Descenso Gradiente

Alan Reyes-Figueroa

Métodos Numéricos II

(Aula 18) 19.septiembre.2022

Algoritmos para minimización sin restricciones:

Algoritmos para Optimización

Algoritmos para minimización sin restricciones:

Los algoritmos para minimización sin restricciones son métodos iterativos que encuentran una solución aproximada.

Algoritmos para minimización sin restricciones:

Los algoritmos para minimización sin restricciones son métodos iterativos que encuentran una solución aproximada.
Todos los algoritmos para minimización sin restricciones requieren que el usuario proporcione un punto de partida $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$.

Algoritmos para minimización sin restricciones:

Los algoritmos para minimización sin restricciones son métodos iterativos que encuentran una solución aproximada.
Todos los algoritmos para minimización sin restricciones requieren que el usuario proporcione un punto de partida $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$. El usuario con conocimiento sobre la función o el conjunto de datos *input* puede estar en una buena posición para elegir $\mathbf{x}_0$ como una estimación razonable de la solución.

Algoritmos para minimización sin restricciones:

Los algoritmos para minimización sin restricciones son métodos iterativos que encuentran una solución aproximada.
Todos los algoritmos para minimización sin restricciones requieren que el usuario proporcione un punto de partida $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$. El usuario con conocimiento sobre la función o el conjunto de datos *input* puede estar en una buena posición para elegir $\mathbf{x}_0$ como una estimación razonable de la solución.
De lo contrario, el punto inicial $\mathbf{x}_0$ debe ser elegido por el algoritmo, ya sea mediante un enfoque sistemático o de alguna manera arbitraria (aleatorio dentro de cierto dominio).

Algoritmos para minimización sin restricciones:

Los algoritmos para minimización sin restricciones son métodos iterativos que encuentran una solución aproximada.
Todos los algoritmos para minimización sin restricciones requieren que el usuario proporcione un punto de partida $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$. El usuario con conocimiento sobre la función o el conjunto de datos *input* puede estar en una buena posición para elegir $\mathbf{x}_0$ como una estimación razonable de la solución.
De lo contrario, el punto inicial $\mathbf{x}_0$ debe ser elegido por el algoritmo, ya sea mediante un enfoque sistemático o de alguna manera arbitraria (aleatorio dentro de cierto dominio).

- A partir de $\mathbf{x}_0$, se genera una secuencia $\{\mathbf{x}_k\}_{k\geq 0}$ de aproximaciones.
- Para pasar de una iteración $\mathbf{x}_k$ a la siguiente, los algoritmos usan información sobre la función f en $\mathbf{x}_k$, y posiblemente también información de iteraciones anteriores.
- Con esta información, se espera hallar una nueva iteración $\mathbf{x}_{k+1}$, usualmente con la propiedad $f(\mathbf{x}_{k+1}) < f(\mathbf{x}_k)$.

Descenso Gradiente

- Sin embargo, existen algoritmos no monótonos en los que f no disminuye en cada paso, pero f debería disminuir después de algún número m de iteraciones es decir, $f(\mathbf{x}_{k+1}) < f(\mathbf{x}_{k-j})$ para algún $j \in \{0, 1, \ldots, m\}$.

Descenso Gradiente

- Sin embargo, existen algoritmos no monótonos en los que f no disminuye en cada paso, pero f debería disminuir después de algún número m de iteraciones es decir, $f(\mathbf{x}_{k+1}) < f(\mathbf{x}_{k-j})$ para algún $j \in \{0, 1, \ldots, m\}$.

  Por ejemplo, seleccione

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha\, \mathbf{d}_k, \qquad \text{donde } \mathbf{d}_k = -\frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{||\nabla f(\mathbf{x}_k)||}$$

  si

$$f(\mathbf{x}_k + \alpha\, \mathbf{d}_k) < \max_{0 \leq j \leq m} f(\mathbf{x}_{k-j}) + \gamma\alpha \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d}_k.$$

Descenso Gradiente

- Sin embargo, existen algoritmos no monótonos en los que f no disminuye en cada paso, pero f debería disminuir después de algún número m de iteraciones es decir, $f(\mathbf{x}_{k+1}) < f(\mathbf{x}_{k-j})$ para algún $j \in \{0, 1, \ldots, m\}$.

  Por ejemplo, seleccione

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha\, \mathbf{d}_k, \qquad \text{donde } \mathbf{d}_k = -\frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{||\nabla f(\mathbf{x}_k)||}$$

  si

$$f(\mathbf{x}_k + \alpha\, \mathbf{d}_k) < \max_{0\leq j\leq m} f(\mathbf{x}_{k-j}) + \gamma\alpha\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d}_k.$$

Framework general:

- Elegir $\mathbf{x}_0$,
- Hallar o establecer un criterio de paro,
- Definir cómo actualizar $\mathbf{x}_k$.

Descenso Gradiente

¿Cómo actualizar $\mathbf{x}_k$?:

La idea es elegir una dirección $\mathbf{d}_k$ y buscar a lo largo del semirrayo en esta dirección, $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + t\mathbf{d}_k$, para una nueva iteración $\mathbf{x}_{k+1}$ donde la función reduzca su valor.

¿Cómo actualizar $\mathbf{x}_k$?:

La idea es elegir una dirección $\mathbf{d}_k$ y buscar a lo largo del semirrayo en esta dirección, $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + t\mathbf{d}_k$, para una nueva iteración $\mathbf{x}_{k+1}$ donde la función reduzca su valor.

Definición

*Dada $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ diferenciable, y un punto $\mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$, una **dirección de descenso** para f en $\mathbf{x}_k$ es cualquier vector $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$, tal que*

$$f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}) < f(\mathbf{x}_k), \qquad \textit{para todo } t \in (0, T). \tag{1}$$

Descenso Gradiente

¿Cómo actualizar $\mathbf{x}_k$?:

La idea es elegir una dirección $\mathbf{d}_k$ y buscar a lo largo del semirrayo en esta dirección, $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + t\mathbf{d}_k$, para una nueva iteración $\mathbf{x}_{k+1}$ donde la función reduzca su valor.

Definición

*Dada $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ diferenciable, y un punto $\mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$, una **dirección de descenso** para f en $\mathbf{x}_k$ es cualquier vector $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$, tal que*

$$f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}) < f(\mathbf{x}_k), \qquad \textit{para todo } t \in (0, T). \tag{1}$$

En el contexto de optimización, una dirección de descenso en $\mathbf{x}_k$ mueve el punto $\mathbf{x}_k$ un poco más cerca de un mínimo local.

Muchos de los métodos de optimización basan su estrategia en hallar una dirección de descenso, por ejemplo: el método de descenso gradiente, el método de grdiente conjugado, ...

Descenso Gradiente

Ejemplo: La dirección de descenso más común para una función es $\mathbf{u} = -\frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{||\nabla f(\mathbf{x}_k)||}$.

Descenso Gradiente

Ejemplo: La dirección de descenso más común para una función es $\mathbf{u} = -\frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{||\nabla f(\mathbf{x}_k)||}$.

Ya hemos mencionado que $-\frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{||\nabla f(\mathbf{x}_k)||}$ indica la dirección en la cual f decrece lo más rápido posible en el punto $\mathbf{x}_k$.

Descenso Gradiente

Ejemplo: La dirección de descenso más común para una función es $\mathbf{u} = -\frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{||\nabla f(\mathbf{x}_k)||}$.

