Módulo 4 : Técnicas computacionales avanzadas para modelar fenómenos sociales Concentración en Economía Aplicada y Ciencia de Datos ITESM

20 de septiembre de 2022



# Todxs optimizamos



- La optimización es una herramienta importante en las ciencias de la decisión y en el análisis de sistemas físicos.
- Primero debemos identificar un objetivo, esto es una medida cuantitativa del desempeño del sistema bajo estudio.
- El objetivo depende de ciertas características del sistema, llamadas variables.
- Con frecuencia, las variables están **restringidas** (*constrained*) en alguna manera.

- El proceso de identificar el objetivo, las variables y las restricciones para un problema dado, se le conoce como **modelación**.
- Una vez que se ha formulado el modelo, podemos utilizar un algoritmo optimización para encontrar su solución.
- No hay un algoritmo de optimización universal: hay una colección de algoritmos, cada uno de los cuales se adapta a un tipo particular de problema de optimización.

- Después de aplicar un algoritmo de optimización al modelo, debemos ser capaces de reconocer si ha sido exitoso en su tarea de encontrar una solución.
- En algunos casos hay expresiones matemáticas conocidas como condiciones de optimalidad para cerciorarse que el conjunto actual de variables es la solución del problema.
- El modelo puede ser mejorado al aplicar técnicas como el análisis de sensibilidad que revela la sensibilidad de la solución a los cambios en el modelo y los datos.

#### Formulación matemática

En términos formales, la optimización es la minimización o maximización de una función sujeta a restricciones en sus variables. En notación :

- x es el vector de variables, también conocido como parámetros.
- f es la función objetivo, una función (escalar¹) de x que queremos maximizar o minimizar.
- $c_i$  son funciones de restricción, que son funciones escalares de x que definen ciertas ecuaciones y desigualdades que el vector x debe satisfacer.

Usando esta notación, el problema de optimización puede ser escrito como:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad \text{sujeto a} \quad \begin{aligned} c_i(x) &= 0, \quad i \in \mathcal{E} \\ c_i(x) &\geq 0, \quad i \in \mathcal{I} \end{aligned} \tag{1}$$

donde  $\mathcal{E}$  y  $\mathcal{I}$  son conjuntos de índices para restricciones de igualdad y desigualdad.



 $<sup>^1</sup>$ Es decir, una función que va de  $\mathbb{R}^n$  a  $\mathbb{R}$ 

# Ejemplo

Considere el siguiente problema,

mín 
$$(x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2$$
 sujeto a  $\begin{cases} x_1^2 - x_2 \ge 0, \\ x_1 + x_2 \ge 2. \end{cases}$  (2)

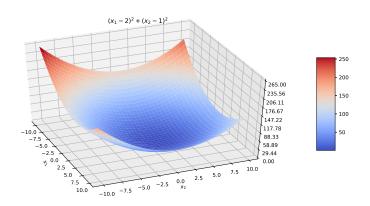
Podemos escribir este problema en la forma (1) al definir

$$f(x) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2, \qquad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

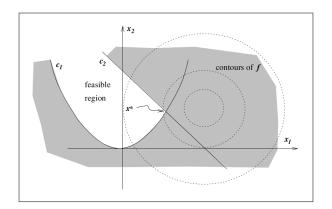
$$c(x) = \begin{bmatrix} c_1(x) \\ c_2(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x_1^2 + x_2 \\ -x_1 - x_2 + 2 \end{bmatrix}, \quad \mathcal{I} = \{1, 2\}, \mathcal{E} = \emptyset$$

(ロ) (部) (注) (注) (注) の(○)

# Conozcamos la función objetivo



# Contorno de la función objetivo



- La *región factible* es el conjunto de puntos que satisfacen todas las restricciones.
- El punto  $x^*$  es la solución al problema.

