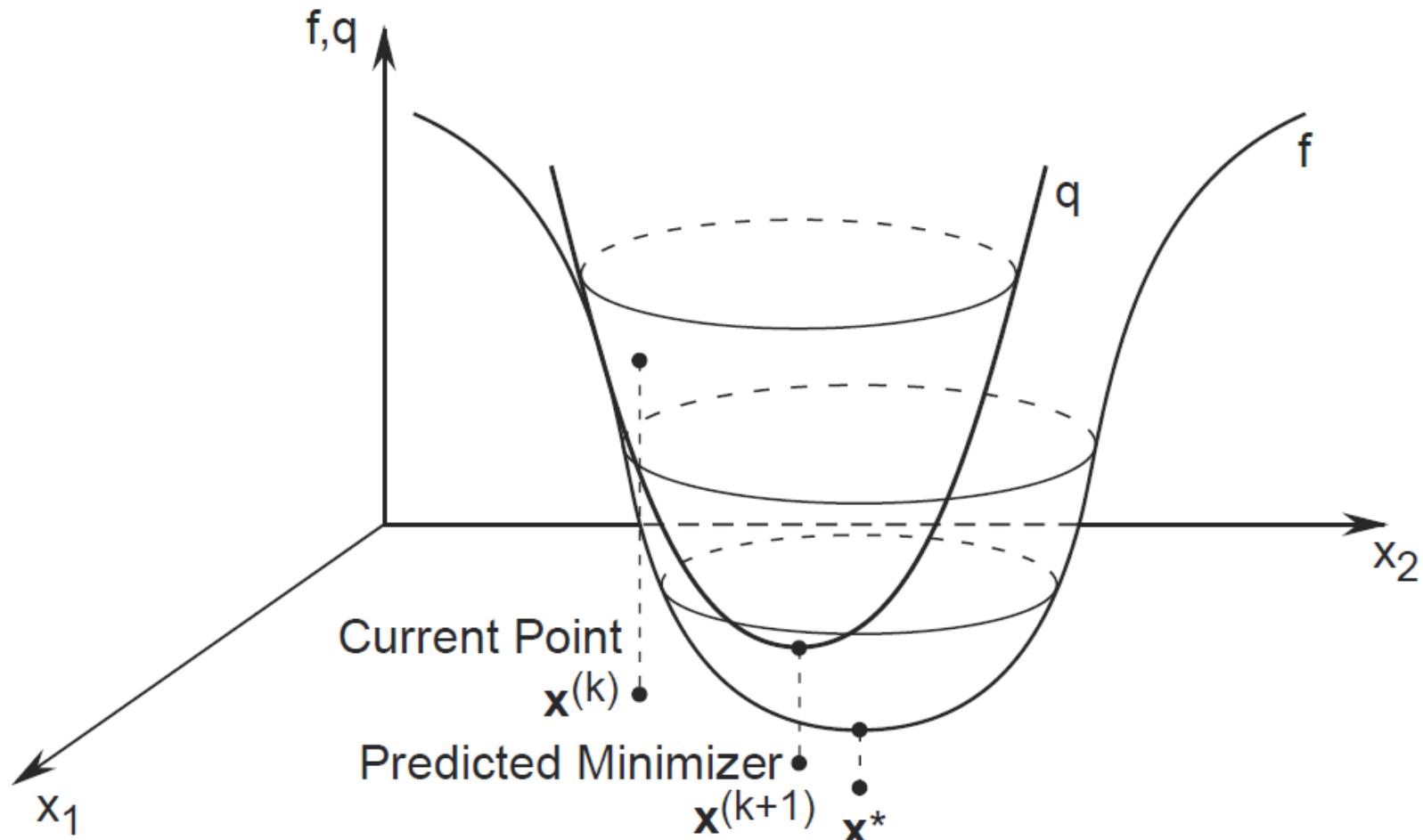
# Dirección del descendente de Newton



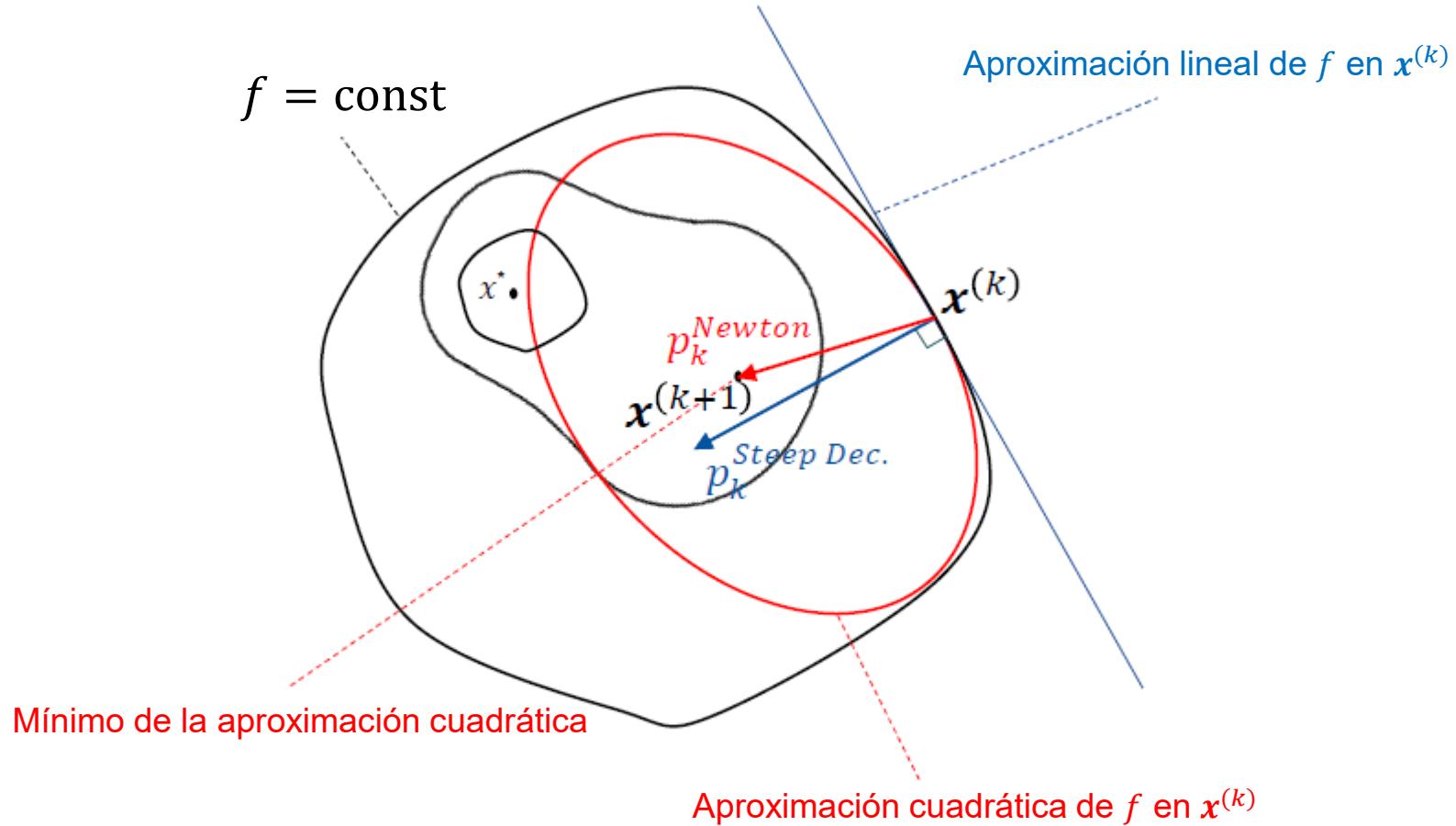
<https://www.quantamagazine.org/three-hundred-years-later-a-tool-from-isaac-newton-gets-an-update-20250324/>

Somos Innovación Tecnológica con *Sentido Humano*

# Dirección del descendente de Newton



# Dirección del descendente de Newton



# Método de Newton

Pseudo-Código:

Choose  $x^{(0)}$

FOR  $k = 0,1,2, \dots$

IF  $\|\nabla f(x^{(k)})\| \leq \varepsilon$  STOP, ELSE

SET  $p^{(k)} = -[\nabla^2 f(x^{(k)})]^{-1} \nabla f(x^{(k)})$

SET  $x^{(k+1)} = x^{(k)} + p^{(k)}$

END\_FOR

Ventajas:

- Localmente tiene convergencia cuadrática, si  $x^{(k)}$  es cercano a  $x^*$
- Si  $f$  es cuadrático, el algoritmo converge en una iteración.

