# T2.2 Métodos de optimización de primer orden y SGD

**Índice**

# 1 Introducción

## 1.1 Optimización local vs global

### 1.1.1 Definiciones

**Optimización global de un objetivo:** consiste en hallar un **óptimo global**, esto es, una solución no mejorable por ninguna otra

**Optimización local de un objetivo:** más modesta que la global, consiste en hallar un **óptimo local**, es decir, un solución no mejorable por ninguna otra en un entorno local

**Mínimo local (plano):** $\boldsymbol{\theta}^*$ tal que $\exists\,\delta>0,\quad\forall\,\boldsymbol{\theta}\in\Theta\,:\,\|\boldsymbol{\theta}-\boldsymbol{\theta}^*\|<\delta,\quad\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}^*)\leq\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})$

**Mínimo local estricto:** $\boldsymbol{\theta}^*$ tal que $\exists\,\delta>0,\quad\forall\,\boldsymbol{\theta}\in\Theta,\,\boldsymbol{\theta}\neq\boldsymbol{\theta}^*\,:\,\|\boldsymbol{\theta}-\boldsymbol{\theta}^*\|<\delta,\quad\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}^*)<\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})$

### 1.1.2 Condiciones de optimalidad local

**Objetivo, gradiente y Hessiana:** sea $\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})$ doblemente diferenciable, con gradiente $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{\theta})=\nabla\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})$ y Hessiana $\boldsymbol{H}(\boldsymbol{\theta})=\nabla^2\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})$

**Gradiente y Hessiana en $\boldsymbol{\theta}^*\in\mathbb{R}^D$:** $\boldsymbol{g}^*=\boldsymbol{g}(\boldsymbol{\theta})|_{\boldsymbol{\theta}^*}$ y $\boldsymbol{H}^*=\boldsymbol{H}(\boldsymbol{\theta})|_{\boldsymbol{\theta}^*}$

**Necesidad de punto estacionario:** $\boldsymbol{g}^*=\mathbf{0}$; si no, $\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}^*)$ puede minorarse a pequeña distancia en la dirección del negativo del gradiente

**Insuficiencia de punto estacionario:** $\boldsymbol{g}^* = \mathbf{0}$ también se cumple si $\boldsymbol{\theta}^*$ es máximo local o punto de silla (en 2d)

**Condición suficiente de optimalidad local:** si $\boldsymbol{g}^* = \mathbf{0}$ y $\boldsymbol{H}^*$ es (semi-)definida positiva, $\boldsymbol{\theta}^*$ es un mínimo local

- $\boldsymbol{H}^* \succeq 0$ garantiza que el objetivo no decrece en el entorno del punto, por lo que $\boldsymbol{\theta}^*$ es mínimo local (plano)
- $\boldsymbol{H}^* \succ 0$ garantiza que el objetivo crece en el entorno del punto, por lo que $\boldsymbol{\theta}^*$ es mínimo local estricto