Ya hemos mencionado que $-\frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{||\nabla f(\mathbf{x}_k)||}$ indica la dirección en la cual f decrece lo más rápido posible en el punto $\mathbf{x}_k$. En particular, del Teorema de Taylor, tenemos

$$f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{u}) = f(\mathbf{x}_k) + t\nabla f(\mathbf{x}_k)^T\mathbf{u} + o(||\mathbf{u}||) \approx f(\mathbf{x}_k) - t\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{||\nabla f(\mathbf{x}_k)||}$$

Descenso Gradiente

Ejemplo: La dirección de descenso más común para una función es $\mathbf{u} = -\frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{||\nabla f(\mathbf{x}_k)||}$.
Ya hemos mencionado que $-\frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{||\nabla f(\mathbf{x}_k)||}$ indica la dirección en la cual f decrece lo más rápido posible en el punto $\mathbf{x}_k$. En particular, del Teorema de Taylor, tenemos

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{u}) &= f(\mathbf{x}_k) + t\nabla f(\mathbf{x}_k)^T\mathbf{u} + o(||\mathbf{u}||) \approx f(\mathbf{x}_k) - t\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{||\nabla f(\mathbf{x}_k)||} \\ &\approx f(\mathbf{x}_k) - t||\nabla f(\mathbf{x}_k)|| \end{aligned}$$

Ejemplo: La dirección de descenso más común para una función es $\mathbf{u} = -\frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{||\nabla f(\mathbf{x}_k)||}$.
Ya hemos mencionado que $-\frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{||\nabla f(\mathbf{x}_k)||}$ indica la dirección en la cual f decrece lo más rápido posible en el punto $\mathbf{x}_k$. En particular, del Teorema de Taylor, tenemos

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{u}) &= f(\mathbf{x}_k) + t\nabla f(\mathbf{x}_k)^T\mathbf{u} + o(||\mathbf{u}||) \approx f(\mathbf{x}_k) - t\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{||\nabla f(\mathbf{x}_k)||} \\ &\approx f(\mathbf{x}_k) - t||\nabla f(\mathbf{x}_k)|| \; < \; f(\mathbf{x}_k). \end{aligned} \tag{2}$$

Descenso Gradiente

Ejemplo: La dirección de descenso más común para una función es $\mathbf{u} = -\frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{||\nabla f(\mathbf{x}_k)||}$.
Ya hemos mencionado que $-\frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{||\nabla f(\mathbf{x}_k)||}$ indica la dirección en la cual f decrece lo más rápido posible en el punto $\mathbf{x}_k$. En particular, del Teorema de Taylor, tenemos

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{u}) &= f(\mathbf{x}_k) + t\nabla f(\mathbf{x}_k)^T\mathbf{u} + o(||\mathbf{u}||) \approx f(\mathbf{x}_k) - t\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{||\nabla f(\mathbf{x}_k)||} \\ &\approx f(\mathbf{x}_k) - t||\nabla f(\mathbf{x}_k)|| \; < \; f(\mathbf{x}_k). \end{aligned} \tag{2}$$

Luego, $f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{u}) < f(\mathbf{x}_k)$, para $t \in (0, 1)$ y $\mathbf{u} = -\frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{||\nabla f(\mathbf{x}_k)||}$ es una dirección de descenso.

Ejemplo: La dirección de descenso más común para una función es $\mathbf{u} = -\frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{||\nabla f(\mathbf{x}_k)||}$.
Ya hemos mencionado que $-\frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{||\nabla f(\mathbf{x}_k)||}$ indica la dirección en la cual f decrece lo más rápido posible en el punto $\mathbf{x}_k$. En particular, del Teorema de Taylor, tenemos

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{u}) &= f(\mathbf{x}_k) + t\nabla f(\mathbf{x}_k)^T\mathbf{u} + o(||\mathbf{u}||) \approx f(\mathbf{x}_k) - t\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{||\nabla f(\mathbf{x}_k)||} \\ &\approx f(\mathbf{x}_k) - t||\nabla f(\mathbf{x}_k)|| \; < \; f(\mathbf{x}_k). \end{aligned} \tag{2}$$

Luego, $f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{u}) < f(\mathbf{x}_k)$, para $t \in (0,1)$ y $\mathbf{u} = -\frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{||\nabla f(\mathbf{x}_k)||}$ es una dirección de descenso.

general, lo anterior vale para cualquier vector $\mathbf{d}$ tal que $\nabla f(\mathbf{x}_k)^T\mathbf{d} < 0$.

Proposición

Dada $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ de clase C^1, y $\mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$. Entonces, $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ es una dirección de descenso para f en $\mathbf{x}_k$, si y sólo si, $\nabla f(\mathbf{x}_k)^T\mathbf{d} < 0$.

Descenso Gradiente

Ejemplo: La dirección de descenso más común para una función es $\mathbf{u} = -\frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{||\nabla f(\mathbf{x}_k)||}$.
Ya hemos mencionado que $-\frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{||\nabla f(\mathbf{x}_k)||}$ indica la dirección en la cual f decrece lo más rápido posible en el punto $\mathbf{x}_k$. En particular, del Teorema de Taylor, tenemos

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{u}) &= f(\mathbf{x}_k) + t\nabla f(\mathbf{x}_k)^T\mathbf{u} + o(||\mathbf{u}||) \approx f(\mathbf{x}_k) - t\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{||\nabla f(\mathbf{x}_k)||} \\ &\approx f(\mathbf{x}_k) - t||\nabla f(\mathbf{x}_k)|| \; < \; f(\mathbf{x}_k). \end{aligned} \tag{2}$$

Luego, $f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{u}) < f(\mathbf{x}_k)$, para $t \in (0, 1)$ y $\mathbf{u} = -\frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{||\nabla f(\mathbf{x}_k)||}$ es una dirección de descenso.

general, lo anterior vale para cualquier vector $\mathbf{d}$ tal que $\nabla f(\mathbf{x}_k)^T\mathbf{d} < 0$.

Proposición

Dada $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ de clase C^1, y $\mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$. Entonces, $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ es una dirección de descenso para f en $\mathbf{x}_k$, si y sólo si, $\nabla f(\mathbf{x}_k)^T\mathbf{d} < 0$.

<u>Prueba</u>: ($\Leftarrow$) Se deduce directamente de la aproximación de Taylor de $f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d})$.

Descenso Gradiente

$$f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}) = f(\mathbf{x}_k) + t\nabla f(\mathbf{x}_k)^T\mathbf{d} + o(||\mathbf{d}||) \approx f(\mathbf{x}_k) + t\underbrace{\nabla f(\mathbf{x}_k)^T\mathbf{d}}_{<0} < f(\mathbf{x}_k),$$

para $t \in (0, 1)$, y $\mathbf{d}$ es dirección de descenso.

Descenso Gradiente

$$f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}) = f(\mathbf{x}_k) + t\nabla f(\mathbf{x}_k)^T\mathbf{d} + o(||\mathbf{d}||) \approx f(\mathbf{x}_k) + t\underbrace{\nabla f(\mathbf{x}_k)^T\mathbf{d}}_{<0} < f(\mathbf{x}_k),$$

para $t \in (0, 1)$, y $\mathbf{d}$ es dirección de descenso.

($\Rightarrow$) Si $\mathbf{d}$ es dirección de descenso de f en $\mathbf{x}_k$, entonces existe $t_0 \in (0, T)$, tal que $f(\mathbf{x}_k + t_0\mathbf{d}) < f(\mathbf{x}_k)$.