#### Maximización

Un problema de maximización de una función f(x) puede ser rescrito de acuerdo al modelo (1) como :

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} -f(x) \quad \text{sujeto a} \quad \begin{aligned} c_i(x) &= 0, \quad i \in \mathcal{E} \\ c_i(x) &\geq 0, \quad i \in \mathcal{I} \end{aligned} \tag{3}$$



# Optimización discreta y continua

- Los problemas de optimización discreta pueden contener variables enteras, binarias y objetos variables más abstractos, como permutaciones de un conjunto ordenado. Ejemplos:
  - ► TSP (Travelling salesman problem).
- La característica que define a los problemas de optimización discreta es que x pertenece a un conjunto finito y numerable.
- Por su parte, el conjunto factible para los problemas de optimización continua es infinito no numerable, como cuando los componentes de x pueden ser números reales.

# Optimización restringida y no restringida

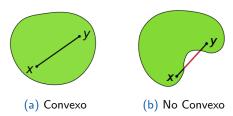
- En los problemas de *optimización no restringida* tenemos que en (1),  $\mathcal{E} = \mathcal{I} = \emptyset$ .
- Este tipo de problemas surgen también como problemas de optimización restringida, en los que las restricciones son reemplazadas por términos de penalización agregados a la función objetivo.
- Los problemas de optimización restringida surgen de modelos en los que las restricciones tienen un rol importante, como por ejemplo la restricción presupuestaria en el problema de consumidor.

# Programación lineal y no lineal

- Cuando la función objetivo y todas las restricciones son funciones lineales de x, el problema se le conoce como de *programación lineal*.
- Los problemas de *programación no lineal* son aquellos en los que al menos una restricción o la función objetivo son no lineales.

#### Convexidad

- El término convexo puede aplicarse tanto a conjuntos como a funciones.
- Un conjunto  $S \in \mathbb{R}^n$  es un *conjunto convexo* si podemos trazar una línea que conecte a dos puntos en S y que se encuentre por completo en dentro de S.



• Formalmente, para cualquier dos puntos  $x \in S$  y  $y \in S$ , tenemos  $\alpha x + (1 - \alpha)y \in S$  para todo  $\alpha \in [0, 1]$ 

4 □ ▶ 4 □ ▶ 4 Ē ▶ 4 Ē ▶ ₹ ₹ У)Q(\*

20 de septiembre de 2022

15/52

#### Convexidad

 La función f es una función convexa si su dominio S es un conjunto convexo y si para cualquier dos puntos x y y en S, se satisface la siguiente propiedad:

$$f(\alpha x + (1 - \alpha)y) \le \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y)$$
, para todo  $\alpha \in [0, 1]$  (4)

- Decimos que f es *estrictamente convexa* si las desigualdades en (4) es estricta si  $x \neq y$  y  $\alpha$  está en el intervalo abierto (0,1).
- Una función f se dice que es *concava* si -f es convexa.

16/52

TESM) 20 de septiembre de 2022

# Algoritmos de Optimización

- Los algoritmos de optimización son iterativos.
- Estos inician con un valor inicial de la variable x y generan una secuencia de estimaciones mejoradas (llamadas *iteraciones*) hasta que terminen, con suerte, en una solución.
- La estrategia utilizada para pasar de una iteración a la siguiente es lo que distingue a los algoritmos entre sí.
- Algunos algoritmos acumulan información recopilada en iteraciones anteriores, mientras que otros usan solo información local obtenida en el punto actual.

# Algoritmos de Optimización

Los algoritmos de optimización deben poseer las siguientes propiedades.

- Robustez: Deben tener un buen desempeño en una amplia variedad de problemas en su tipo, para todos los valores razonables del punto de inicio.
- **Eficiencia**: No deben requerir un excesivo uso de tiempo de cómputo o almacenamiento.
- Precisión: Deben ser capaces de encontrar una solución con precisión, sin ser demasiado sensible a los errores en los datos o a los errores de redondeo aritmético.

## ¿Qué es una solución?

Cuando minimizamos f, deseamos encontrar un minimizador global , un punto donde la función alcanza su valor mínimo. Una definición formal es la siguiente:

#### Minimizador global

Un punto  $x^*$  es un *minimizador global* si  $f(x^*) \le f(x)$  para todo x, donde x ranges over all  $\mathbb{R}^n$ .

El minizador global puede ser dificil de encontrar porque nuestro conocimiento de f es usualmente sólo local.