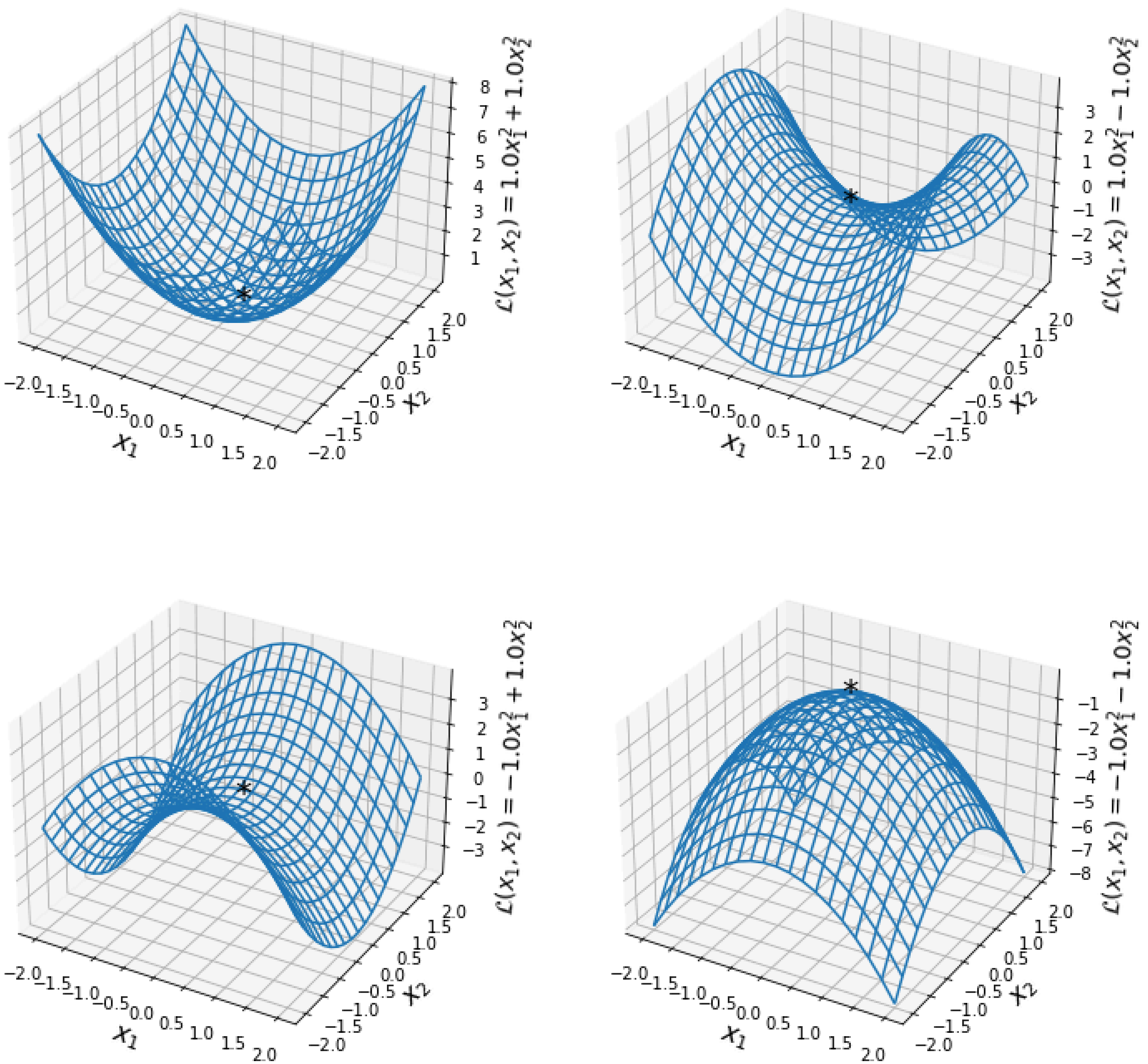
**Ejemplo:** $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2)^t \qquad \boldsymbol{x}^* = \mathbf{0} \qquad \mathcal{L}(\boldsymbol{x}) = a_1 x_1^2 + a_2 x_2^2, \quad a_1, a_2 \neq 0$

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = (2a_1x_1, 2a_2x_2) \qquad \boldsymbol{g}^* = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})|_{\boldsymbol{x}^*} = \mathbf{0}$$

$$\mathbf{H}(\boldsymbol{x}) = \operatorname{diag}(2a_1, 2a_2) \qquad \mathbf{H}^* = \mathbf{H}(\boldsymbol{x})|_{\boldsymbol{x}^*} = \operatorname{diag}(2a_1, 2a_2) = \begin{cases} \succ 0 & \text{si } a_1, a_2 > 0 \\ \prec 0 & \text{si } a_1, a_2 < 0 \\ \text{indefinida} & a_1, a_2 \text{ de signo opuesto} \end{cases}$$

In [1]:

```python
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
def L(x1, x2, a=1, b=1):
    return a*x1**2 + b*x2**2
x1, x2 = np.meshgrid(np.linspace(-2, 2, 20), np.linspace(-2, 2, 20))
ab = np.array([[1, 1], [1, -1], [-1, 1], [-1, -1]]).astype(float)
nrows, ncols, size = 2, 2, 6
fig = plt.figure(figsize=(size * ncols, size * nrows))
fig.tight_layout()
for i, abi in enumerate(ab):
    ax = fig.add_subplot(nrows, ncols, i+1, projection='3d')
    ax.set_xlabel('$x_1$', fontsize=16)
    ax.set_ylabel('$x_2$', fontsize=16)
    zlabel = '${:}x_1^2{:+}x_2^2$'.format(abi[0], abi[1])
    ax.set_zlabel('$\mathcal{L}(x_1,x_2)=$' + zlabel, fontsize=14)
    ax.text(0, 0, 0, '*', fontsize=20)
    ax.plot_wireframe(x1, x2, L(x1, x2, a=abi[0], b=abi[1]))
```


$\mathcal{L}(x_1, x_2) = 1.0x_1^2 + 1.0x_2^2$
$\mathcal{L}(x_1, x_2) = 1.0x_1^2 - 1.0x_2^2$
$\mathcal{L}(x_1, x_2) = -1.0x_1^2 + 1.0x_2^2$
$\mathcal{L}(x_1, x_2) = -1.0x_1^2 - 1.0x_2^2$
$x_1$
$x_2$

# 1.2 Optimización con o sin restricciones

## 1.2.1 Optimización sin restricciones

**Optimización sin restricciones:** cualquier valor del espacio paramétrico $\boldsymbol{\Theta}$ es **solución posible** para minimizar la pérdida

