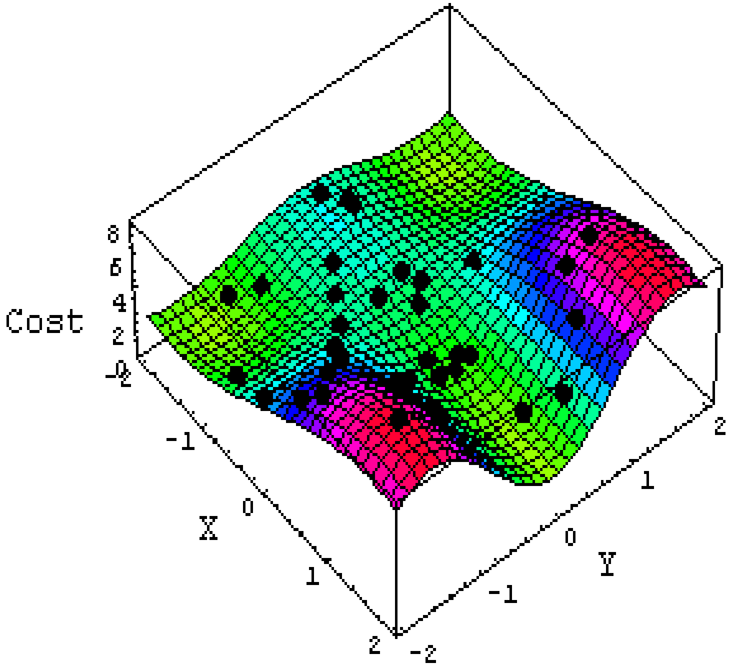
Métodos de optimización basados en gradientes

Problema General de Optimización



min $f(x)$; x vector de $\mathbf{R}^n$

Sujeto a: $Ax \leq B$

$Cx = D$

Ax y Cx son funciones lineales

$LB \leq x \leq UB$

LB y UB son los límites superior e inferior del vector x

$G(x) \leq 0$

$H(x) = 0$

$G(x)$ y $H(x)$ son funciones vectoriales

Recuerde que en entrenamiento supervisado el problema general es (ej. usando MSE)

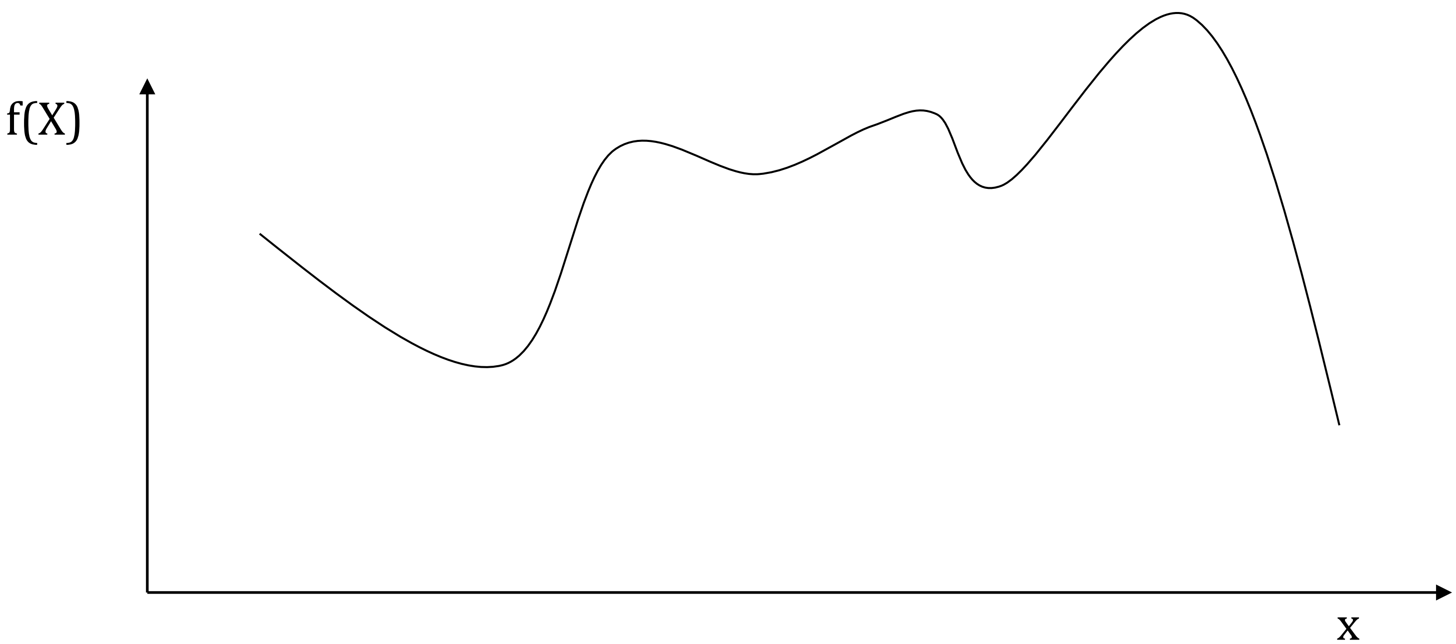
Minimizar $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(f(X_i) - Y_i)^2$