En general, encontrar un punto (maximizador o minimizador) global es computacionalmente intratable(Neumaier, 2004).

En tal caso, nos conformaremos con encontrar óptimos locales.

(ITESM) 20 de septiembre de 2022 19/52

### ¿Qué es una solución?

La mayoría de los algoritmos son capaces de encontrar un minimizador local, el cual es un punto que alcanza el valor más pequeño de f en una vecindad. Formalmente:

#### Minimizador local (débil)

Un punto  $x^*$  es un *minimizador local* si hay una vecindad  $\mathcal{N}$  de  $x^*$  tal que  $f(x^*) \leq f(x)$  para todo  $x \in \mathcal{N}$ .

(Una vecindad de  $x^*$  es un conjunto abierto que contiene a  $x^*$ )
Un punto que satisface esta definición se le denomina un minimizador local débil.

## ¿Qué es una solución?

Un minimizador local estricto es aquel que

#### Minimizador local (estricto)

Un punto  $x^*$  es un *minimizador local estricto* si hay una vecindad  $\mathcal{N}$  de  $x^*$  tal que  $f(x^*) < f(x)$  para todo  $x \in \mathcal{N}$  con  $x \neq x^*$ .

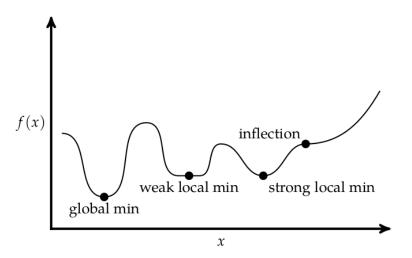


Figura: Tomado de Kochenderfer and Wheeler (2019)

22 / 52

# Condiciones para mínimos locales (en funciones univariadas)

#### Asumimos que:

- La función objetivo es univariada y diferenciable.
- No hay restricciones.

Se garantiza que un punto es un mínimo local estricto si su primer derivada es igual a cero y su segunda derivada es positiva<sup>2</sup>

- $f'(x^*) = 0$
- $f''(x^*) > 0$

(ITESM) 20 de septiembre de 2022

23 / 52

#### Condiciones necesarias de mínimos locales

Un punto es un mínimo local si su primera derivada es igual a cero y la segunda derivada es no negativa:

- $f'(x^*) = 0$ , es la condición necesaria de primer orden (FONC)<sup>3</sup>.
- $f''(x^*) \ge 0$ , es la condición necesaria de segundo orden (SONC)

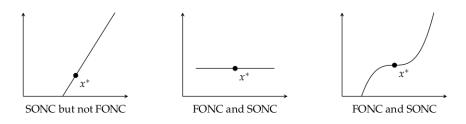
Estas condiciones se denominan *necesarias* porque todos los mínimos locales las cumplen.

(ITESM) 20 de septiembre de 2022 24 / 52

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Un punto que satisface la condición necesaria de primer orden se le denomina *punto* estacionario

#### Condiciones necesarias de mínimos locales

Desafortunadamente, no todos los puntos con primera derivada y segunda derivada igual a cero son mínimos locales, como se muestra a continuación:



# Caso Multivariado. Repaso de Álgebra Lineal

Dado un vector  $x \in \mathbb{R}^n$ , usamos  $x_i$  para denotar a la i-ésima entrada. Se asume que x es un vector columna:

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

La transpuesta de x, denotada como  $x^T$  es un vector fila:

$$x = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \dots & x_n \end{bmatrix}$$

Usamos  $x \ge 0$  para indicar que todas las entradas son no negativas, esto es,  $x_i \ge 0$  para todo  $i = 1, 2, \dots, n$ , mientras que x > 0 indica  $x_i > 0$  para todo  $i = 1, 2, \dots, n$ .

Dados  $x \in \mathbb{R}^n$  y  $y \in \mathbb{R}^n$ , el producto punto es  $x^T y = \sum_{i=1}^n x_i y_i$ .