## 1.2.2 Optimización con restricciones

**Optimización con restricciones:** sujeta a (que el valor hallado pertenezca a) un cierto **conjunto de soluciones posibles** $\mathcal{C} \subseteq \boldsymbol{\Theta}$,

$$\boldsymbol{\theta}^* = \operatorname*{argmin}_{\boldsymbol{\theta}\in\mathcal{C}} \; \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})$$

$\mathcal{C}$ suele caracterizarse con **restricciones de desigualdad**, $g_j(\boldsymbol{\theta}) \leq 0$ para $j \in \mathcal{I}$, y **restricciones de igualdad**, $h_k(\boldsymbol{\theta}) = 0$ para $k \in \mathcal{E}$:

$$\mathcal{C} = \{\boldsymbol{\theta} : g_j(\boldsymbol{\theta}) \leq 0 : j \in \mathcal{I},\; h_k(\boldsymbol{\theta}) = 0 : k \in \mathcal{E}\} \subseteq \mathbb{R}^D$$

**Adición de restricciones:** puede cambiar el número de óptimos y, por lo general, complica la búsqueda de soluciones posibles

**Relajación de restricciones:** estrategia usual de simplificación de problemas que consiste en **relajar** (eliminar) restricciones y añadir un **término de penalización** al objetivo por cada restricción relajada

## 1.2.3 Relajación de restricciones de igualdad

Las restricciones de igualdad se "suben" al objetivo junto con **multiplicadores de Lagrange** para construir un objetivo extendido o **Lagrangiana**,

$$\boldsymbol{\theta}^* = \operatorname*{argmin}_{\boldsymbol{\theta}\in\mathcal{C}^{\leq 0}} \; \min_{\boldsymbol{\lambda}\in\mathbb{R}^{|\mathcal{E}|}} \; L(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}) \quad \text{con} \quad L(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}) = \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}) + \sum_{k\in\mathcal{E}} \lambda_k h_k(\boldsymbol{\theta})$$

Todo **punto crítico** (estacionario) de la Lagrangiana requiere el cumplimiento de las restricciones:

$$\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\lambda}} L(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\lambda}) = \mathbf{0} \qquad \text{sii} \qquad \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{\theta}}\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}) + \sum_{k\in\mathcal{E}} \lambda_k \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{\theta}} h_k(\boldsymbol{\theta}) = \mathbf{0} \quad \text{y} \quad h_k(\boldsymbol{\theta}) = 0 \;\text{ para }\; k \in \mathcal{E}$$

### 1.2.4 Relajación de restricciones de desigualdad

Las restricciones de desigualdad (p.e. de no negatividad) pueden relajarse de manera parecida a las de igualdad, aunque muchas veces se ignoran sin más y simplemente comprobamos que la solución hallada (sin tenerlas en cuenta) las satisface

# 2 Métodos de primer orden

## 2.1 Método básico

**Métodos de primer orden:** métodos iterativos basados en derivadas de primer orden del objetivo

**Método básico:** dado un punto de inicio $\boldsymbol{\theta}_0,$ la iteración $t$ consiste en hacer un paso de actualización (de $\boldsymbol{\theta}$)

$$\boldsymbol{\theta}_{t+1} = \boldsymbol{\theta}_t + \eta_t \boldsymbol{d}_t$$

- $\eta_t$ es el **tamaño del paso (step size)** o **factor de aprendizaje (learning rate)**
- $\boldsymbol{d}_t$ es una **dirección de descenso** como el negativo del **gradiente**, dado por $\boldsymbol{g}_t = \nabla\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})|_{\boldsymbol{\theta}_t}$
- los pasos de actualización se suceden hasta que el método alcanza un punto estacionario, esto es, de gradiente nulo

## 2.2 Dirección de descenso

### 2.2.1 Dirección de descenso

**Dirección de descenso:** $\boldsymbol{d}$ es de descenso si existe un $\eta_{\max} > 0$ tal que

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}+\eta\boldsymbol{d})<\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})\qquad\text{para todo }\eta\in(0,\eta_{\text{max}})$$

**Dirección de máximo ascenso:** gradiente en $\boldsymbol{\theta}_t,\ \boldsymbol{g}_t=\nabla\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})|_{\boldsymbol{\theta}_t}=\nabla\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}_t)=\boldsymbol{g}(\boldsymbol{\theta}_t)$

**Dirección de máximo descenso:** neg-gradiente

**Caracterización de dirección de descenso $\boldsymbol{d}_t$:** $\boldsymbol{d}_t^t\boldsymbol{g}_t<0$ ($\boldsymbol{d}_t$ y $\boldsymbol{g}_t$ forman un ángulo mayor de $90$ grados en el plano que los contiene)