Donde f(x)= $\left\{ \begin{array}{l} \text{a+bX} \\ 1/(1+e^{-(a+bX)}) \\ \text{red neuronal} \\ \text{etc.} \end{array} \right.$

Optimización no restringida

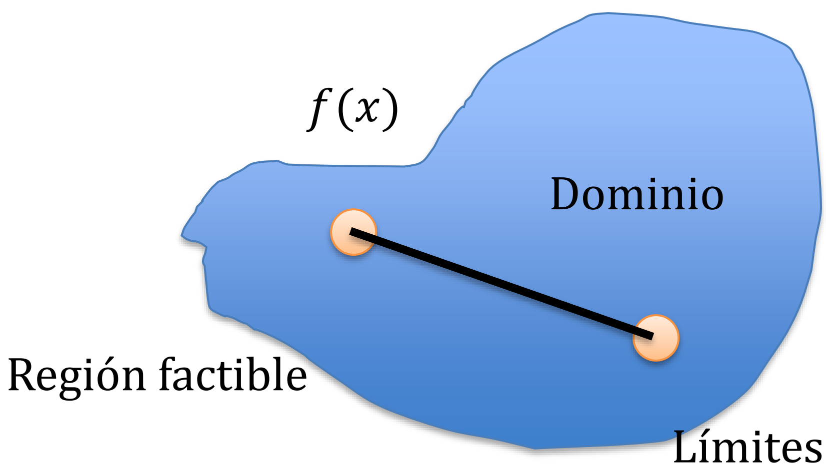
Corresponde al problema de:

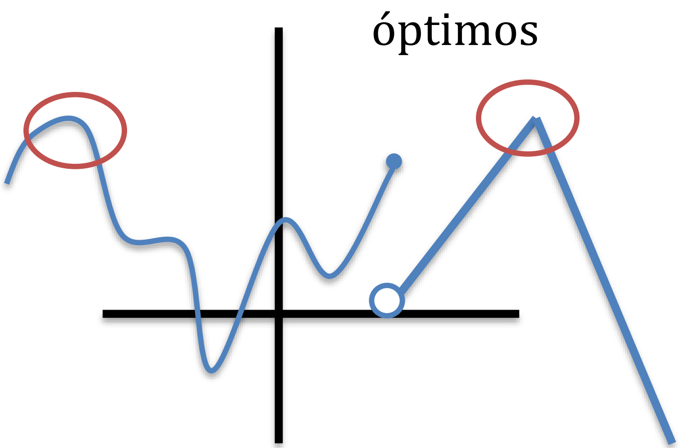
$$\text{Minimizar} \quad f(x)$$



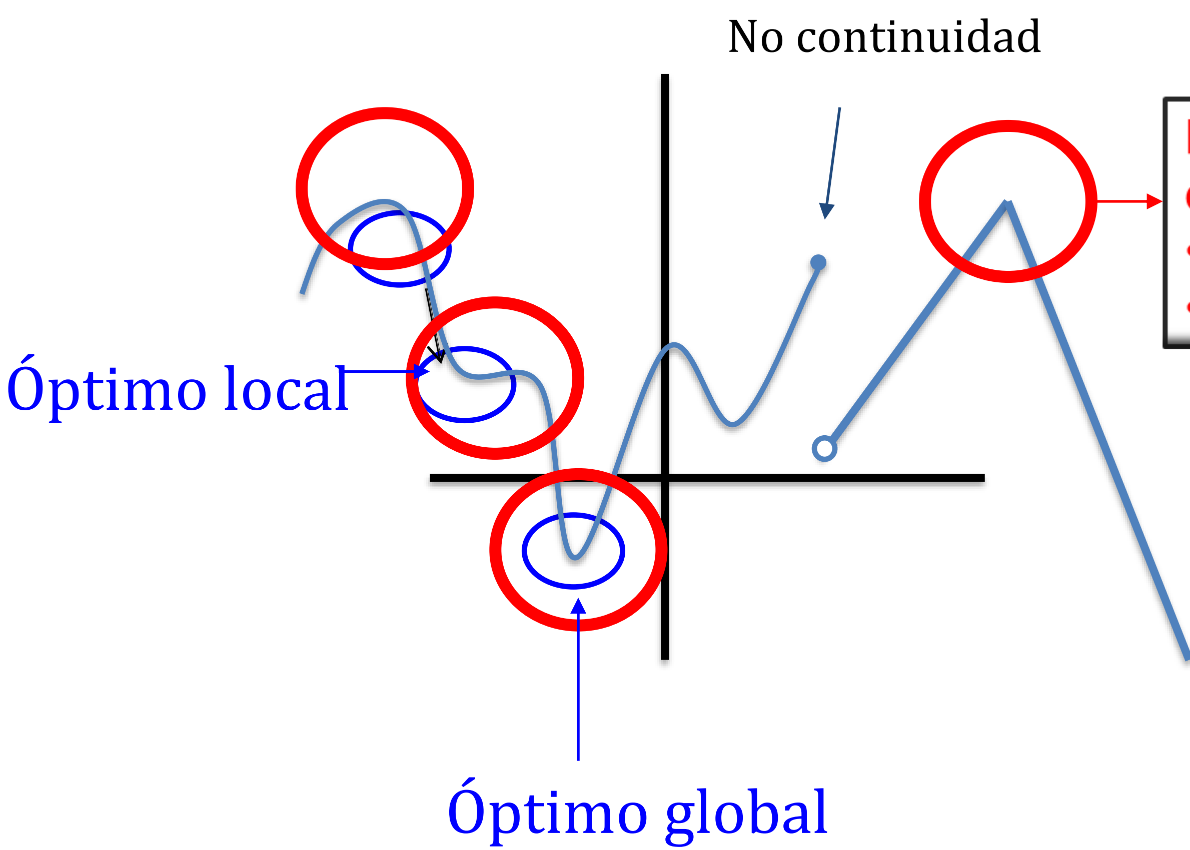
Por ahora, vamos a olvidarnos de las restricciones y vamos a concentrarnos solamente en la función objetivo.

