# Implementación de Técnicas de Descenso de Gradiente Estocástico y Variantes: Una Perspectiva desde el Análisis Numérico

Una Comparación Experimental y Teórica

#### Brandon Trigueros

Curso de Análisis Numérico Facultad de Ingeniería Universidad de Costa Rica

24 de junio de 2025

### Índice

- Introducción
- Pundamentos Teóricos
- 3 Implementación del Experimento
- 4 Conexión con Análisis Numérico
- Resultados y Análisis
- 6 Conclusiones

# ¿Por qué importa el Descenso de Gradiente?

### ¡Está en TODAS partes!

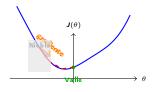
- Google: PageRank optimiza rankings de páginas web
- Netflix: Sistemas de recomendación personalizados
- Tesla: Conducción autónoma y visión computacional
- ChatGPT: Entrenamiento de modelos de lenguaje masivos
- Medicina: Diagnóstico por imágenes médicas (rayos X, resonancias)

### El Desafío

- **Problema**: Optimizar funciones con millones/billones de parámetros
- Datasets: Terabytes de información (Twitter, YouTube, Amazon)
- **Tiempo**: Entrenar GPT-3 costó \$4.6 millones en cómputo

**Pregunta clave:** ¿Cómo hacer que estos algoritmos sean MÁS RÁPIDOS y EFICIENTES?

# La Analogía del Montañista



#### Montañista perdido en la niebla:

- Solo ve el terreno local
- Quiere llegar al valle más bajo
- Estrategia: seguir la pendiente más empinada

#### En Machine Learning:

- Montaña = función de error
- **Posición** = parámetros
- **Pendiente** = gradiente
- Valle = mejor solución

# Objetivos del Trabajo

# Objetivo Principal

Comparar experimentalmente cuatro técnicas de optimización:

- SGD básico
- SGD con Momentum
- RMSProp
- Adam

### Metodología

- Implementación en Python desde cero
- Experimento con regresión logística en dataset lris
- Análisis de curvas de convergencia

#### Conexión con Análisis Numérico

- Comparación con métodos de segundo orden
- Análisis de convergencia y trade-offs computacionales

### Descenso de Gradiente Clásico

### Fórmula Básica

$$\boldsymbol{\theta}_{t+1} = \boldsymbol{\theta}_t - \eta \nabla_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta}_t)$$

#### Ventajas:

- Convergencia estable
- Garantiza llegar al mínimo (funciones convexas)

#### Desventajas:

- Muy lento con datasets grandes
- Calcula gradiente completo en cada paso

Donde:  $\eta = \text{tasa de aprendizaje}$ ,  $J(\theta) = \text{función de costo}$ 

### SGD: Descenso de Gradiente Estocástico

### Idea Principal

Usar solo una muestra (o pequeño mini-lote) por iteración:

$$\boldsymbol{\theta}_{t+1} = \boldsymbol{\theta}_t - \eta \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \ell(\boldsymbol{\theta}_t; \mathsf{x}_{i(t)}, y_{i(t)})$$

#### Trade-off Fundamental

- + Mucho más rápido computacionalmente
- + Permite manejar datasets enormes
- - Introduce ruido en las actualizaciones
- - Trayectoria más errática

### SGD con Momentum

### Analogía Física

Como una bola rodando que acumula velocidad y mantiene inercia

#### Fórmulas

$$\mathbf{v}_t = \gamma \mathbf{v}_{t-1} + \eta \nabla J(\boldsymbol{\theta}_t) \tag{1}$$

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \mathsf{v}_t \tag{2}$$

#### **Beneficios:**

- Acelera en direcciones consistentes
- Amortigua oscilaciones

#### Riesgo:

- Puede "pasar de largo.el mínimo
- ullet Requiere ajuste cuidadoso de  $\eta$

Típicamente:  $\gamma = 0.9$  (retiene 90 % de la velocidad previa)