Desventajas:

- Es muy costoso para muchas variables, por el calculo de la 2da derivada y la inversa. Es mucho mas costoso por iteración que el Steepest Descent.

# Método Quasi-Newton

Definiciones:  $f^{(k)} = f(\mathbf{x}^{(k)})$ ,  $\mathbf{g}^{(k)} := \nabla f(\mathbf{x}^{(k)})$  y  $\mathbf{H}^{(k)} := \nabla^2 f(\mathbf{x}^{(k)})$

Del método de Newton:

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{p}^{(k)}$$

$$[\nabla^2 f(\mathbf{x}^{(k)})] \mathbf{p}^{(k)} = -\nabla f(\mathbf{x}^{(k)}) \Rightarrow \mathbf{H}^{(k)} \mathbf{p}^{(k)} = -\mathbf{g}^{(k)}$$

Idea:

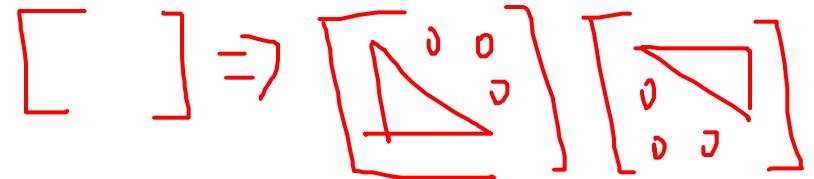
El sistema lineal  $\mathbf{H}^{(k)} \mathbf{p}^{(k)} = -\mathbf{g}^{(k)}$  se puede solucionar aproximadamente por un método iterativo.

Observaciones:

Factorizaciones como LU o Cholesky – costo computacional alto.

Ocurren errores grandes para problemas mal condicionados.

No se requiere la solución exacta.



The diagram shows a square matrix  $H$  on the left, followed by a red arrow pointing to the right. To the right of the arrow is a product of two matrices:  $L$  (lower triangular) and  $L^T$  (upper triangular). The matrix  $L$  has red diagonal elements and red zeros below the diagonal. The matrix  $L^T$  has red diagonal elements and red zeros above the diagonal.

# Método Quasi-Newton (2)

Idea: reducir la complejidad simplificando el cálculo de  $\mathbf{H}^{(k)}$  (Davidon):

- Reemplazar  $\mathbf{H}^{(k)}$  por una aproximación  $\mathbf{B}^{(k)}$ .
- En vez de calcular  $\mathbf{B}^{(k)}$ , buscamos una simple actualización usando la información de las últimas iteraciones.

Método:

- Considerar la aproximación cuadrática de  $f$  en  $\mathbf{x}^{(k)}$ ,  $m^{(k)}(\mathbf{p}) = f^{(k)} + [\mathbf{g}^{(k)}]^\top \mathbf{p} + \frac{1}{2} \mathbf{p}^\top \mathbf{B}^{(k)} \mathbf{p}$ .
- Condición de optimalidad de primer orden:  $\mathbf{p}^{(k)} = -\mathbf{B}^{(k)}^{-1} \mathbf{g}^{(k)}$
- Por convexidad es necesaria y suficiente para la minimización de  $m^{(k)}(\mathbf{p})$ .
- Construir la aproximación cuadrática en  $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{p}^{(k)}$

$$m^{(k+1)}(\mathbf{p}) = f^{(k+1)} + [\mathbf{g}^{(k+1)}]^\top \mathbf{p} + \frac{1}{2} \mathbf{p}^\top \mathbf{B}^{(k+1)} \mathbf{p}$$

- Que **condiciones** debe satisfacer  $\mathbf{B}^{(k+1)}$ ?