◆ロト ◆個ト ◆意ト ◆意ト · 意 · からぐ

26 / 52

(ITESM) 20 de septiembre de 2022

# Caso Multivariado. Repaso de Álgebra Lineal

- Dada una matriz  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ , sus entradas las especificamos con los subíndices i, j, es decir,  $A_{ii}$ , para i = 1, 2, ..., m y j = 1, 2, ..., n.
- La transpuesta de A, denotada como  $A^T$ , es una matriz  $n \times m$  cuyos componentes son  $A_{ii}$ .
- Se dice que la matriz A es cuadrada si m = n.
- Una matriz es simétrica si  $A = A^T$ .

# Caso Multivariado. Repaso de Álgebra Lineal

Una matriz cuadrada A es *positiva definida* si hay un escalar positivo lpha tal que

$$x^T A x \ge \alpha x^T x$$
, para todo  $x \in \mathbb{R}^n$ 

Es positiva semidefinida si

$$x^T A x \ge 0$$
, para todo  $x \in \mathbb{R}^n$ 

Podemos reconocer que una matriz simétrica es positiva definida si todos sus eigenvalores son positivos.

## Eigenvectores y eigenvalores

Un vector columna  $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$  es un eigenvector de una matriz  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  si se cumple la siguiente expresión para un escalar  $\lambda$ :

$$A\bar{x} = \lambda \bar{x}$$

el escalar  $\lambda$  es llamado eigenvalor.

#### Polinomio característico

El polinomio característico de una matriz  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  es el polinomio de grado n en  $\lambda$  obtenido de expandir  $\det(A - \lambda I)$ 

Note que este es un polinomio de grado n siempre tiene n raíces (ya sea repetidas o complejas).

Los eigenvalores son las n raíces del polinomio característico de cualquier matriz  $n \times n$ .

#### Observación

El polinimio característico  $f(\lambda)$  de una matriz  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  es un polinomio en  $\lambda$  que toma la siguiente forma, donde  $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$  son eigenvalores de A:

$$\det(A - \lambda I) = (\lambda_1 - \lambda)(\lambda_2 - \lambda) \dots (\lambda_n - \lambda)$$

**◆□▶◆□▶◆■▶◆■▶ ■ かくで** 

## Eigenvectores y eigenvalores: ejemplo

De esta forma, los eigenvalores y eigenvectores de una matriz A pueden calcularse al expandir  $\det(A - \lambda I)$ , igualar a cero y resolver para  $\lambda$ .

Considera la siguiente matriz :

$$B = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}$$

La matriz  $B - \lambda I$  puede ser escrita como:

$$B - \lambda I = \begin{bmatrix} 1 - \lambda & 2 \\ 2 & 1 - \lambda \end{bmatrix}$$

El determinante  $det(B - \lambda I)$  es igual a :

$$det(B - \lambda I) = (1 - \lambda)(1 - \lambda) - 2 * 2$$
$$= (1 - \lambda)^2 - 4$$
$$= \lambda^2 - 2\lambda - 3$$

◆□▶ ◆□▶ ◆ 壹▶ ◆ 壹 ▶ ○ 壹 ○ 夕へで

## Eigenvectores y eigenvalores: ejemplo

La expresión  $\lambda^2 - 2\lambda - 3$  puede ser reescrita como  $(3 - \lambda)(-1 - \lambda)$ . Al igualar esta expresión a cero,

$$(3-\lambda)(-1-\lambda)=0$$

tenemos que los eigenvalores (las raices del polinomio) son 3 y -1.

## Derivadas en múltiples dimensiones: Gradiente

- El gradiente es la generalización de la derivada en funciones multivariadas.
- Captura la pendiente local de la función, permitiéndonos predecir el efecto de dar un pequeño paso desde un punto en cualquier dirección.
- El gradiente apunta en la dirección del ascenso más pronunciado del hiperplano tangente.