Conceptos básicos sobre funciones





Conceptos básicos sobre funciones

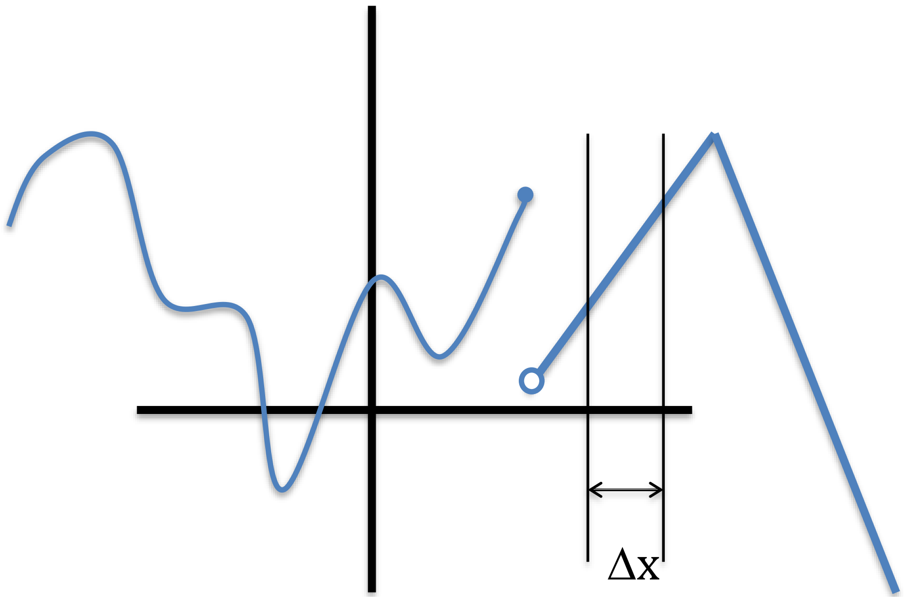


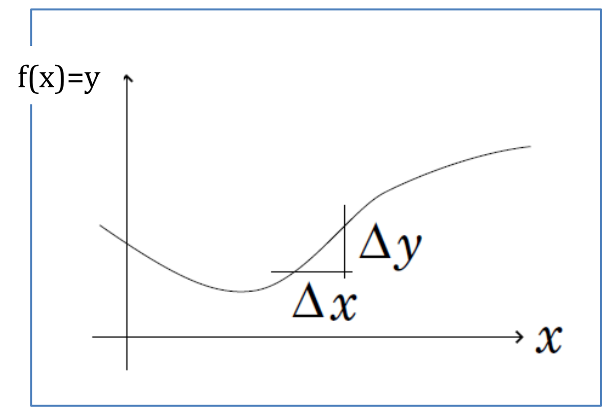
Puntos críticos: Puntos donde la primera derivada:

- No está definida
- $f'(x) = 0$

Derivada:

$$\frac{df(x)}{dx} = f'(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}$$





Recuerde: Algunas reglas de derivación

1. $\frac{d}{dx}c = 0$

2. $\frac{d}{dx}x = 1$

3. $\frac{d}{dx}cv = c\frac{dv}{dx}$

4. $\frac{d(u+v+w)}{dx} = \frac{du}{dx} + \frac{dv}{dx} + \frac{dw}{dx}$

5. $\frac{d(x^n)}{dx} = nx^{n-1}$

6. $\frac{d}{dx}v^n = nv^{n-1}\frac{dv}{dx}$

7. $\frac{d}{dx}(uv) = u\frac{dv}{dx} + v\frac{du}{dx}$

8. $\frac{d}{dx}\left(\frac{u}{v}\right) = \frac{v\frac{du}{dx} - u\frac{dv}{dx}}{v^2}$

$$f(x) = ax + bx \quad \rightarrow \qquad \frac{\partial f(x)}{\partial x} = a$$

$$f(x) = \ln(x) \quad \rightarrow \qquad \frac{\partial f(x)}{\partial x} = \frac{1}{x}$$

$$f(x) = e^{ax} \quad \rightarrow \qquad \frac{\partial f(x)}{\partial x} = a\ e^{ax}$$

Ejemplo: Derivada de la función sigmoidea

$$f(x) = \frac{1}{1+e^{-x}} = (1+e^{-x})^{-1} \qquad \rightarrow$$

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x} = -(1+e^{-x})^{-2}(-e^{-x}) = -\frac{1}{(1+e^{-x})^2}(-e^{-x})$$

$$= \left(\frac{1}{1+e^{-x}}\right)\left(\frac{1+e^{-x}-1}{1+e^{-x}}\right)$$

$$\boxed{\frac{\partial f(x)}{\partial x} = \mathrm{f(x)(1-f(x))}}$$

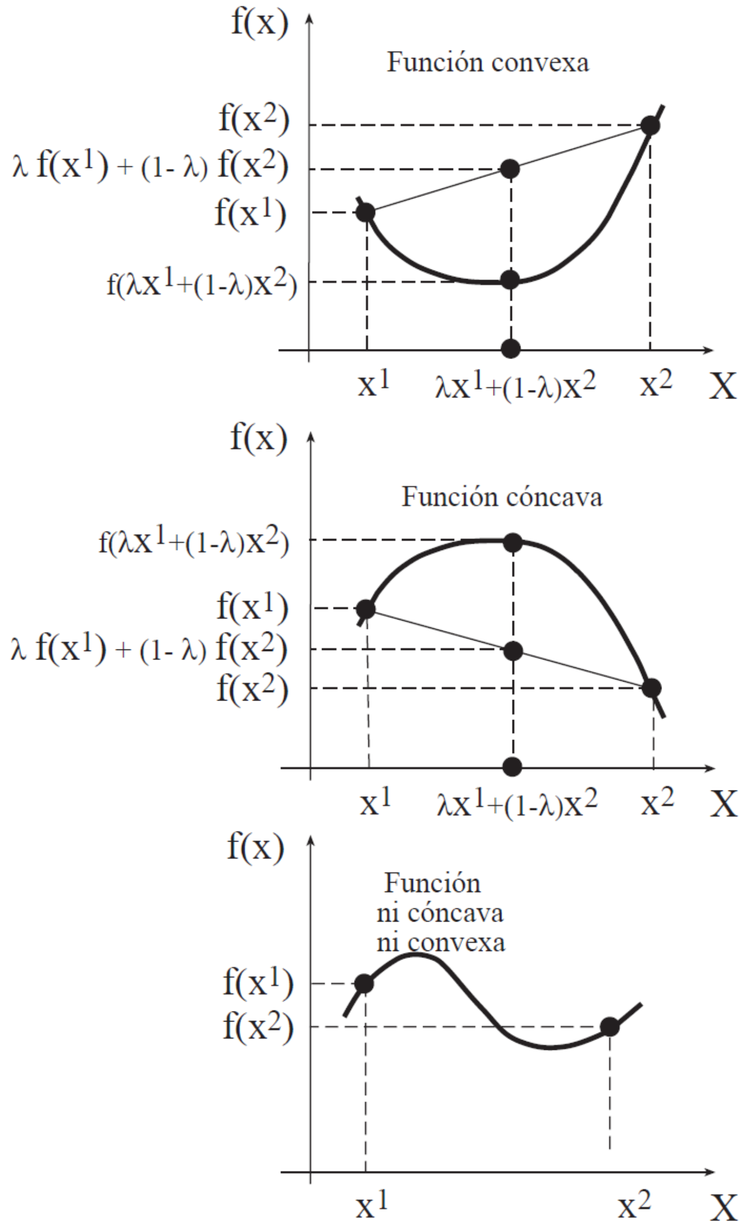
Lo anterior hace que sea fácilmente derivable.