# Método Quasi-Newton (3)

Condiciones de  $B^{(k+1)}$ :

1. Gradiente de  $m^{(k+1)}$  en  $x^{(k+1)}$  debe ser igual al gradiente de  $f$ .

$\nabla m^{(k+1)}(\mathbf{p}) = \mathbf{g}^{(k+1)} + \mathbf{B}^{(k+1)}\mathbf{p}$	
At $x = x^{(k+1)}, \mathbf{p} = 0$ Queremos $\nabla m^{(k+1)}(0) = \mathbf{g}^{(k+1)}$	At $x = x^{(k)}, \mathbf{p} = -\alpha_k \mathbf{p}^{(k)}$ Queremos $\nabla m^{(k+1)}(-\alpha_k \mathbf{p}^{(k)}) = \mathbf{g}^{(k)}$
	$\Rightarrow \mathbf{g}^{(k+1)} - \alpha_k \mathbf{B}^{(k+1)} \mathbf{p}^{(k)} = \mathbf{g}^{(k)}$ $\Rightarrow \mathbf{B}^{(k+1)} \underbrace{\alpha_k \mathbf{p}^{(k)}}_{=x^{(k+1)} - x^{(k)}} = \mathbf{g}^{(k+1)} - \mathbf{g}^{(k)}$ $\Rightarrow \boxed{\mathbf{B}^{(k+1)} \mathbf{s}^{(k)} = \mathbf{y}^{(k)}}, \text{ donde } \mathbf{s}^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)} \text{ y } \mathbf{y}^{(k)} = \mathbf{g}^{(k+1)} - \mathbf{g}^{(k)}$
Satisface automáticamente	

2. Debido que  $\mathbf{B}^{(k+1)}$  es simétrica definida positiva:  $\mathbf{s}^{(k)^\top} \mathbf{B}^{(k+1)} \mathbf{s}^{(k)} > 0, \forall \mathbf{s}^{(k)} \neq \mathbf{0} \Rightarrow \mathbf{s}^{(k)^\top} \mathbf{y}^{(k)} > 0$

# Método Quasi-Newton (4)

Condiciones de  $\mathbf{B}^{(k+1)}$ :

$\mathbf{B}^{(k+1)} \mathbf{s}^{(k)} = \mathbf{y}^{(k)}$  gives many solutions for  $\mathbf{B}^{(k+1)}$

- Unique solution:  $\mathbf{B}^{(k+1)}$  should be close to  $\mathbf{B}^{(k)}$

$$\begin{aligned} & \min_{\mathbf{B}} \|\mathbf{B} - \mathbf{B}^{(k)}\|_W && \leftarrow \text{weighted Frobenius-Norm} \\ & \text{s. t. } \mathbf{B}^T = \mathbf{B} && \|\mathbf{A}\|_W = \left\| W^{1/2} \mathbf{A} W^{1/2} \right\|_F, \text{ for any } W \text{ s.t. } W \mathbf{y}_k = \mathbf{s}_k \\ & \mathbf{B} \mathbf{s}^{(k)} = \mathbf{y}^{(k)} && \|\cdot\|_F^2 : R^{n \times n} \rightarrow R_{\geq 0}, \|\mathbf{C}\|_F^2 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n c_{ij}^2 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \mathbf{B}^{(k+1)} = \left( \mathbf{I} - \frac{1}{\mathbf{y}^{(k)T} \mathbf{s}^{(k)}} \mathbf{y}^{(k)} \mathbf{s}^{(k)T} \right) \mathbf{B}^{(k)} \left( \mathbf{I} - \frac{1}{\mathbf{y}^{(k)T} \mathbf{s}^{(k)}} \mathbf{s}^{(k)} \mathbf{y}^{(k)T} \right) + \frac{1}{\mathbf{y}^{(k)T} \mathbf{s}^{(k)}} \mathbf{y}^{(k)} \mathbf{y}^{(k)T} \quad \rightarrow \text{DFP formula}$$