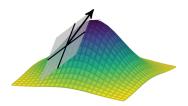


Figura: Tomado de Kochenderfer and Wheeler (2019)

# Derivadas en múltiples dimensiones: Gradiente

El gradiente de f en  $\mathbf{x}$  es denotado como  $\nabla f(\mathbf{x})$  y es un vector. Cada entrada del vector es la derivada parcial<sup>4</sup> de f con respecto a cada variable:

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \left[ \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1}, \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_n} \right]$$
 (5)

#### Cálculo de gradiente en un punto particular

Calcula el gradiente de  $f(\mathbf{x}) = x_1 x_2$  en  $\mathbf{c} = [2, 0]$ .

$$f(\mathbf{x}) = x_1 x_2$$

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \left[\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1}, \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_2}\right] = [x_2, x_1]$$

$$f(\mathbf{c}) = [0, 2]$$

(ITESM) 20 de septiembre de 2022 34 / 52

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>La derivada parcial de una función con respecto a una variable es la derivada asumiendo que el resto de las variables se mantienen constantes. Se denota como  $\frac{\partial f}{\partial x} = 0$ 

## Derivadas en múltiples dimensiones: Hessiano

El *Hessiano* de una función multivariada es una matriz que contiene todas las segundas derivadas con respecto a la entrada.

La segunda derivada captura información acerca de la curvatura local de la función.

$$\nabla^{2} f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^{2} f(\mathbf{x})}{\partial x_{1} \partial x_{1}} & \frac{\partial^{2} f(\mathbf{x})}{\partial x_{1} \partial x_{2}} & \cdots & \frac{\partial^{2} f(\mathbf{x})}{\partial x_{1} \partial x_{n}} \\ \vdots & & \vdots & & \\ \frac{\partial^{2} f(\mathbf{x})}{\partial x_{n} \partial x_{1}} & \frac{\partial^{2} f(\mathbf{x})}{\partial x_{n} \partial x_{2}} & \cdots & \frac{\partial^{2} f(\mathbf{x})}{\partial x_{n} \partial x_{n}} \end{bmatrix}$$
(6)

# Condiciones para mínimos locales (en funciones multivariadas)

La siguientes condiciones son necesarias para que  $\mathbf{x}$  sea un mínimo local de f:

- $\nabla f(\mathbf{x}) = 0$ , es la condición necesaria de primer orden (FONC).
- $\nabla^2 f(\mathbf{x})$  sea positiva semi definida, es la *condición necesaria de segundo orden* (SONC).

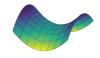
FONC y SONC son generalizaciones del caso univariado. FONC no dice que la función no está cambiando en  $\mathbf{x}$ .

# Condiciones para mínimos locales (en funciones multivariadas)

Las siguientes figuras son ejemplos de funciones multivariadas donde se satisface la FONC.



A *local maximum*. The gradient at the center is zero, but the Hessian is negative definite.



A *saddle*. The gradient at the center is zero, but it is not a local minimum.



A *bowl*. The gradient at the center is zero and the Hessian is positive definite. It is a local minimum.

Figura: Tomado de Kochenderfer and Wheeler (2019)

## Condiciones para mínimos locales: ejemplo

Considera la función de Rosenbrock:

$$f(x) = (1 - x_1)^2 + 5(x_2 - x_1^2)^2$$

El punto (1,1) satisface las condiciones de primer y segundo orden? El gradiente es:

$$\nabla f(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2(1-x_1) + 20(x_2 - x_1^2)x_1 \\ 10(x_2 - x_1^2) \end{bmatrix}$$
$$= \begin{bmatrix} 2(10x_1^3 - 10x_1x_2 + x_1 - 1) \\ 10(x_2 - x_1^2) \end{bmatrix}$$

◆ロト ◆個ト ◆差ト ◆差ト 差 めなべ

## Condiciones para mínimos locales: ejemplo

Sustituyendo el punto (1,1) en el gradiente, tenemos  $\nabla f(\begin{bmatrix} 1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \end{bmatrix}$  de manera que satisface las condiciones de primer orden. El hessiano de la función es

$$\nabla^2 f(\mathsf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^f}{\partial x_1 \partial x_1} & \frac{\partial^f}{\partial x_1 \partial x_2} \\ \frac{\partial^f}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^f}{\partial x_2 \partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2(30x_1^2 - 10x_2 + 1) & 2(-10x_1) \\ 10(-2x_1) & 10 \end{bmatrix}$$