Condiciones necesarias para la optimalidad de problemas no restringidos

Función continuamente diferenciable *en* **x** *si todas sus derivadas parciales son continuas en* **x***.*

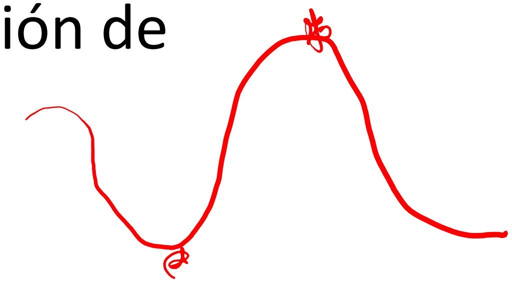
La condición necesaria para que una solución sea un mínimo local es que el gradiente sea cero

Convexidad: permite garantizar que todo óptimo local del PNL también lo es global.


f(x)
Función convexa
f(x2)
λ f(x1) + (1- λ) f(x2)
f(x1)
f(λx1+(1-λ)x2)
x1
λx1+(1-λ)x2
x2
X
f(x)
Función cóncava
f(λx1+(1-λ)x2)
f(x1)
λ f(x1) + (1- λ) f(x2)
f(x2)
x1
λx1+(1-λ)x2
x2
X
f(x)
Función
ni cóncava
ni convexa
f(x1)
f(x2)
x1
x2
X

Optimización unidimensional no restringida

La solución óptima x* debe cumplir la condición de estacionaridad:



$$\boxed{\nabla f(x^*) = 0}$$

que es una condición necesaria pero no suficiente.

La otra condición es:

$$\boxed{\nabla f^{2}(x^*) < 0}$$ máximo local en x^*

$$\boxed{\nabla f^{2}(x^*) > 0}$$ Mínimo local en x^*

$$\frac{df(x)}{dx} = f'(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x}$$

si $f'(x^*)=0$, entonces el signo del cambio en la función al pasar de x^* a $(x^*+\Delta x)$ dependerá del signo de $f''(x^*)=0$, por lo tanto:

i) si $f''(x^*)<0 \Rightarrow f(x^*+\Delta x)<f(x^*) \Rightarrow$ máximo local en x^*

ii) si $f''(x^*)>0 \Rightarrow f(x^*+\Delta x)>f(x^*) \Rightarrow$ mínimo local en x^*

En una función multidimensional

- Sea $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_n]^T$ y sea $f(\mathbf{x})$ del vector $\mathbf{x}$.

- $g(\mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x}) = \frac{\partial}{\partial x} f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} f(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \frac{\partial}{\partial x_n} f(\mathbf{x}) \end{bmatrix}$

Condiciones de optimalidad

Sea el problema a Optimizar $f(\mathbf{x})=f(x_1,x_2,\ldots,x_n)$

La solución óptima **x*** habrá de cumplir la condición de estacionaridad:

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

que es una condición necesaria pero no suficiente.

Y que la matriz Hessiana sea definida positiva (para mínimo) o negativa (para máximo)

$$\boxed{H \quad f(x_1, x_2, \ldots, x_n) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{bmatrix}}$$

Ejemplo

Max $f(x_1,x_2)=-(x_1-3)^2-(x_2-2)^2$

El gradiente de $f(x_1,x_2)$:

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

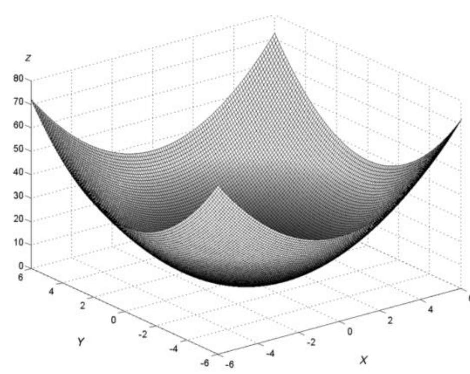
$$\nabla f(x_1,x_2)=\left[-2(x_1-3),-2(x_2-2)\right]=\left[0,0\right]$$

$$\boxed{x_1=3, x_2=2}$$

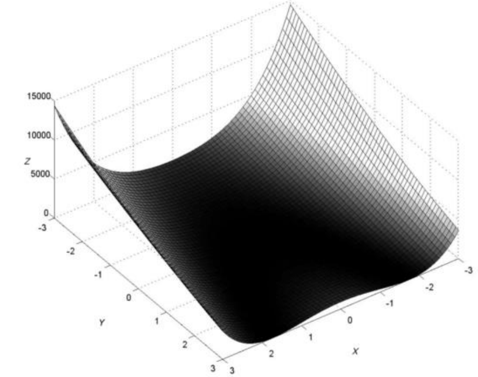
Pero casi nunca es tan fácil…otra opción <u>Ensayo y error</u>