**Direcciones de descenso usuales:** $\boldsymbol{d}_t=-\mathbf{B}_t\boldsymbol{g}_t$ con $\mathbf{B}_t\succ 0$

## 2.2.2 Descenso por gradiente o más pronunciado

**Gradient o steepest descent:** escoge el neg-gradiente como dirección de descenso, $\boldsymbol{\theta}_{t+1}=\boldsymbol{\theta}_t-\eta_t\boldsymbol{g}_t$

**Ejemplo:** $\mathcal{L}(\theta)=\theta^2$, $\theta_0=10$, $\eta_t=0.2$, tolerancia $0.01$

In [1]:
```
import numpy as np
grad, theta, eta, tol, delta = lambda t: 2*t, 10.0, 0.2, 0.01, np.inf
while np.abs(delta) > tol:
        delta = -eta * grad(theta)
        theta += delta
        print(np.round(delta, 4), np.round(theta, 4))
```

```
-4.0 6.0
-2.4 3.6
-1.44 2.16
-0.864 1.296
-0.5184 0.7776
-0.311 0.4666
-0.1866 0.2799
-0.112 0.168
-0.0672 0.1008
-0.0403 0.0605
-0.0242 0.0363
-0.0145 0.0218
-0.0087 0.0131
```

# 2.3 Factor de aprendizaje

**Learning rate schedule:** secuencia de tamaños de paso $\{\eta_t\}$

## 2.3.1 Factor de aprendizaje constante

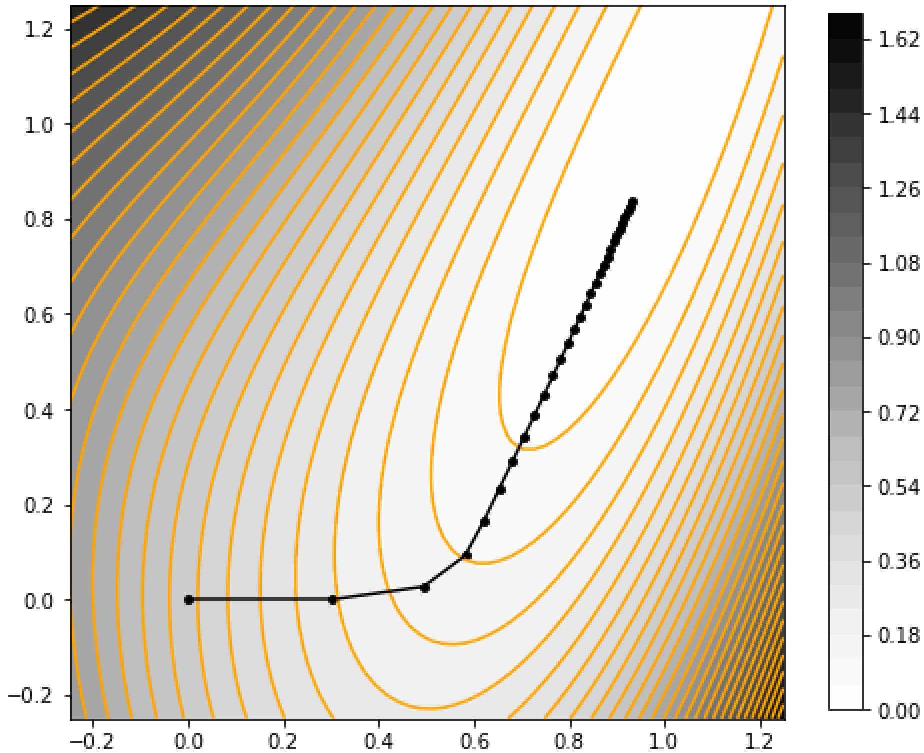
**Tamaño de paso constante:** es la opción más sencilla, $\eta_t = \eta$

**Ejemplo:** $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2)^t \qquad \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}) = 0.5(\theta_1^2 - \theta_2)^2 + 0.5(\theta_1 - 1)^2$

$\nabla\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}) = (2\theta_1(\theta_1^2 - \theta_2) + \theta_1 - 1, \theta_2 - \theta_1^2)^t \qquad \boldsymbol{\theta}_0 = \mathbf{0} \qquad \eta_t = 0.3$ tolerancia $0.01$

In [1]:
```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from matplotlib.collections import LineCollection
def plot_8_2_2(ax, x, y, L, TH, levels=30, shrink=0.8):
    X, Y = np.meshgrid(x, y); XY = np.c_[np.ravel(X), np.ravel(Y)]; LL = np.apply_along_axis(L, 1, XY)
    ax.contour(X, Y, LL.reshape(X.shape), levels, colors='orange')
    cp = ax.contourf(X, Y, LL.reshape(X.shape), levels, cmap='Greys')
    plt.colorbar(cp, ax=ax, shrink=shrink)
    T = TH.shape[0]; lines = np.hstack((TH[:-1, :], TH[1:, :])).reshape(T-1, 2, 2)
    ax.add_collection(LineCollection(lines, colors='black', linestyle='solid'));
    ax.scatter(TH[:, 0], TH[:, 1], s=15, c='black', marker='o')
```