# RMSProp

### Problema que Resuelve

Diferentes parámetros pueden necesitar diferentes tasas de aprendizaje

#### **Fórmulas**

$$E[g_j^2]_t = \rho E[g_j^2]_{t-1} + (1-\rho)g_{j,t}^2$$
(3)

$$E[g_{j}^{2}]_{t} = \rho E[g_{j}^{2}]_{t-1} + (1 - \rho)g_{j,t}^{2}$$

$$\theta_{j,t+1} = \theta_{j,t} - \frac{\eta}{\sqrt{E[g_{j}^{2}]_{t} + \varepsilon}} g_{j,t}$$
(4)

#### Intuición

- Si un parámetro tiene gradientes grandes ⇒ paso más pequeño
- Si un parámetro tiene gradientes pequeños ⇒ paso más grande
- Adaptación automática por coordenada

Típicamente:  $\rho=0.9,\,\varepsilon=10^{-8}$ 

# Adam: Lo Mejor de Dos Mundos

### Combinación Inteligente

Adam = Momentum + RMSProp

# Fórmulas (simplificadas)

$$m_{j,t} = \beta_1 m_{j,t-1} + (1 - \beta_1) g_{j,t}$$
 (momentum) (5)

$$v_{j,t} = \beta_2 v_{j,t-1} + (1 - \beta_2) g_{j,t}^2$$
 (normalización) (6)

$$\theta_{j,t+1} = \theta_{j,t} - \frac{\eta}{\sqrt{\hat{v}_{j,t}} + \varepsilon} \hat{m}_{j,t} \tag{7}$$

### ¿Por qué es Popular?

- Funciona bien .ºut-of-the-box"
- Pocos hiperparámetros que ajustar

Valores por defecto:  $\beta_1 = 0.9$ ,  $\beta_2 = 0.999$ ,  $\eta = 0.001$ 

• Robusto en muchos problemas

Trigueros (Universidad de Costa Rica)

# Diseño Experimental

#### Dataset Iris

- 150 muestras de flores lris
- 4 características: longitud/ancho sépalos y pétalos
- Clasificación binaria: Versicolor vs. Virginia
- División: 80 % entrenamiento, 20 % prueba

### Modelo: Regresión Logística

- Función sigmoide:  $h_{\mathrm{w}}(\mathrm{x}) = \frac{1}{1 + e^{-\mathrm{w}^T\mathrm{x}}}$
- Función de costo: Entropía cruzada binaria
- Gradiente analítico:  $\nabla J = \frac{1}{N} \sum_{i} (h(x_i) y_i) x_i$

# Implementación en Python

#### SGD Básico

```
for epoch in range(epochs):
    for i in range(N):
       y_pred = sigmoid(np.dot(w, X[i]))
       grad = (y_pred - y[i]) * X[i]
    w = w - lr * grad
```

#### SGD con Momentum

```
v = np.zeros(d) # velocidad inicial
for epoch in range(epochs):
    for i in range(N):
        grad = compute_gradient(w, X[i], y[i])
        v = gamma * v + lr * grad
        w = w - v
```

# Configuración de Hiperparámetros

Después de experimentación, se eligieron:

Algoritmo	Tasa de Aprendizaje	Parámetros Adicionales
SGD	0.05	-
SGD + Momentum	0.03	$\gamma = 0{,}9$
RMSProp	0.05	$ ho=$ 0,9, $arepsilon=10^{-8}$
Adam	0.05	$eta_1 = 0.9$ , $eta_2 = 0.999$

### Nota Importante

Momentum requirió menor tasa de aprendizaje para evitar inestabilidad

# Método de Newton-Raphson vs. Descenso de Gradiente

### Newton-Raphson (Segundo Orden)

$$oldsymbol{ heta}_{t+1} = oldsymbol{ heta}_t - \mathsf{H}^{-1}(oldsymbol{ heta}_t) 
abla J(oldsymbol{ heta}_t)$$

donde H es la matriz Hessiana (segundas derivadas)

# Descenso de Gradiente (Primer Orden)

$$\boldsymbol{\theta}_{t+1} = \boldsymbol{\theta}_t - \eta \nabla J(\boldsymbol{\theta}_t)$$

#### Newton-Raphson:

- Convergencia cuadrática
- Pocas iteraciones
- $O(n^3)$  por iteración
- Hessiana puede no ser positiva definida