Descenso Gradiente

$$f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}) = f(\mathbf{x}_k) + t\nabla f(\mathbf{x}_k)^T\mathbf{d} + o(||\mathbf{d}||) \approx f(\mathbf{x}_k) + t\underbrace{\nabla f(\mathbf{x}_k)^T\mathbf{d}}_{<0} < f(\mathbf{x}_k),$$

para $t \in (0, 1)$, y $\mathbf{d}$ es dirección de descenso.

($\Rightarrow$) Si $\mathbf{d}$ es dirección de descenso de f en $\mathbf{x}_k$, entonces existe $t_0 \in (0, T)$, tal que $f(\mathbf{x}_k + t_0\mathbf{d}) < f(\mathbf{x}_k)$.
Luego, por continuidad de ∇f y la preservación de signo, se tiene que $\nabla f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d})^T\mathbf{d} < 0$, para todo $t \in (0, t_0)$.

Descenso Gradiente

$$f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}) = f(\mathbf{x}_k) + t\nabla f(\mathbf{x}_k)^T\mathbf{d} + o(||\mathbf{d}||) \approx f(\mathbf{x}_k) + t\underbrace{\nabla f(\mathbf{x}_k)^T\mathbf{d}}_{<0} < f(\mathbf{x}_k),$$

para $t \in (0, 1)$, y $\mathbf{d}$ es dirección de descenso.

($\Rightarrow$) Si $\mathbf{d}$ es dirección de descenso de f en $\mathbf{x}_k$, entonces existe $t_0 \in (0, T)$, tal que $f(\mathbf{x}_k + t_0\mathbf{d}) < f(\mathbf{x}_k)$.
Luego, por continuidad de ∇f y la preservación de signo, se tiene que $\nabla f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d})^T\mathbf{d} < 0$, para todo $t \in (0, t_0)$. Usando Taylor, existe $h \in (0, 1)$ tal que

$$f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}) = f(\mathbf{x}_k) + t\nabla f(\mathbf{x}_k + ht\mathbf{d})^T\mathbf{d}.$$

Descenso Gradiente

$$f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}) = f(\mathbf{x}_k) + t\nabla f(\mathbf{x}_k)^T\mathbf{d} + o(||\mathbf{d}||) \approx f(\mathbf{x}_k) + t\underbrace{\nabla f(\mathbf{x}_k)^T\mathbf{d}}_{<0} < f(\mathbf{x}_k),$$

para $t \in (0, 1)$, y $\mathbf{d}$ es dirección de descenso.

($\Rightarrow$) Si $\mathbf{d}$ es dirección de descenso de f en $\mathbf{x}_k$, entonces existe $t_0 \in (0, T)$, tal que $f(\mathbf{x}_k + t_0\mathbf{d}) < f(\mathbf{x}_k)$.
Luego, por continuidad de ∇f y la preservación de signo, se tiene que $\nabla f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d})^T\mathbf{d} < 0$, para todo $t \in (0, t_0)$. Usando Taylor, existe $h \in (0, 1)$ tal que

$$f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}) = f(\mathbf{x}_k) + t\nabla f(\mathbf{x}_k + ht\mathbf{d})^T\mathbf{d}.$$

Como $0 < ht < t < t_0$, entonces $\nabla f(\mathbf{x}_k + ht\mathbf{d})^T\mathbf{d} < 0$, para todo $h \in (0, 1)$ y por lo tanto, $f(\mathbf{x}_k + ht\mathbf{d}) < f(\mathbf{x}_k)$, $\forall\, ht \in (0, t)$.

Descenso Gradiente

$$f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}) = f(\mathbf{x}_k) + t\nabla f(\mathbf{x}_k)^T\mathbf{d} + o(||\mathbf{d}||) \approx f(\mathbf{x}_k) + t\underbrace{\nabla f(\mathbf{x}_k)^T\mathbf{d}}_{<0} < f(\mathbf{x}_k),$$

para $t \in (0, 1)$, y $\mathbf{d}$ es dirección de descenso.

($\Rightarrow$) Si $\mathbf{d}$ es dirección de descenso de f en $\mathbf{x}_k$, entonces existe $t_0 \in (0, T)$, tal que $f(\mathbf{x}_k + t_0\mathbf{d}) < f(\mathbf{x}_k)$.
Luego, por continuidad de ∇f y la preservación de signo, se tiene que $\nabla f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d})^T\mathbf{d} < 0$, para todo $t \in (0, t_0)$. Usando Taylor, existe $h \in (0, 1)$ tal que

$$f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}) = f(\mathbf{x}_k) + t\nabla f(\mathbf{x}_k + ht\mathbf{d})^T\mathbf{d}.$$

Como $0 < ht < t < t_0$, entonces $\nabla f(\mathbf{x}_k + ht\mathbf{d})^T\mathbf{d} < 0$, para todo $h \in (0, 1)$ y por lo tanto, $f(\mathbf{x}_k + ht\mathbf{d}) < f(\mathbf{x}_k)$, $\forall\, ht \in (0, t)$. Esto muestra que $\mathbf{d}$ es una dirección de descenso. $\square$

Descenso Gradiente

$$f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}) = f(\mathbf{x}_k) + t\nabla f(\mathbf{x}_k)^T\mathbf{d} + o(||\mathbf{d}||) \approx f(\mathbf{x}_k) + t\,\underbrace{\nabla f(\mathbf{x}_k)^T\mathbf{d}}_{<0} < f(\mathbf{x}_k),$$

para $t \in (0,1)$, y $\mathbf{d}$ es dirección de descenso.

($\Rightarrow$) Si $\mathbf{d}$ es dirección de descenso de f en $\mathbf{x}_k$, entonces existe $t_0 \in (0,T)$, tal que $f(\mathbf{x}_k + t_0\mathbf{d}) < f(\mathbf{x}_k)$.
Luego, por continuidad de ∇f y la preservación de signo, se tiene que $\nabla f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d})^T\mathbf{d} < 0$, para todo $t \in (0,t_0)$. Usando Taylor, existe $h \in (0,1)$ tal que

$$f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}) = f(\mathbf{x}_k) + t\nabla f(\mathbf{x}_k + ht\mathbf{d})^T\mathbf{d}.$$

Como $0 < ht < t < t_0$, entonces $\nabla f(\mathbf{x}_k + ht\mathbf{d})^T\mathbf{d} < 0$, para todo $h \in (0,1)$ y por lo tanto, $f(\mathbf{x}_k + ht\mathbf{d}) < f(\mathbf{x}_k)$, $\forall\, ht \in (0,t)$. Esto muestra que $\mathbf{d}$ es una dirección de descenso. $\square$

La estrategia anterior ya nos da un algoritmo básico de optimización.