Ejemplos de funciones complejas para derivar

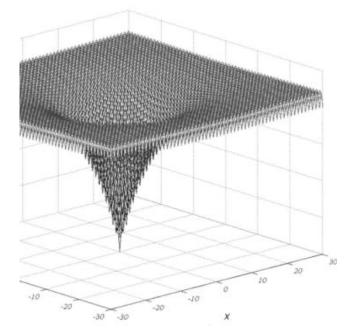
Función de prueba	Dim(D)	Región	mín
$f_1(x) = \sum_{i=1}^{D} x_i^2$	2	$[-5{,}12, 5{,}12]^D$	0
$f_2(x) = \sum_{i=1}^{n} 100(x_i^2 - x_{i+1})^2 + (1 - x_i^2)^2$	2	$[-5{,}12, 5{,}12]^D$	0
$f_3(x) = -20 \cdot exp(-0{,}2\sqrt{\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i^2}) - exp(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^{n} \cos(2\pi x_i)) + 20 + exp(1)$	2	$[-30, 30]^D$	0
$f_4(x) = \sum_{i=1}^{D} (\lfloor x_i + 0{,}5 \rfloor)^2$	2	$[-5{,}12, 5{,}12]^D$	0
$f_5(x) = \sum_{i=1}^{D} i(x_i^4) + random[0,1)$	2	$[-1{,}28, 1{,}28]^D$	0
$\frac{1}{f_6(x)} = \frac{1}{500} \sum_{j=1}^{25} \frac{1}{j + \sum_{i=1}^{2} (x_i - a_{ij})^6}$	2	$[-65{,}536, 65{,}356]^D$	≈ 1