#### Descenso de Gradiente:

- Convergencia lineal
- Más iteraciones
- $\circ$  O(n) por iteración
- Siempre estable

# ¿Por qué no usar siempre Newton-Raphson?

### El Problema de Escalabilidad

Para un modelo con n parámetros:

- **Gradiente**: vector de tamaño  $n \rightarrow O(n)$  memoria
- **Hessiana**: matriz de tamaño  $n \times n \rightarrow O(n^2)$  memoria
- Inversión:  $O(n^3)$  operaciones

### Ejemplo Real: GPT-3

- Parámetros: 175 mil millones ( $n = 1.75 \times 10^{11}$ )
- **Hessiana**:  $(1.75 \times 10^{11})^2 = 3 \times 10^{22}$  elementos
- Memoria:  $\sim 10^{14}$  TB (jimposible!)

**Conclusión**: Necesitamos métodos de primer orden escalables → Descenso de Gradiente

24 de junio de 2025

### Métodos Quasi-Newton: El Punto Intermedio

### Idea Principal

Aproximar la inversa de la Hessiana sin calcularla explícitamente

#### Métodos Quasi-Newton:

- BFGS, L-BFGS
- Aproximan H<sup>-1</sup> iterativamente
- Convergencia superlineal
- $O(n^2)$  memoria

### Métodos Adaptativos:

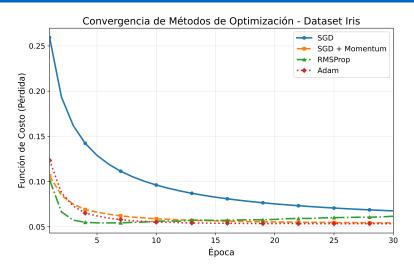
- Adam, RMSProp
- Aproximan información de segundo orden
- Escalables a problemas masivos
- $\circ$  O(n) memoria

### Conexión Clave

Adam puede verse como una aproximación diagonal de métodos Quasi-Newton:

$$\mathsf{Adam} \approx \boldsymbol{\theta}_{t+1} = \boldsymbol{\theta}_t - \mathsf{diag}(\mathsf{H}^{-1}) \nabla J(\boldsymbol{\theta}_t)$$

# Curvas de Convergencia



- Adam: Convergencia más rápida ( 5 épocas)
- RMSProp: Buena velocidad, algo oscilante
- Momentum: Descenso inicial rápido pero inestable

### Análisis Detallado de Resultados

### Adam - El Ganador

- ullet Pérdida final:  $\sim 0,\!12$  en solo 10 épocas
- Curva suave y estable
- Mínima necesidad de ajuste manual

#### Momentum - Doble Filo

- ullet Descenso inicial más drástico (época 2: pérdida  $\sim 0,1)$
- Pero oscilaciones significativas después
- Evidencia del problema de "sobrepaso"

### RMSProp vs SGD

- ullet RMSProp: Convergencia acelerada ( $\sim 0.15$  final)
- SGD: Lento pero confiable ( $\sim$  0,30 a época 30)

### Métricas de Rendimiento Final

Algoritmo	Costo Final	Precisión Train	Precisión Test
SGD	0.067	96.25 %	95.00 %
SGD + Momentum	0.054	96.25%	95.00%
RMSProp	0.062	96.25%	90.00%
Adam	0.053	97.50 %	95.00%

### Observaciones Importantes

- Precisión final similar en todos los métodos
- Diferencias principales en velocidad de convergencia
- Adam ligeramente superior en precisión de entrenamiento

# Ventajas y Desventajas por Método

### SGD Pros:

- Simple de implementar
- Estable y confiable
- Buena generalización

#### Cons:

- Convergencia lenta
- Sensible a tasa de aprendizaje

### RMSProp

#### Pros:

- Adaptación automática
- Maneja bien gradientes dispersos

#### Cons:

- Algo más complejo
- ullet Requiere ajuste de ho

#### Momentum

#### Pros:

- Acelera convergencia inicial
- Supera valles estrechos

#### Cons:

Puede oscilar mucho

# Adam

#### Pros:

- Mejor de ambos mundos
- Funciona .out-of-the-box"
- Robusto y rápido

#### Cons:

Posible overfitting

# Perspectiva del Análisis Numérico

### Compromiso Fundamental

Velocidad de convergencia vs. Escalabilidad computacional

Método	Convergencia	Costo/Iter	Memoria
Newton-Raphson	Cuadrática	$O(n^3)$	$O(n^2)$
Quasi-Newton	Superlineal	$O(n^2)$	$O(n^2)$
Adam	Lineal	O(n)	O(n)
SGD	Lineal	O(n)	O(n)