$$\Rightarrow \mathbf{B}^{(k+1)-1} = \left( \mathbf{I} - \frac{1}{\mathbf{y}^{(k)T} \mathbf{s}^{(k)}} \mathbf{s}^{(k)} \mathbf{y}^{(k)T} \right) \mathbf{B}^{(k)-1} \left( \mathbf{I} - \frac{1}{\mathbf{y}^{(k)T} \mathbf{s}^{(k)}} \mathbf{y}^{(k)} \mathbf{s}^{(k)T} \right) + \frac{1}{\mathbf{y}^{(k)T} \mathbf{s}^{(k)}} \mathbf{s}^{(k)} \mathbf{s}^{(k)T} \quad \rightarrow \text{BFGS formula}$$

# Método Quasi-Newton (5)

$$x_{k+1} = x_k + \Delta x_k \quad y_k = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)$$

Método	$B_{k+1} =$	$H_{k+1} = B_{k+1}^{-1} =$
BFGS	$B_k + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T \Delta x_k} - \frac{B_k \Delta x_k (B_k \Delta x_k)^T}{\Delta x_k^T B_k \Delta x_k}$	$\left( I - \frac{\Delta x_k y_k^T}{y_k^T \Delta x_k} \right) H_k \left( I - \frac{y_k \Delta x_k^T}{y_k^T \Delta x_k} \right) + \frac{\Delta x_k \Delta x_k^T}{y_k^T \Delta x_k}$
Broyden	$B_k + \frac{y_k - B_k \Delta x_k}{\Delta x_k^T \Delta x_k} \Delta x_k^T$	$H_k + \frac{(\Delta x_k - H_k y_k) \Delta x_k^T H_k}{\Delta x_k^T H_k y_k}$
Familia Broyden	$(1 - \varphi_k) B_{k+1}^{\text{BFGS}} + \varphi_k B_{k+1}^{\text{DFP}}, \quad \varphi \in [0, 1]$	
DFP	$\left( I - \frac{y_k \Delta x_k^T}{y_k^T \Delta x_k} \right) B_k \left( I - \frac{\Delta x_k y_k^T}{y_k^T \Delta x_k} \right) + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T \Delta x_k}$	$H_k + \frac{\Delta x_k \Delta x_k^T}{\Delta x_k^T y_k} - \frac{H_k y_k y_k^T H_k}{y_k^T H_k y_k}$
SR1	$B_k + \frac{(y_k - B_k \Delta x_k)(y_k - B_k \Delta x_k)^T}{(y_k - B_k \Delta x_k)^T \Delta x_k}$	$H_k + \frac{(\Delta x_k - H_k y_k)(\Delta x_k - H_k y_k)^T}{(\Delta x_k - H_k y_k)^T y_k}$

# Método Quasi-Newton (6)

Pseudo-Código:

Choose  $x^{(0)}$

$$B^{(0)} = I, \quad g^{(0)} = \nabla f(x^{(0)})$$

$$x^{(1)} = x^{(0)} - 0.01g^{(0)}/\|g^{(0)}\|$$

$$g^{(1)} = \nabla f(x^{(1)})$$

$$s^{(1)} = x^{(1)} - x^{(0)}, \quad s^{(1)} = g^{(1)} - g^{(0)}$$

FOR  $k = 2,3,4, \dots$

IF  $\|\nabla f(x^{(k)})\| \leq \varepsilon$  STOP, ELSE

SET  $B^{(k)}$

SET  $p^{(k)} = -[B^{(k)}]^{-1} g^{(k)}$

SET  $x^{(k+1)} = x^{(k)} + p^{(k)}$

END\_FOR

Ventajas:

- $B^{(k)}$  es definido positivo.

# Referencias

- Basado en el curso “Applied Numerical Optimization” por el profesor Alexander Mitsos.
- Nocedal J. Wright S. J. Numerical Optimization, 2nd Edition, Springer, 2006.
- Three Hundred Years Later, a Tool from Isaac Newton Gets an Update. Algorithms. Quanta Magazine. 2025.



Institución  
**Universitaria**  
Reacreditada en Alta Calidad

*¡Gracias!*

Somos Innovación Tecnológica con *Sentido Humano*



Alcaldía de Medellín