Descenso Gradiente

Algoritmo: (Descenso gradiente, versión naïve)
Inputs: $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ función de clase C^1, $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$, $\alpha > 0$ tamaño de paso.
Outputs: $\mathbf{x}$ punto crítico de f.

```
For k = 0,1,2,... hasta que se cumpla un criterio de paro:
    Compute d_k a descent direction
    (for example, any d_k such that ∠(−∇f(x_k), d_k) < |π/2|).
    Set x_{k+1} = x_k + α d_k.
Return x_{k+1}.
```

Descenso Gradiente

Algoritmo: (Descenso gradiente, versión naïve)
Inputs: $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ función de clase C^1, $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$, $\alpha > 0$ tamaño de paso.
Outputs: $\mathbf{x}$ punto crítico de f.

```
For k = 0,1,2,... hasta que se cumpla un criterio de paro:
    Compute d_k a descent direction
    (for example, any d_k such that ∠(−∇f(x_k), d_k) < |π/2|).
    Set x_{k+1} = x_k + α d_k.
Return x_{k+1}.
```

En el caso en que $\mathbf{d}_k = -\nabla f(\mathbf{x}_k)$, tenemos

Descenso Gradiente

Algoritmo: (Descenso gradiente, versión naïve)
Inputs: $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ función de clase C^1, $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$, $\alpha > 0$ tamaño de paso.
Outputs: $\mathbf{x}$ punto crítico de f.

```
For k = 0,1,2,... hasta que se cumpla un criterio de paro:
    Compute d_k a descent direction
    (for example, any d_k such that ∠(−∇f(x_k), d_k) < |π/2|).
    Set x_{k+1} = x_k + α d_k.
Return x_{k+1}.
```

En el caso en que $\mathbf{d}_k = -\nabla f(\mathbf{x}_k)$, tenemos

Algoritmo: (*Steepest descent*, versión naïve)
Inputs: $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ función de clase C^1, $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$, $\alpha > 0$ tamaño de paso.
Outputs: $\mathbf{x}$ punto crítico de f.

```
For k = 0,1,2,... hasta que se cumpla un criterio de paro:
    Set x_{k+1} = x_k − α ∇f(x_k).
Return x_{k+1}.
```

Descenso Gradiente

A la constante $\alpha_k > 0$ se le llama el **tamaño de paso**.

Descenso Gradiente

A la constante $\alpha_k > 0$ se le llama el **tamaño de paso**. Usualmente este tamaño de paso α_k cambia en cada iteración, y se elige en función de la iteración y del punto, α_k.

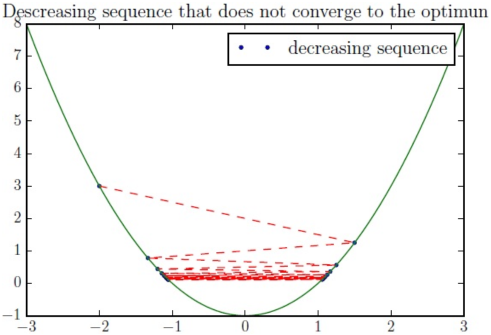
Descenso Gradiente

A la constante $\alpha_k > 0$ se le llama el **tamaño de paso**. Usualmente este tamaño de paso α_k cambia en cada iteración, y se elige en función de la iteración y del punto, α_k. El caso más simple se da al elegir $\alpha_k = \alpha$ constante, como en los algoritmos naïve anteriores.

Descenso Gradiente

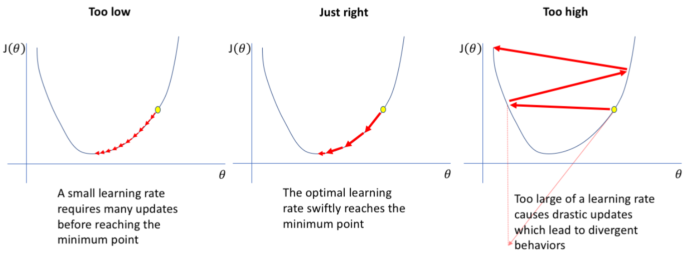
A la constante $\alpha_k > 0$ se le llama el **tamaño de paso**. Usualmente este tamaño de paso α_k cambia en cada iteración, y se elige en función de la iteración y del punto, α_k. El caso más simple se da al elegir $\alpha_k = \alpha$ constante, como en los algoritmos naïve anteriores.

Elegir el tamaño de paso adecuado es crucial. Si α_k es demasiado grande, es posible que el algoritmos no detecte las regiones donde de encuentra el mínimo local.



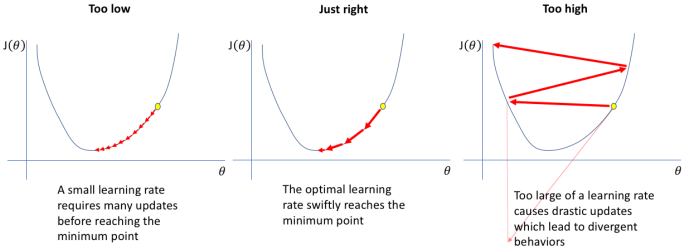
UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

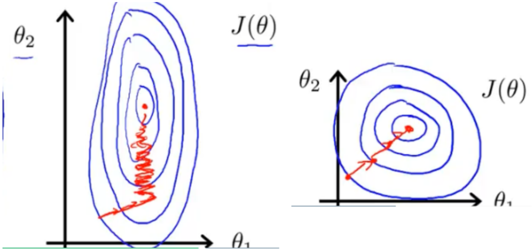
Descenso Gradiente



UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Descenso Gradiente





Descenso Gradiente

Ejemplo: Considere la función $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^2$.

Descenso Gradiente

Ejemplo: Considere la función $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^2$. f es diferenciable y $\nabla f(\mathbf{x}) = 2\mathbf{x}$.

Descenso Gradiente

Ejemplo: Considere la función $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^2$. f es diferenciable y $\nabla f(\mathbf{x}) = 2\mathbf{x}$.

- Tomando $\alpha = 1$, obtenemos la iteración de descenso máximo
$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}_k - 2\mathbf{x}_k = -\mathbf{x}_k,$$
la cual es una secuencia alternante $\mathbf{x}_0, -\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0, -\mathbf{x}_0, \ldots$, no convergente.

Ejemplo: Considere la función $f:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$, $f(\mathbf{x})=\mathbf{x}^2$. f es diferenciable y $\nabla f(\mathbf{x})=2\mathbf{x}$.

- Tomando $\alpha=1$, obtenemos la iteración de descenso máximo
$$\mathbf{x}_{k+1}=\mathbf{x}_k-\nabla f(\mathbf{x})=\mathbf{x}_k-2\mathbf{x}_k=-\mathbf{x}_k,$$
la cual es una secuencia alternante $\mathbf{x}_0,-\mathbf{x}_0,\mathbf{x}_0,-\mathbf{x}_0,\ldots$, no convergente.
- Tomando $\alpha=\frac{1}{4}$, obtenemos la iteración de descenso máximo
$$\mathbf{x}_{k+1}=\mathbf{x}_k-\tfrac{1}{4}\nabla f(\mathbf{x})=\mathbf{x}_k-\tfrac{2}{4}\mathbf{x}_k=\tfrac{1}{2}\mathbf{x}_k.$$
Esta es una secuencia geométrica convergente $\mathbf{x}_0,\frac{1}{2}\mathbf{x}_0,\frac{1}{4}\mathbf{x}_0,\frac{1}{8}\mathbf{x}_0,\ldots$.

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Descenso Gradiente

Ejemplo: Considere la función $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^2$. f es diferenciable y $\nabla f(\mathbf{x}) = 2\mathbf{x}$.

- Tomando $\alpha = 1$, obtenemos la iteración de descenso máximo
$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}_k - 2\mathbf{x}_k = -\mathbf{x}_k,$$
la cual es una secuencia alternante $\mathbf{x}_0, -\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0, -\mathbf{x}_0, \ldots$, no convergente.
- Tomando $\alpha = \frac{1}{4}$, obtenemos la iteración de descenso máximo
$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \tfrac{1}{4}\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}_k - \tfrac{2}{4}\mathbf{x}_k = \tfrac{1}{2}\mathbf{x}_k.$$
Esta es una secuencia geométrica convergente $\mathbf{x}_0, \frac{1}{2}\mathbf{x}_0, \frac{1}{4}\mathbf{x}_0, \frac{1}{8}\mathbf{x}_0, \ldots$.

Una estrategia empírica muy simple, pero bastante útil, para elgir α es comenzar con un valor pequeño (*e.g.* $\alpha = 0.1$).