### Insight Clave

Los métodos adaptativos modernos (Adam, RMSProp) aproximan información de segundo orden con costo de primer orden

# Conclusiones Principales

- Adam es el claro ganador para convergencia rápida y facilidad de uso
- Momentum acelera pero requiere cuidado en la calibración
- RMSProp ofrece buen compromiso entre velocidad y estabilidad
- SGD básico sigue siendo válido para casos que priorizan generalización

#### Desde el Análisis Numérico

Los métodos estudiados representan diferentes estrategias para incorporar información de curvatura (segundo orden) manteniendo la escalabilidad computacional

### Recomendación Práctica

- Para empezar: Adam con parámetros por defecto
- Para ajuste fino: Considerar híbrido (Adam inicial + SGD final)
- Para datos grandes: RMSProp o Adam
- Para mejor generalización: SGD con momentum

# El Futuro de la Optimización

#### Tendencias Actuales

- Métodos híbridos: Combinando lo mejor de diferentes enfoques
- Optimización automática: Learning rate schedules adaptativos
- Aproximaciones de segundo orden: Métodos quasi-Newton escalables
- Optimización distribuida: Para modelos masivos como GPT

### Aplicaciones Emergentes

- Federated Learning: Optimización distribuida sin centralizar datos
- Neural Architecture Search: Optimización de arquitecturas
- Meta-learning: Aprender a optimizar

Mensaje final: La optimización es el corazón de la IA moderna

# Mensajes Clave

# No existe un optimizador universal

- La elección depende del problema específico
- Adam es un excelente punto de partida
- Siempre monitorear tanto entrenamiento como validación
- La implementación correcta es tan importante como la elección del algoritmo

El entendimiento teórico guía las decisiones prácticas

# ¿Preguntas?

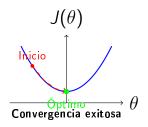
Gracias por su atención

Brandon Trigueros brandon.trigueros@ucr.ac.cr

Código disponible en: github.com/usuario/gradient-descent-research

# ¡Gracias por su atención!

# ¿Preguntas?



"En optimización, como en la vida, el camino más corto no siempre es el más eficiente"

# Respaldo: Fórmulas Detalladas de Adam

### Algoritmo Completo

$$m_t = \beta_1 m_{t-1} + (1 - \beta_1) g_t \tag{8}$$

$$v_t = \beta_2 v_{t-1} + (1 - \beta_2) g_t^2 \tag{9}$$

$$\hat{m}_t = \frac{m_t}{1 - \beta_1^t} \quad \text{(corrección de sesgo)} \tag{10}$$

$$\hat{\mathbf{v}}_t = \frac{\mathbf{v}_t}{1 - \beta_2^t} \quad \text{(corrección de sesgo)} \tag{11}$$

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \frac{\eta}{\sqrt{\hat{v}_t} + \varepsilon} \hat{m}_t \tag{12}$$

- $m_t$ : estimación del primer momento (media)
- $v_t$ : estimación del segundo momento (varianza no centrada)
- Las correcciones de sesgo son importantes en las primeras iteraciones

# Respaldo: Datos del Experimento

Época	SGD	Momentum	RMSProp	Adam
1	0.259	0.106	0.102	0.124
2	0.193	0.085	0.067	0.088
5	0.129	0.066	0.054	0.062
10	0.099	0.058	0.055	0.054
20	0.078	0.053	0.060	0.053
30	0.068	0.054	0.062	0.053

Cuadro: Evolución del costo de entrenamiento

- Adam converge más rápido en las primeras épocas
- Momentum muestra la mayor reducción inicial pero luego oscila
- SGD mejora de manera más gradual y consistente