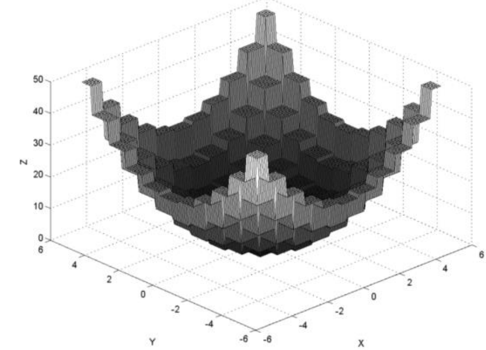
(a) f_1: Función esférica



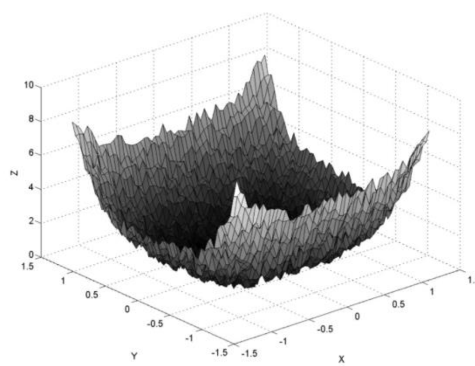
(b) f_2: Función Rosenbrock



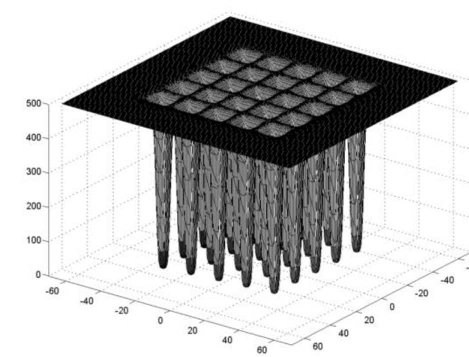
(c) f_3: Función Ackley



(d) f_4: Función Step



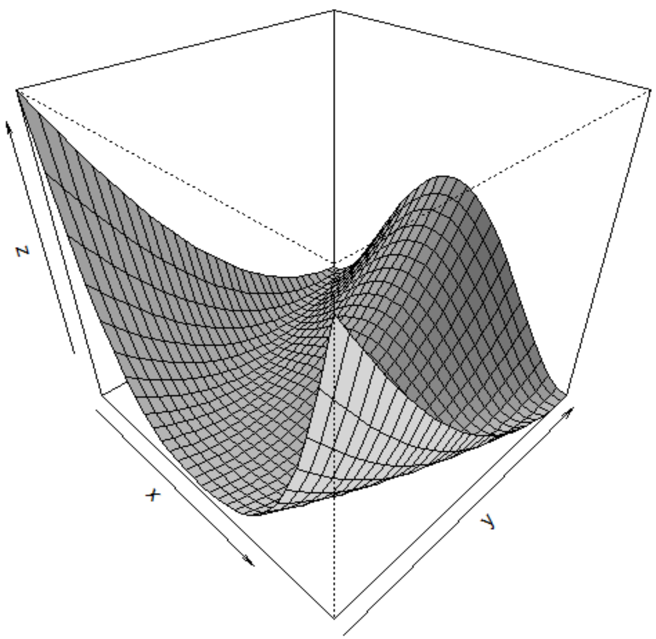
(e) f_5: Función Cuadrática ruidosa

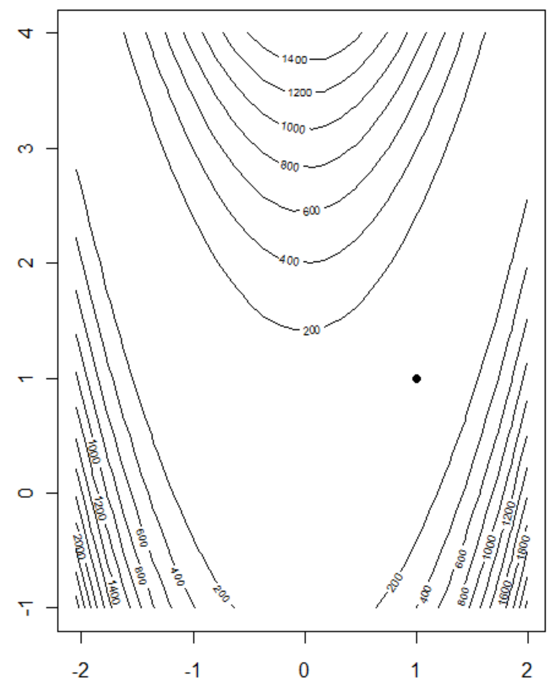


(f) f_6: Función Foxholes

Ejemplo: función Rosenbrock

Minimizar $f(x, y) = 100\ (x^2\ -\ y)^2 +\ (1\ -\ x)^2$





$x \in [-2.048, 2.048]$, $y \in [-1.000, 4.000]$.

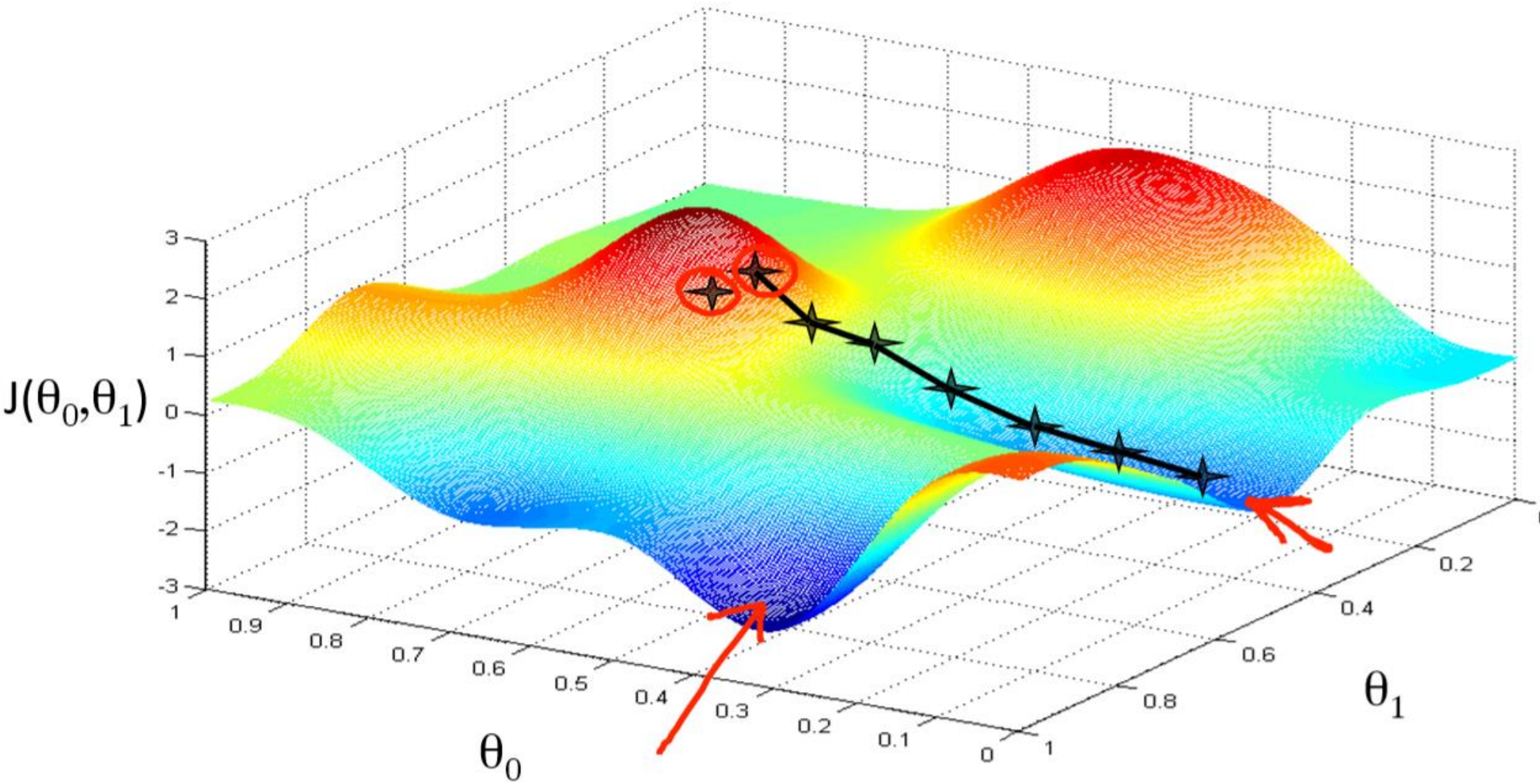
El mínimo esta en x*= (1.0, 1.0): $f(1.0, 1.0) = 0.0$