Descenso Gradiente

Ejemplo: Considere la función $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^2$. f es diferenciable y $\nabla f(\mathbf{x}) = 2\mathbf{x}$.

- Tomando $\alpha = 1$, obtenemos la iteración de descenso máximo
$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}_k - 2\mathbf{x}_k = -\mathbf{x}_k,$$
la cual es una secuencia alternante $\mathbf{x}_0, -\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0, -\mathbf{x}_0, \ldots$, no convergente.
- Tomando $\alpha = \frac{1}{4}$, obtenemos la iteración de descenso máximo
$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \tfrac{1}{4}\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}_k - \tfrac{2}{4}\mathbf{x}_k = \tfrac{1}{2}\mathbf{x}_k.$$
Esta es una secuencia geométrica convergente $\mathbf{x}_0, \frac{1}{2}\mathbf{x}_0, \frac{1}{4}\mathbf{x}_0, \frac{1}{8}\mathbf{x}_0, \ldots$.

Una estrategia empírica muy simple, pero bastante útil, para elgir α es comenzar con un valor pequeño (*e.g.* $\alpha = 0.1$). Si con este valor de α no se observa convergencia del método de descenso gradiente, se prueban valores usando una escala potencial:

- $\alpha = 0.01$, $\alpha = 0.001$; $\alpha = 0.0001, \ldots$
- $\alpha = \rho^1\alpha_0$, $\alpha = \rho^2\alpha_0$, $\alpha = \rho^3\alpha_0, \ldots$, donde $0 < \rho < 1$ (por ejemplo: $\rho = \frac{1}{2}, \frac{1}{4}$ ó $\rho = \frac{1}{10}$)

Descenso Gradiente

Criterios de paro: Existen muchos criterios de paro que pueden usarse para deterner los algoritmos de optimización numérica.

- Error absoluto de iteraciones: Se mide el error absoluto entre dos iteraciones consecutivas
$$||\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k||_{norm} < tol.$$

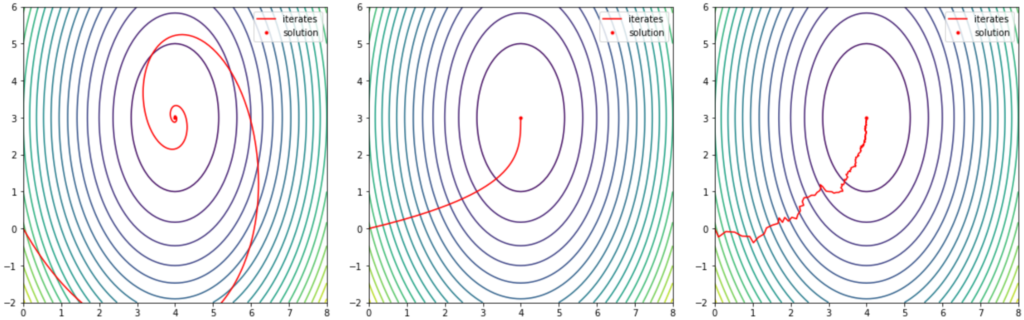
Criterios de paro: Existen muchos criterios de paro que pueden usarse para deterner los algoritmos de optimización numérica.

- Error absoluto de iteraciones: Se mide el error absoluto entre dos iteraciones consecutivas
$$||\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k||_{norm} < tol.$$

- Error relativo de iteraciones: Se compara el error relativo entre dos iteraciones consecutivas $\mathbf{x}_k$ y $\mathbf{x}_{k+1}$
$$\frac{||\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k||_{norm}}{||\mathbf{x}_k||_{norm}} < tol.$$

- Error abs/rel del valor de la función: Se mide el error entre dos valores de $f(\mathbf{x}_k)$ en iteraciones consecutivas. Así
$$|f(\mathbf{x}_{k+1}) - f(\mathbf{x}_k)| < tol.$$

- Norma del gradiente: En un mínimo local, sabemos que $\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$. Se busca entonces que las normas del gradiente sean suficientemente pequeñas
$$||\nabla f(\mathbf{x}_k)||_{norm} < tol.$$



Varios métodos gradiente aplicados a una función cuadrática: (a) Descenso gradiente con dirección de descenso con ángulo constante φ con $\nabla f(\mathbf{x}_k)$; (b) Descenso máximo; (c) Descenso gradiente con dirección de descenso aleatoria.

Descenso Gradiente

Otra estrategia más adecuada para elegir el tamaño de paso es el llamado **esquema de Cauchy**.

Descenso Gradiente

Otra estrategia más adecuada para elegir el tamaño de paso es el llamado **esquema de Cauchy**.

Este consiste en lo siguiente: Dado $\mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$, luego de elegir la dirección de búsqueda $\mathbf{d}_k$, buscamos cuál es el valor de $\alpha_k > 0$ que minimiza la función f, restricta a la recta $\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}_k$, $t > 0$.

Descenso Gradiente

Otra estrategia más adecuada para elegir el tamaño de paso es el llamado **esquema de Cauchy**.

Este consiste en lo siguiente: Dado $\mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$, luego de elegir la dirección de búsqueda $\mathbf{d}_k$, buscamos cuál es el valor de $\alpha_k > 0$ que minimiza la función f, restricta a la recta $\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}_k$, $t > 0$. Esto es, definimos

$$\alpha_k = \operatorname{argmin}_{t\in\mathbb{R}} f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}_k). \tag{3}$$

Otra estrategia más adecuada para elegir el tamaño de paso es el llamado **esquema de Cauchy**.

Este consiste en lo siguiente: Dado $\mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$, luego de elegir la dirección de búsqueda $\mathbf{d}_k$, buscamos cuál es el valor de $\alpha_k > 0$ que minimiza la función f, restricta a la recta $\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}_k$, $t > 0$. Esto es, definimos

$$\alpha_k = \text{argmin}_{t \in \mathbb{R}} f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}_k). \tag{3}$$

Observe que (3) corresponde a un problema de minimización 1-dimensional.

Descenso Gradiente

Otra estrategia más adecuada para elegir el tamaño de paso es el llamado **esquema de Cauchy**.

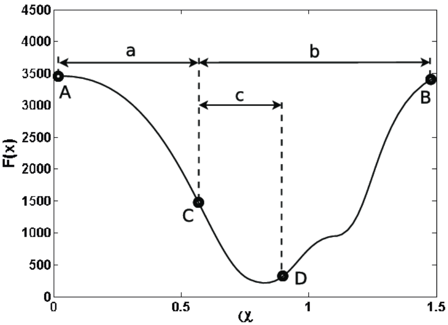
Este consiste en lo siguiente: Dado $\mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$, luego de elegir la dirección de búsqueda $\mathbf{d}_k$, buscamos cuál es el valor de $\alpha_k > 0$ que minimiza la función f, restricta a la recta $\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}_k$, $t > 0$. Esto es, definimos

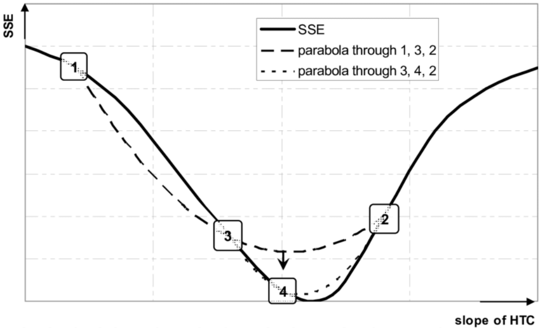
$$\alpha_k = \text{argmin}_{t \in \mathbb{R}} f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}_k). \tag{3}$$

Observe que (3) corresponde a un problema de minimización 1-dimensional. Es posible aplicar aquí las técnicas de optimización que aprendieron en Métodos Numéricos I.