Sustituyendo (1,1) en el hessiano,

$$\nabla^2 f(\mathsf{x}) = \begin{bmatrix} 42 & -20 \\ -20 & 10 \end{bmatrix}$$

4□▶
4□▶
4□▶
4□▶
4□▶
4□▶
4□▶
4□▶
4□▶
4□▶

## Condiciones para mínimos locales: ejemplo

Que es positiva definida, de forma que cumple con la condición de segundo orden.

$$\nabla^2 f(\mathsf{x}) - \lambda I = \begin{bmatrix} 42 - \lambda & -20 \\ -20 & 10 - \lambda \end{bmatrix}$$

El determinante  $\det(\nabla^2 f(\mathbf{x}) - \lambda I)$  es igual a :

$$\det(\nabla^2 f(x) - \lambda I) = (42 - \lambda)(10 - \lambda) - (-20) * (-20)$$
$$= 420 - 42\lambda - 10\lambda + \lambda^2 - 400$$
$$= \lambda^2 - 52\lambda + 20$$

Con raices  $\lambda_1 = 51,61249695$  y  $\lambda_2 = 0,38750305$ 

→ロト ←個 ト ← 重 ト ← 重 ・ の へ ○

# Métodos de búsqueda directa

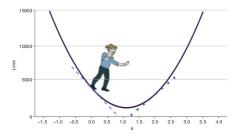


Figura: Tomado de Durr y Sick (2020). Probabilistic deep learning

# Métodos de búsqueda directa

Elige una dirección  $p_k$  y busca en esa dirección desde algún valor  $x_k$  algún punto  $x_{k+1}$  tal que  $f(x_{k+1}) < f(x_k)$ .

La distancia a moverse puede encontrarse resolviendo:

$$\min_{\alpha>0} f(x_k + \alpha p_k)$$

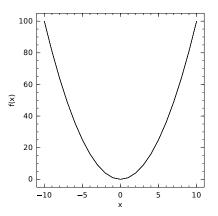


Figura:  $f(x) = x^2$ 

## Gradiente descendente

#### ¿Cómo calculamos $\alpha$ ?

Mediante un método iterativo: Gradiente descendente.

La iteración está dada por:

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$$

Donde  $\alpha \in \mathbb{R}^+$  es e tamaño de paso.

Normalmente se requiere que  $p_k$  sea una dirección descendente,  $p_k^t \nabla f_k < 0$ , esto es que, como en el perreque, nos lleve hacia abajo.

Si elegimos que  $p_k^t = -1$ , es decir  $-\nabla f_k$ , da lugar al método de gradiente descendente.

¿Qué es  $\nabla f_k$ ?



# Funciones en múltiples dimensiones

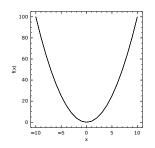


Figura:  $f(x) = x^2$ 

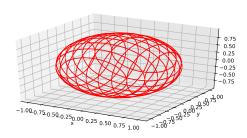


Figura:  $f(x) = x^2 + y^2$ 

## Derivadas en múltiples dimensiones

- La derivada direccional  $\nabla_s f(\mathbf{x})$  de una función multivariada f es la tasa de cambio instantánea de  $f(\mathbf{x})$  cuando  $\mathbf{x}$  se mueve con dirección  $\mathbf{s}$ .
- La derivada direccional puede ser calculada usando el gradiente de la función:

$$\nabla_s f(\mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x})^\mathsf{T} \mathbf{s}$$

• Otra forma de calcular la derivada direccional  $\nabla_s f(\mathbf{x})$  es definiendo

$$g(\alpha) \equiv f(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{s})$$

y posteriormente calcular g'(0).