In [2]:
```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
eta = 0.3 # <--- con otros valores no converge o lo hace muy lentamente
L = lambda th: 0.5 * np.square(np.square(th[0]) - th[1]) + 0.5 * np.square(th[0] - 1)
grad = lambda th: np.array([2 * th[0] * (np.square(th[0]) - th[1]) + th[0] - 1, th[1] - np.square(th[0])])
T = 100; TH = np.zeros((T, 2)); tol = 0.01; delta = np.inf; t = 1
while np.max(np.abs(delta)) > tol and t < T:
    delta = -eta * grad(TH[t-1, :]); TH[t, :] = TH[t-1, :] + delta; t = t + 1
th1, th2 = np.linspace(-0.25, 1.25, num=64), np.linspace(-0.25, 1.25, num=64)
fig, ax = plt.subplots(1, 1, figsize=(8, 8)); ax.set(aspect='equal')
plot_8_2_2(ax, th1, th2, L, TH[:t, :]);
```




## 2.3.2 Convergencia de descenso por gradiente

**En general:** puede no converger si $\eta$ es muy grande, o hacerlo muy lentamente si es muy pequeño

**Objetivo cuadrático:** si $\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})=\frac{1}{2}\boldsymbol{\theta}^t\mathbf{A}\boldsymbol{\theta}+\boldsymbol{b}^t\boldsymbol{\theta}+c,\;\;\mathbf{A}\succeq\mathbf{0},$ converge si $\eta$ se acota con la pendiente más pronunciada, $\lambda_{\max}(\mathbf{A})$

$$\eta<\frac{2}{\lambda_{\max}(\mathbf{A})}$$

**Gradiente Lipschitz con $L>0$:** converge si $\eta<\frac{2}{L},$ pero $L$ suele ser desconocida

## 2.3.3 Búsqueda lineal

**Búsqueda lineal:** halla el paso óptimo en la dirección escogida, $\eta_t = \underset{\eta>0}{\operatorname{argmin}}\ \phi_t(\eta)$ con $\phi_t(\eta) = \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}_t + \eta \boldsymbol{d}_t)$

**Búsqueda lineal exacta:** si $\mathcal{L}$ es convexa, la búsqueda lineal puede resolverse analíticamente

**Ejemplo de búsqueda lineal exacta:** $\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{\theta}^t\mathbf{A}\boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{b}^t\boldsymbol{\theta} + c$

$$\begin{aligned}\frac{d\phi(\eta)}{d\eta} &= \frac{d}{d\eta}\left[\frac{1}{2}(\boldsymbol{\theta}+\eta\boldsymbol{d})^t\mathbf{A}(\boldsymbol{\theta}+\eta\boldsymbol{d}) + \boldsymbol{b}^t(\boldsymbol{\theta}+\eta\boldsymbol{d}) + c\right]\\ &= \boldsymbol{d}^t\mathbf{A}(\boldsymbol{\theta}+\eta\boldsymbol{d}) + \boldsymbol{d}^t\boldsymbol{b}\\ &= \boldsymbol{d}^t(\mathbf{A}\boldsymbol{\theta}+\boldsymbol{b}) + \eta\boldsymbol{d}^t\mathbf{A}\boldsymbol{d} \stackrel{!}{=} 0 \to \eta = -\frac{\boldsymbol{d}^t(\mathbf{A}\boldsymbol{\theta}+\boldsymbol{b})}{\boldsymbol{d}^t\mathbf{A}\boldsymbol{d}}\end{aligned}$$

**Búsqueda lineal aproximada:** emplea algún método eficiente que garantice una reducción suficiente del objetivo

**Método de backtracking Armijo:** parte del $\eta$ actual o uno grande y lo reduce iterativamente mediante un factor $\beta \in (0,1)$ hasta cumplir la **condición de Armijo-Goldstein**, $\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}_t + \eta\boldsymbol{d}_t) \leq \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}_t) + c\,\eta\,\boldsymbol{d}_t^t\,\boldsymbol{g}_t,$ donde $c \in (0,1)$ es una constante, típicamente $c = 10^{-4}$