- Método de búsqueda de Fibonacci (*Fibonacci search*),
- Método de la razon aúrea (*golden ration search*),
- Interpolación parabólica (*quadratic interpolation*),
- Método de Newton,
- ...

Descenso Gradiente





Optimización 1-dimensional: (a) *Golden-search*, (b) interpolación parabólica.

Ver `https://web2.qatar.cmu.edu/~gdicaro/15382/additional/one-dimensional-search-methods.pdf`

UVG UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Descenso Gradiente

Algoritmo: (*Descenso gradiente*, versión esquema de Cauchy)
Inputs: $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ función de clase C^1, $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$.
Outputs: $\mathbf{x}$ punto crítico de f.
`For k = 0,1,2,... hasta que se cumpla un criterio de paro:`
    `Define` $\mathbf{d}_k = -\nabla f(\mathbf{x}_k)$, `or any other descent direction.`
    `Compute` α_k `such that`

$$\alpha_k = \text{argmin}_{t\in\mathbb{R}} f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}_k),$$

    `by any 1-dimensional optimization method,`
    `Set` $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k$.
`Return` $\mathbf{x}_{k+1}$.

UVG UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Descenso Gradiente

Otra dirección de búsqueda importante es la **dirección de Newton**.

Descenso Gradiente

Otra dirección de búsqueda importante es la **dirección de Newton**. Ésta se deriva de la aproximación de Taylor de segundo orden

$$f(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}) \quad = \quad f(\mathbf{x}_k) + \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d} + \tfrac{1}{2}\mathbf{d}^T D^2 f(\mathbf{x}_k)\, \mathbf{d} + o(||\mathbf{d}||^2).$$

Descenso Gradiente

Otra dirección de búsqueda importante es la **dirección de Newton**. Ésta se deriva de la aproximación de Taylor de segundo orden

$$
\begin{aligned}
f(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}) &= f(\mathbf{x}_k) + \nabla f(\mathbf{x}_k)^T\,\mathbf{d} + \tfrac{1}{2}\mathbf{d}^T D^2 f(\mathbf{x}_k)\,\mathbf{d} + o(||\mathbf{d}||^2). \\
&\approx \underbrace{f(\mathbf{x}_k) + \nabla f(\mathbf{x}_k)^T\,\mathbf{d} + \tfrac{1}{2}\mathbf{d}^T D^2 f(\mathbf{x}_k)\,\mathbf{d}}_{m_k(\mathbf{d})}\,.
\end{aligned} \tag{4}
$$

Descenso Gradiente

Otra dirección de búsqueda importante es la **dirección de Newton**. Ésta se deriva de la aproximación de Taylor de segundo orden

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}) &= f(\mathbf{x}_k) + \nabla f(\mathbf{x}_k)^T\,\mathbf{d} + \tfrac{1}{2}\mathbf{d}^T D^2 f(\mathbf{x}_k)\,\mathbf{d} + o(||\mathbf{d}||^2). \\ &\approx \underbrace{f(\mathbf{x}_k) + \nabla f(\mathbf{x}_k)^T\,\mathbf{d} + \tfrac{1}{2}\mathbf{d}^T D^2 f(\mathbf{x}_k)\,\mathbf{d}}_{m_k(\mathbf{d})}. \end{aligned} \tag{4}$$

Observe que $m_k(\mathbf{d})$ es una función cuadrática en $\mathbb{R}^n$.

Descenso Gradiente

Otra dirección de búsqueda importante es la **dirección de Newton**. Ésta se deriva de la aproximación de Taylor de segundo orden

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}) &= f(\mathbf{x}_k) + \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d} + \tfrac{1}{2}\mathbf{d}^T D^2 f(\mathbf{x}_k)\,\mathbf{d} + o(||\mathbf{d}||^2). \\ &\approx \underbrace{f(\mathbf{x}_k) + \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d} + \tfrac{1}{2}\mathbf{d}^T D^2 f(\mathbf{x}_k)\,\mathbf{d}}_{m_k(\mathbf{d})}. \end{aligned} \tag{4}$$

Observe que $m_k(\mathbf{d})$ es una función cuadrática en $\mathbb{R}^n$. Si $D^2 f(\mathbf{x}_k)$ es positiva definida, entonces m_k es convexa, y encontramos la dirección de Newton hallando el vector $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ como el mínimo global de esta función cuadrática.

Descenso Gradiente

Otra dirección de búsqueda importante es la **dirección de Newton**. Ésta se deriva de la aproximación de Taylor de segundo orden

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}) &= f(\mathbf{x}_k) + \nabla f(\mathbf{x}_k)^T\,\mathbf{d} + \tfrac{1}{2}\mathbf{d}^T D^2 f(\mathbf{x}_k)\,\mathbf{d} + o(||\mathbf{d}||^2). \\ &\approx \underbrace{f(\mathbf{x}_k) + \nabla f(\mathbf{x}_k)^T\,\mathbf{d} + \tfrac{1}{2}\mathbf{d}^T D^2 f(\mathbf{x}_k)\,\mathbf{d}}_{m_k(\mathbf{d})}\,. \end{aligned} \tag{4}$$

Observe que $m_k(\mathbf{d})$ es una función cuadrática en $\mathbb{R}^n$. Si $D^2 f(\mathbf{x}_k)$ es positiva definida, entonces m_k es convexa, y encontramos la dirección de Newton hallando el vector $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ como el mínimo global de esta función cuadrática. Esto es

$$\nabla m_k(\mathbf{d}) =$$

Descenso Gradiente

Otra dirección de búsqueda importante es la **dirección de Newton**. Ésta se deriva de la aproximación de Taylor de segundo orden

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}) &= f(\mathbf{x}_k) + \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d} + \tfrac{1}{2}\mathbf{d}^T D^2 f(\mathbf{x}_k)\,\mathbf{d} + o(||\mathbf{d}||^2). \\ &\approx \underbrace{f(\mathbf{x}_k) + \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d} + \tfrac{1}{2}\mathbf{d}^T D^2 f(\mathbf{x}_k)\,\mathbf{d}}_{m_k(\mathbf{d})}. \end{aligned} \tag{4}$$

Observe que $m_k(\mathbf{d})$ es una función cuadrática en $\mathbb{R}^n$. Si $D^2 f(\mathbf{x}_k)$ es positiva definida, entonces m_k es convexa, y encontramos la dirección de Newton hallando el vector $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ como el mínimo global de esta función cuadrática. Esto es

$$\nabla m_k(\mathbf{d}) = \nabla f(\mathbf{x}_k) + D^2 f(\mathbf{x}_k)\,\mathbf{d} = \mathbf{0}$$

Descenso Gradiente

Otra dirección de búsqueda importante es la **dirección de Newton**. Ésta se deriva de la aproximación de Taylor de segundo orden

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}) &= f(\mathbf{x}_k) + \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d} + \tfrac{1}{2}\mathbf{d}^T D^2 f(\mathbf{x}_k)\, \mathbf{d} + o(||\mathbf{d}||^2). \\ &\approx \underbrace{f(\mathbf{x}_k) + \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d} + \tfrac{1}{2}\mathbf{d}^T D^2 f(\mathbf{x}_k)\, \mathbf{d}}_{m_k(\mathbf{d})}. \end{aligned} \tag{4}$$