## Derivadas en múltiples dimensiones

Sea la función multivariada  $f(x_1, x_2) = x_1x_2$ . La gráfica de superficie es la siguiente:

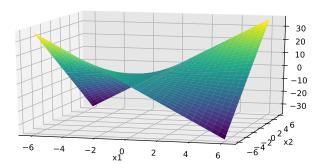


Figura:  $f(x_1, x_2) = x_1 x_2$ 

## Derivadas en múltiples dimensiones

#### Cálculo de derivada direccional

Calcula la derivada direccional de  $f(\mathbf{x}) = x_1 x_2$  en  $\mathbf{x} = [2, 0]$  en la dirección  $\mathbf{s} = [-1, -1]$ 

$$f(\mathbf{x}) = x_1 x_2$$

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \left[\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1}, \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_2}\right] = [x_2, x_1]$$

$$abla_s f(\mathbf{x}) = 
abla f(\mathbf{x})^\mathsf{T} \mathbf{s} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \end{bmatrix} = -1$$

4□▶
4□▶
4□▶
4□▶
4□▶
4□▶
4□▶
4□▶
4□▶
4□▶
4□▶

# Gradiente descendente: el algoritmo

## **Algorithm 1:** Gradiente descendente

Input:  $f, \nabla f, \mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n, \epsilon$ Output:  $\mathbf{x}_{k+1}$ 

$$\mathbf{x}_k \leftarrow \mathbf{x}_0$$

while  $|f(\mathbf{x}_{k+1}) - f(\mathbf{x}_k)| > \epsilon$  do  $p_k \leftarrow -\nabla f(\mathbf{x}_k)$  Calcular tamaño de paso  $\alpha_k$   $\mathbf{x}_{k+1} \leftarrow \mathbf{x}_k + \alpha_k p_k$ 

end while

return  $x_{k+1}$ 

# Gradiente descendente: el algoritmo

## **Algorithm 2:** Gradiente descendente

```
Input: f, \nabla f, \mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n, \epsilon
Output: x_{k+1}
    \mathbf{x}_{k} \leftarrow \mathbf{x}_{0}
    while |f(\mathbf{x}_{k+1}) - f(\mathbf{x}_k)| > \epsilon do
        p_k \leftarrow -\nabla f(\mathbf{x}_k)
         Calcular tamaño de paso \alpha_k; cómo lo calculamos?
        \mathbf{x}_{k+1} \leftarrow \mathbf{x}_k + \alpha_k p_k
    end while
```

return  $x_{k+1}$ 

## **Algorithm 3:** Gradiente descendente

**Input:**  $f, \nabla f, \mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n, \epsilon, \tilde{\alpha}, c, \rho$ Output:  $x_{k+1}$  $\mathbf{x}_k \leftarrow \mathbf{x}_0$ while  $|f(\mathbf{x}_{k+1}) - f(\mathbf{x}_k)| > \epsilon$  do  $p_k \leftarrow -\nabla f(\mathbf{x}_k)$ /\* ----- Algoritmo backtracking para tamaño de paso ------ $\alpha_k \leftarrow \tilde{\alpha}$ while  $f(\mathbf{x}_k + \alpha_k p_k) < f(\mathbf{x}_k) + c\alpha_k \nabla f_k^{\mathsf{T}} p_k$  do  $\alpha_k \leftarrow \rho \alpha_k$ end while

$$\mathbf{x}_{k+1} \leftarrow \mathbf{x}_k + \alpha_k p_k$$

#### end while

return  $x_{k+1}$ 

4 D L 4 D L 4 E L 4 E L 5 O O

## Funciones de prueba

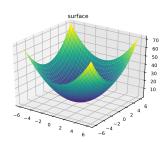
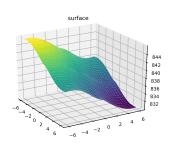


Figura:  $f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$ 



## Figura:

$$f(x_1, x_2) = 418,9829 * 2 - x_1 \sin \sqrt{|x_1|} - x_2 \sin \sqrt{|x_2|}$$

## References I

- Aggarwal, C. C. (2020). Linear Algebra and Optimization for Machine Learning A Textbook. Springer.
- Kochenderfer, M. J. and Wheeler, T. A. (2019). *Algorithms for optimization*. MIT Press.
- Neumaier, A. (2004). Complete search in continuous global optimization and constraint satisfaction. *Acta numerica*, 13:271–369.
- Nocedal, J. and Wright, S. J. (2006). *Numerical Optimization*. Springer, New York, NY, USA, 2e edition.

52 / 52

(ITESM) 20 de septiembre de 2022