# 2.4 Momentum

**Momentum en física:** producto de la masa de un cuerpo por su velocidad instantánea; se conserva en un sistema cerrado

**Momentum en descenso por gradiente:** heurísticos para acelerar la convergencia en regiones llanas de la pérdida

## 2.4.1 Momentum

**Momentum:** acelera el movimiento en direcciones previamente buenas y lo frena en las que el gradiente ha cambiado súbitamente, como una bola pesada rodando montaña abajo; dada una constante $\beta \in [0,1)$ ($\beta = 0.9$), el momentum $\boldsymbol{m}_t$ se aplica como sigue:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{m}_{t+1} &= \beta\boldsymbol{m}_t + \boldsymbol{g}_t\\ \boldsymbol{\theta}_{t+1} &= \boldsymbol{\theta}_t - \eta_t\boldsymbol{m}_{t+1}\end{aligned}$$

**Interpretación:** con $\beta = 0$ es descenso por gradiente; si no, es una media movil ponderada exponencialmente **(EWMA)**

$$\boldsymbol{m}_t = \beta\boldsymbol{m}_{t-1} + \boldsymbol{g}_{t-1} = \beta^2\boldsymbol{m}_{t-2} + \beta\boldsymbol{g}_{t-2} + \boldsymbol{g}_{t-1} = \cdots = \sum_{\tau=0}^{t-1}\beta^\tau\boldsymbol{g}_{t-\tau-1} \overset{\{\boldsymbol{m}_t\}=\boldsymbol{g}}{=} \boldsymbol{g}\sum_{\tau=0}^{t-1}\beta^\tau \overset{t\to\infty}{=} \frac{\boldsymbol{g}}{1-\beta} \overset{\beta=0.9}{=} 10\,\boldsymbol{g}$$

**Incoveniente:** oscila al final del valle por no frenar bastante

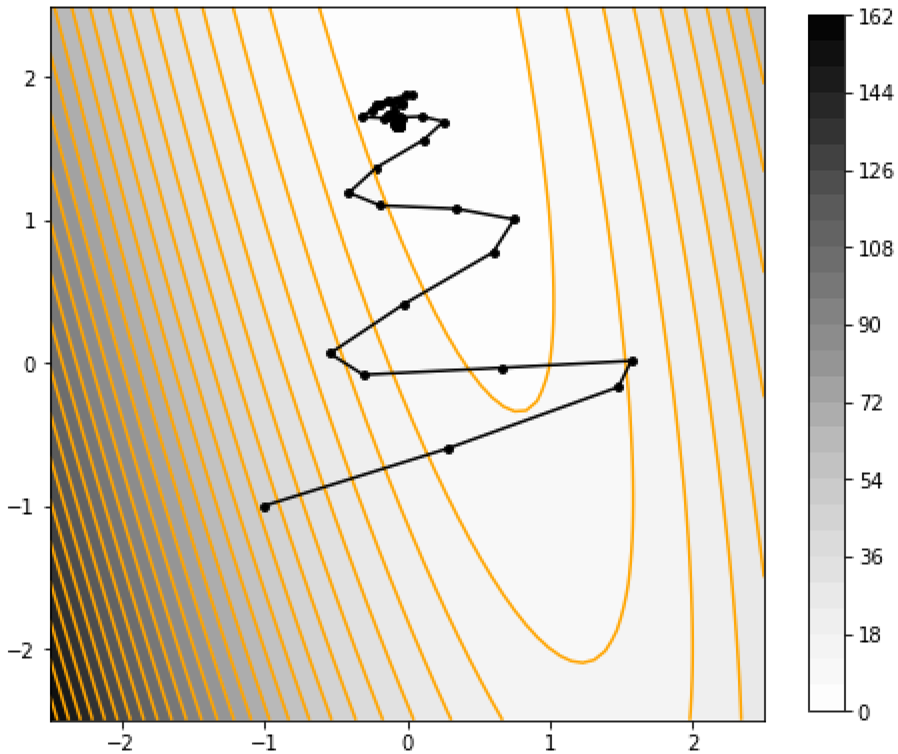
**Ejemplo (cont.):** $\mathbf{A} = \begin{pmatrix}20 & 5\\ 5 & 16\end{pmatrix}$ bien condicionada y $\mathbf{A} = \begin{pmatrix}20 & 5\\ 5 & 2\end{pmatrix}$ peor condicionada; $\boldsymbol{b} = (-14, -6)^t$, $c = 10$

In [1]:
```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from matplotlib.collections import LineCollection
def plot_8_2_4(ax, x, y, L, TH, levels=30, shrink=0.8):
    X, Y = np.meshgrid(x, y); XY = np.c_[np.ravel(X), np.ravel(Y)]; LL = np.apply_along_axis(L, 1, XY)
    ax.contour(X, Y, LL.reshape(X.shape), levels, colors='orange')
    cp = ax.contourf(X, Y, LL.reshape(X.shape), levels, cmap='Greys')
    plt.colorbar(cp, ax=ax, shrink=shrink)
    T = TH.shape[0]; lines = np.hstack((TH[:-1, :], TH[1:, :])).reshape(T-1, 2, 2)
    ax.add_collection(LineCollection(lines, colors='black', linestyle='solid'));
    ax.scatter(TH[:, 0], TH[:, 1], s=15, c='black', marker='o')
```