Observe que $m_k(\mathbf{d})$ es una función cuadrática en $\mathbb{R}^n$. Si $D^2 f(\mathbf{x}_k)$ es positiva definida, entonces m_k es convexa, y encontramos la dirección de Newton hallando el vector $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ como el mínimo global de esta función cuadrática. Esto es

$$\nabla m_k(\mathbf{d}) = \nabla f(\mathbf{x}_k) + D^2 f(\mathbf{x}_k)\, \mathbf{d} = \mathbf{0} \quad \Longrightarrow \quad \mathbf{d}_{Newton} = -\left(D^2 f(\mathbf{x}_k)\right)^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_k).$$

Descenso Gradiente

Otra dirección de búsqueda importante es la **dirección de Newton**. Ésta se deriva de la aproximación de Taylor de segundo orden

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}) &= f(\mathbf{x}_k) + \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d} + \tfrac{1}{2}\mathbf{d}^T D^2 f(\mathbf{x}_k)\,\mathbf{d} + o(||\mathbf{d}||^2). \\ &\approx \underbrace{f(\mathbf{x}_k) + \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d} + \tfrac{1}{2}\mathbf{d}^T D^2 f(\mathbf{x}_k)\,\mathbf{d}}_{m_k(\mathbf{d})}. \end{aligned} \tag{4}$$

Observe que $m_k(\mathbf{d})$ es una función cuadrática en $\mathbb{R}^n$. Si $D^2 f(\mathbf{x}_k)$ es positiva definida, entonces m_k es convexa, y encontramos la dirección de Newton hallando el vector $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ como el mínimo global de esta función cuadrática. Esto es

$$\nabla m_k(\mathbf{d}) = \nabla f(\mathbf{x}_k) + D^2 f(\mathbf{x}_k)\,\mathbf{d} = \mathbf{0} \quad \Longrightarrow \quad \mathbf{d}_{Newton} = -\big(D^2 f(\mathbf{x}_k)\big)^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_k).$$

- Podemos usar la dirección de Newton en un método de descenso gradiente siempre que $D^2 f \succ 0$.

Descenso Gradiente

Otra dirección de búsqueda importante es la **dirección de Newton**. Ésta se deriva de la aproximación de Taylor de segundo orden

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}) &= f(\mathbf{x}_k) + \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d} + \tfrac{1}{2}\mathbf{d}^T D^2 f(\mathbf{x}_k)\,\mathbf{d} + o(||\mathbf{d}||^2). \\ &\approx \underbrace{f(\mathbf{x}_k) + \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d} + \tfrac{1}{2}\mathbf{d}^T D^2 f(\mathbf{x}_k)\,\mathbf{d}}_{m_k(\mathbf{d})}. \end{aligned} \tag{4}$$

Observe que $m_k(\mathbf{d})$ es una función cuadrática en $\mathbb{R}^n$. Si $D^2 f(\mathbf{x}_k)$ es positiva definida, entonces m_k es convexa, y encontramos la dirección de Newton hallando el vector $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ como el mínimo global de esta función cuadrática. Esto es

$$\nabla m_k(\mathbf{d}) = \nabla f(\mathbf{x}_k) + D^2 f(\mathbf{x}_k)\,\mathbf{d} = 0 \quad \Longrightarrow \quad \mathbf{d}_{Newton} = -\big(D^2 f(\mathbf{x}_k)\big)^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_k).$$

- Podemos usar la dirección de Newton en un método de descenso gradiente siempre que $D^2 f \succ 0$.
- Usamos tamaño de paso $\alpha = 1$ con la dirección de Newton. Sin embargo, α puede ajustarse cuando los resultados no son satisfactorios.

Descenso Gradiente

Algoritmo: (*Descenso gradiente*, versión Newton)
Inputs: $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ función de clase C^2, con Hessiana $D^2 f$ positiva definida en cada punto; $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$, $\alpha_k > 0$ tamaño de paso (usualmente $\alpha_k = 1$).
Outputs: $\mathbf{x}$ punto crítico de f.

```
For k = 0,1,2,... hasta que se cumpla un criterio de paro:
```

    Define $\mathbf{d}_k = -\big(D^2 f(\mathbf{x}_k)\big)^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_k)$,
    Set $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k$.

Return $\mathbf{x}_{k+1}$.

Descenso Gradiente

Algoritmo: (*Descenso gradiente*, versión Newton)
Inputs: $f:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ función de clase C^2, con Hessiana $D^2 f$ positiva definida en cada punto; $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$, $\alpha_k > 0$ tamaño de paso (usualmente $\alpha_k = 1$).
Outputs: $\mathbf{x}$ punto crítico de f.

`For k = 0,1,2,... hasta que se cumpla un criterio de paro:`
  `Define` $\mathbf{d}_k = -\big(D^2 f(\mathbf{x}_k)\big)^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_k)$,
  `Set` $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k$.
`Return` $\mathbf{x}_{k+1}$.

Obs:

- Cuando $D^2 f(\mathbf{x}_k)$ no es positiva definida en alguno de los puntos iterados $\mathbf{x}_k$, el método aún se pude utilizar. En este caso, se reemplaza el hessiano por su aproximación simétrica $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, más cercana, que sea positiva definida.

Descenso Gradiente

Algoritmo: (*Descenso gradiente*, versión Newton)
Inputs: $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ función de clase C^2, con Hessiana $D^2 f$ positiva definida en cada punto; $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$, $\alpha_k > 0$ tamaño de paso (usualmente $\alpha_k = 1$).
Outputs: $\mathbf{x}$ punto crítico de f.

```
For k = 0,1,2,... hasta que se cumpla un criterio de paro:
    Define d_k = -(D^2 f(x_k))^{-1} ∇f(x_k),
    Set x_{k+1} = x_k + α_k d_k.
Return x_{k+1}.
```

For k = 0,1,2,... hasta que se cumpla un criterio de paro:
    Define $\mathbf{d}_k = -\big(D^2 f(\mathbf{x}_k)\big)^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_k)$,
    Set $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k$.
Return $\mathbf{x}_{k+1}$.

Obs:

- Cuando $D^2 f(\mathbf{x}_k)$ no es positiva definida en alguno de los puntos iterados $\mathbf{x}_k$, el método aún se pude utilizar. En este caso, se reemplaza el hessiano por su aproximación simétrica $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, más cercana, que sea positiva definida.

- Esto puede hacerse hallando la descomposición espectral $D^2 f(\mathbf{x}_k) = U \Lambda U^T$, y reemplazando todos los autovalores negativos de Λ por $\varepsilon > 0$; $A = U \Lambda_\varepsilon U^T$.

Descenso Gradiente

- El cálculo de la hessiana $D^2 f(\mathbf{x}_k)$ en cada iteración, consume mucho costo computacional (sobretodo en altas dimensiones).

Descenso Gradiente

- El cálculo de la hessiana $D^2 f(\mathbf{x}_k)$ en cada iteración, consume mucho costo computacional (sobretodo en altas dimensiones).

  Existen otros métodos de tipo gradiente que, en lugar de calcular exactamente el hessiano $D^2 f(\mathbf{x}_k)$, utilizan una aproximación B_k, que se actualiza en cada paso.

Descenso Gradiente

- El cálculo de la hessiana $D^2f(\mathbf{x}_k)$ en cada iteración, consume mucho costo computacional (sobretodo en altas dimensiones).

  Existen otros métodos de tipo gradiente que, en lugar de calcular exactamente el hessiano $D^2f(\mathbf{x}_k)$, utilizan una aproximación B_k, que se actualiza en cada paso.

  De la aproximación de Taylor

$$\begin{aligned}\nabla f(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}) &= \nabla f(\mathbf{x}_k) + \int_0^1 D^2f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d})\,\mathbf{d}\,dt \\ &= \nabla f(\mathbf{x}_k) + D^2f(\mathbf{x}_k)\,\mathbf{d} + \underbrace{\int_0^1 \big[D^2f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}) - D^2f(\mathbf{x}_k)\big]\mathbf{d}\,dt}_{o(||\mathbf{d}||)}.\end{aligned}$$

Descenso Gradiente

- El cálculo de la hessiana $D^2f(\mathbf{x}_k)$ en cada iteración, consume mucho costo computacional (sobretodo en altas dimensiones).

  Existen otros métodos de tipo gradiente que, en lugar de calcular exactamente el hessiano $D^2f(\mathbf{x}_k)$, utilizan una aproximación B_k, que se actualiza en cada paso.

  De la aproximación de Taylor

$$\begin{aligned}\nabla f(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}) &= \nabla f(\mathbf{x}_k) + \int_0^1 D^2f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d})\,\mathbf{d}\,dt \\ &= \nabla f(\mathbf{x}_k) + D^2f(\mathbf{x}_k)\,\mathbf{d} + \underbrace{\int_0^1 \left[D^2f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}) - D^2f(\mathbf{x}_k)\right]\mathbf{d}\,dt}_{o(||\mathbf{d}||)}.\end{aligned}$$

  Haciendo $\mathbf{d} = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k$, $\Rightarrow \nabla f(\mathbf{x}_{k+1}) = \nabla f(\mathbf{x}_k) + D^2f(\mathbf{x}_k)\,(\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k) + o(||\mathbf{d}||)$.

Descenso Gradiente

- El cálculo de la hessiana $D^2 f(\mathbf{x}_k)$ en cada iteración, consume mucho costo computacional (sobretodo en altas dimensiones).

  Existen otros métodos de tipo gradiente que, en lugar de calcular exactamente el hessiano $D^2 f(\mathbf{x}_k)$, utilizan una aproximación B_k, que se actualiza en cada paso.

  De la aproximación de Taylor

$$
\begin{aligned}
\nabla f(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}) &= \nabla f(\mathbf{x}_k) + \int_0^1 D^2 f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d})\,\mathbf{d}\,dt \\
&= \nabla f(\mathbf{x}_k) + D^2 f(\mathbf{x}_k)\,\mathbf{d} + \underbrace{\int_0^1 \left[D^2 f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}) - D^2 f(\mathbf{x}_k)\right]\mathbf{d}\,dt}_{o(||\mathbf{d}||)}.
\end{aligned}
$$

  Haciendo $\mathbf{d} = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k$, $\Rightarrow \nabla f(\mathbf{x}_{k+1}) = \nabla f(\mathbf{x}_k) + D^2 f(\mathbf{x}_k)\,(\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k) + o(||\mathbf{d}||)$. Cuando $\mathbf{x}_k, \mathbf{x}_{k+1}$ están en una región cercana al mínimo $\mathbf{x}^*$, donde $D^2 f(\mathbf{x}_k) \succ 0$, resulta

$$
D^2 f(\mathbf{x}_k)\,\mathbf{d} \approx \nabla f(\mathbf{x}_{k+1}) - \nabla f(\mathbf{x}_k). \tag{5}
$$

Descenso Gradiente

Así, elegimos la aproximación de B_{k+1} de modo que imite la propiedad (5) anterior.

Descenso Gradiente

Así, elegimos la aproximación de B_{k+1} de modo que imite la propiedad (5) anterior. Así, requerimos que B_{k+1} cumpla la **ecuación secante**:

$$B_{k+1}\mathbf{s}_k = \mathbf{y}_k, \tag{6}$$

donde $\mathbf{s}_k = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k$, y $\mathbf{y}_k = \nabla f(\mathbf{x}_{k+1}) - \nabla f(\mathbf{x}_k)$.

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Descenso Gradiente

Así, elegimos la aproximación de B_{k+1} de modo que imite la propiedad (5) anterior. Así, requerimos que B_{k+1} cumpla la **ecuación secante**:

$$B_{k+1}\mathbf{s}_k = \mathbf{y}_k, \tag{6}$$

donde $\mathbf{s}_k = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k$, y $\mathbf{y}_k = \nabla f(\mathbf{x}_{k+1}) - \nabla f(\mathbf{x}_k)$. Además, requerimos que B_{k+1} sea simétrica, y que la diferencia $B_{k+1} - B_k$ sea de bajo rango.

Así, elegimos la aproximación de B_{k+1} de modo que imite la propiedad (5) anterior. Así, requerimos que B_{k+1} cumpla la **ecuación secante**:

$$B_{k+1}\mathbf{s}_k = \mathbf{y}_k, \tag{6}$$

donde $\mathbf{s}_k = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k$, y $\mathbf{y}_k = \nabla f(\mathbf{x}_{k+1}) - \nabla f(\mathbf{x}_k)$. Además, requerimos que B_{k+1} sea simétrica, y que la diferencia $B_{k+1} - B_k$ sea de bajo rango.

Estos son los métodos llamados **métodos quasi-Newton**.

Descenso Gradiente

Así, elegimos la aproximación de B_{k+1} de modo que imite la propiedad (5) anterior. Así, requerimos que B_{k+1} cumpla la **ecuación secante**:

$$B_{k+1}\mathbf{s}_k = \mathbf{y}_k, \tag{6}$$

donde $\mathbf{s}_k = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k$, y $\mathbf{y}_k = \nabla f(\mathbf{x}_{k+1}) - \nabla f(\mathbf{x}_k)$. Además, requerimos que B_{k+1} sea simétrica, y que la diferencia $B_{k+1} - B_k$ sea de bajo rango.

Estos son los métodos llamados **métodos quasi-Newton**. Dos de las fórmulas más populares para actualizar el hessiano son

- el método **simétrico de rango 1 (SR1)**:

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(\mathbf{y}_k - B_k\mathbf{s}_k)(\mathbf{y}_k - B_k\mathbf{s}_k)^T}{(\mathbf{y}_k - B_k\mathbf{s}_k)^T\mathbf{s}_k}.$$

Descenso Gradiente

Así, elegimos la aproximación de B_{k+1} de modo que imite la propiedad (5) anterior. Así, requerimos que B_{k+1} cumpla la **ecuación secante**:

$$B_{k+1}\mathbf{s}_k = \mathbf{y}_k, \tag{6}$$

donde $\mathbf{s}_k = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k$, y $\mathbf{y}_k = \nabla f(\mathbf{x}_{k+1}) - \nabla f(\mathbf{x}_k)$. Además, requerimos que B_{k+1} sea simétrica, y que la diferencia $B_{k+1} - B_k$ sea de bajo rango.

Estos son los métodos llamados **métodos quasi-Newton**. Dos de las fórmulas más populares para actualizar el hessiano son

- el método **simétrico de rango 1 (SR1)**:

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(\mathbf{y}_k - B_k\mathbf{s}_k)(\mathbf{y}_k - B_k\mathbf{s}_k)^T}{(\mathbf{y}_k - B_k\mathbf{s}_k)^T\mathbf{s}_k}.$$

- el método **BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno)**:

$$B_{k+1} = B_k - \frac{B_k\mathbf{s}_k\mathbf{s}_k^T B_k^T}{\mathbf{s}_k^T B_k \mathbf{s}_k} + \frac{\mathbf{y}_k\mathbf{y}_k^T}{\mathbf{y}_k^T\mathbf{s}_k}.$$