In [2]:
```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
beta = 0.8 # <--- prueba otros valores
eta = 0.02 # <--- con otros valores no converge o lo hace muy lentamente
# A, b, c = np.array([ [20, 5], [5, 16] ]), np.array([-14, -6]), 10 # <--- bien condicionada
A, b, c = np.array([ [20, 5], [5,  2] ]), np.array([-14, -6]), 10 # <--- mal condicionada
print("Número de condición: ", np.round(np.linalg.cond(A), 4))
L = lambda th: 0.5 * th.T @ A @ th + b @ th + c
grad = lambda th: (A + A.T) @ th + b
T = 1000; TH = np.zeros((T, 2)); TH[0, :] = np.array([-1.0, -1.0])
tol = 1e-4; delta = np.inf; t = 1; m = np.zeros(2)
```

```
while np.max(np.abs(delta)) > tol and t < T:
    m = beta * m + grad(TH[t-1, :]); delta = -eta * m; TH[t, :] = TH[t-1, :] + delta; t = t + 1
th1, th2 = np.linspace(-2.5, 2.5, num=64), np.linspace(-2.5, 2.5, num=64)
fig, ax = plt.subplots(1, 1, figsize=(8, 8)); ax.set(aspect='equal')
plot_8_2_4(ax, th1, th2, L, TH[:t, :])
print("Theta: ", TH[t-1, :], " L(Theta): ", L(TH[t-1, :]), " Iteraciones: ", t-1)
```

```
Número de condición:  30.2336
Theta:  [-0.06685106  1.66676201]  L(Theta):  3.201004965606007  Iteraciones:  81
```




## 2.4.2 Momentum Nesterov

**Gradiente acelerado de Nesterov:** añade un paso de extrapolación a descenso por gradiente que actúa a modo de "mirada al futuro" **(look-ahead)** para amortiguar oscilaciones

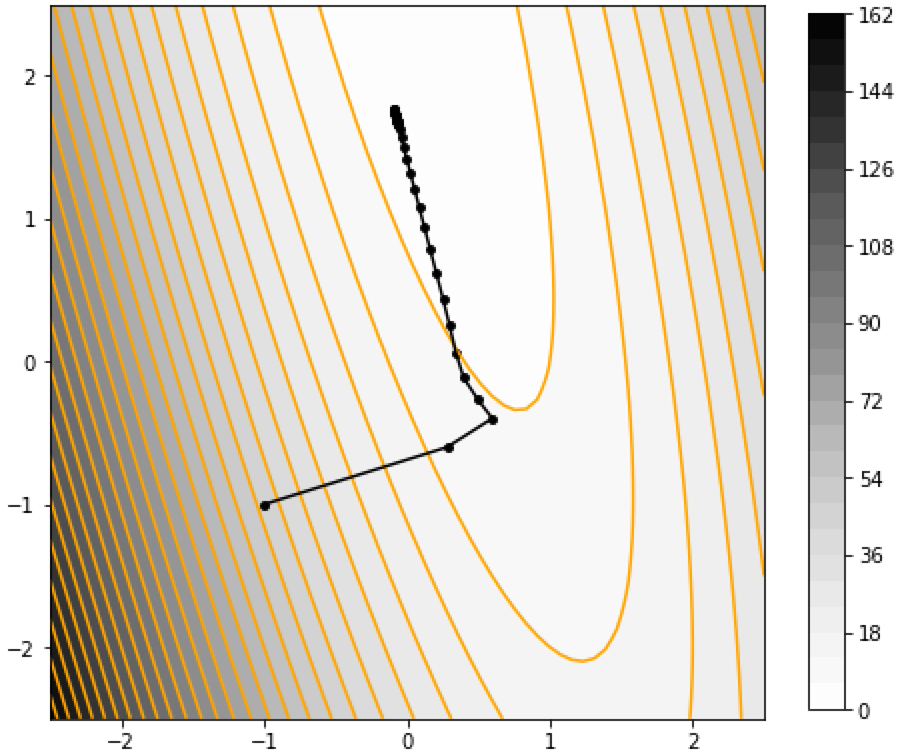
$$\tilde{\boldsymbol{\theta}}_{t+1} = \boldsymbol{\theta}_t + \beta_t(\boldsymbol{\theta}_t - \boldsymbol{\theta}_{t-1})$$
$$\boldsymbol{\theta}_{t+1} = \tilde{\boldsymbol{\theta}}_{t+1} - \eta_t \nabla \mathcal{L}(\tilde{\boldsymbol{\theta}}_{t+1})$$

**Momentum Nesterov:** gradiente acelerado de Nesterov expresado como momentum

$$\boldsymbol{m}_{t+1} = \beta \boldsymbol{m}_t - \eta_t \nabla \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}_t + \beta \boldsymbol{m}_t)$$
$$\boldsymbol{\theta}_{t+1} = \boldsymbol{\theta}_t + \boldsymbol{m}_{t+1}$$

In [3]:
```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
beta = 0.8 # <--- prueba otros valores
eta = 0.02 # <--- con otros valores no converge o lo hace muy lentamente
# A, b, c = np.array([ [20, 5], [5, 16] ]), np.array([-14, -6]), 10 # <--- bien condicionada
A, b, c = np.array([ [20, 5], [5,  2] ]), np.array([-14, -6]), 10 # <--- mal condicionada
print("Número de condición: ", np.round(np.linalg.cond(A), 4))
L = lambda th: 0.5 * th.T @ A @ th + b @ th + c
grad = lambda th: (A + A.T) @ th + b
T = 1000; TH = np.zeros((T, 2)); TH[0, :] = np.array([-1.0, -1.0])
tol = 1e-4; delta = np.inf; t = 1; m = np.zeros(2)
while np.max(np.abs(delta)) > tol and t < T:
    m = beta * m - eta * grad(TH[t-1, :] + beta * m); delta = m; TH[t, :] = TH[t-1, :] + delta; t = t + 1
th1, th2 = np.linspace(-2.5, 2.5, num=64), np.linspace(-2.5, 2.5, num=64)
fig, ax = plt.subplots(1, 1, figsize=(8, 8)); ax.set(aspect='equal')
plot_8_2_4(ax, th1, th2, L, TH[:t, :])
print("Theta: ", TH[t-1, :], " L(Theta): ", L(TH[t-1, :]), " Iteraciones: ", t-1)
```

```
Número de condición:  30.2336
Theta:  [-0.06550228  1.66217315]  L(Theta):  3.2053374263477625  Iteraciones:  49
```




# 3 Descenso por gradiente estocástico

## 3.1 Método básico

**Optimización estocástica:** minimiza el valor esperado del objetivo con respecto a cierta variable aleatoria $\boldsymbol{z}$ añadida

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}) = \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{z})]$$

**Stochastic gradient descent (SGD):** en la iteración $t$ observamos $\mathcal{L}_t(\boldsymbol{\theta}) = \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{z}_t)$ con $\boldsymbol{z}_t \sim q$

$$\boldsymbol{\theta}_{t+1} = \boldsymbol{\theta}_t - \eta_t \, \nabla\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}_t, \boldsymbol{z}_t) = \boldsymbol{\theta}_t - \eta_t \, \boldsymbol{g}_t$$

donde $\nabla\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}_t, \boldsymbol{z}_t)$ es un estimador insesgado del gradiente de $\mathcal{L}$; por ejemplo, $\boldsymbol{g}_t = \nabla_{\boldsymbol{\theta}}\mathcal{L}_t(\boldsymbol{\theta}_t)$ si $q(\boldsymbol{z})$ no depende de $\boldsymbol{\theta}$

**Convergencia de SGD:** si $\boldsymbol{g}_t$ es insesgado, converge a un punto estacionario

# 3.2 Aplicación a problemas de sumas finitas

**Problema de sumas finitas:** por ejemplo, minimizar el riesgo empírico

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}_t) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\ell(\boldsymbol{y}_n, f(\boldsymbol{x}_n; \boldsymbol{\theta}_t)) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\mathcal{L}_n(\boldsymbol{\theta}_t)$$

**Gradiente del riesgo empírico:**

$$\boldsymbol{g}_t = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\nabla_{\boldsymbol{\theta}}\mathcal{L}_n(\boldsymbol{\theta}_t) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\nabla_{\boldsymbol{\theta}}\ell(\boldsymbol{y}_n, f(\boldsymbol{x}_n; \boldsymbol{\theta}_t))$$

**Minibatch:** $\mathcal{B}_t$, muestreo de $B \ll N$ muestras en la iteración $t$, a partir del cual obtenemos un estimador insesgado de $\boldsymbol{g}_t$

$$\boldsymbol{g}_t \approx \frac{1}{|\mathcal{B}_t|}\sum_{n\in\mathcal{B}_t}\nabla_{\boldsymbol{\theta}}\mathcal{L}_n(\boldsymbol{\theta}_t) = \frac{1}{|\mathcal{B}_t|}\sum_{n\in\mathcal{B}_t}\nabla_{\boldsymbol{\theta}}\ell(\boldsymbol{y}_n, f(\boldsymbol{x}_n; \boldsymbol{\theta}_t))$$