Métodos basados en gradiente

Se basan en:

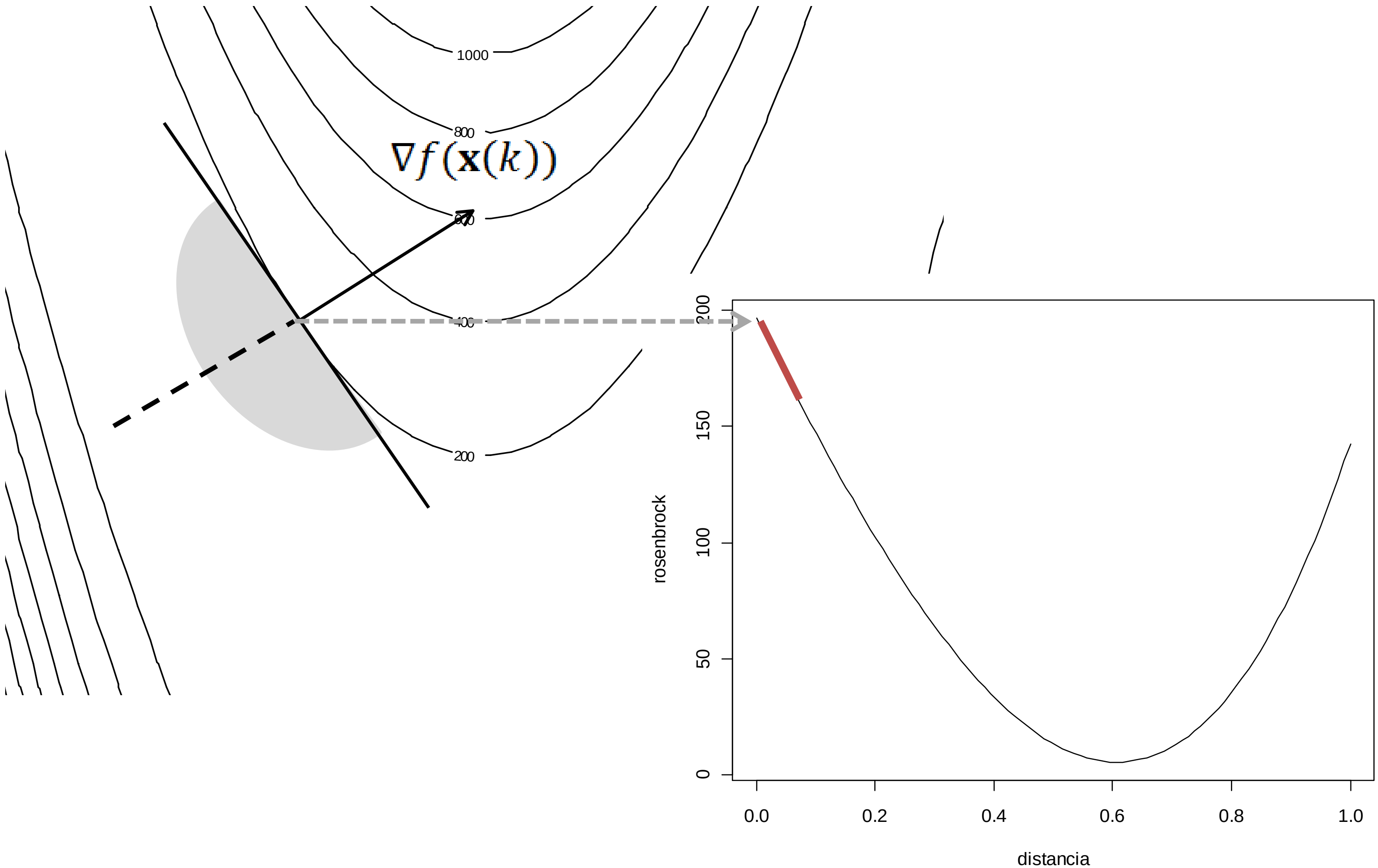
- la pendiente en un punto de una función es su derivada respecto a la posición del punto.

<u>Estrategia</u>: el algoritmo comienza en un punto cualquiera y se mueve de forma iterativa en direcciones que estima conveniente para la minimización de f(x), según el gradiente en ese punto, hasta que se llegue a una solución que cumpla las condiciones de optimalidad.



$J(\theta_0,\theta_1)$
3
2
1
0
-1
-2
-3
1
0.9
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
θ_0
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
θ_1

Interpretación geométrica del gradiente



Algunos método conocidos son:

- Método del gradiente
- Método de Newton-Raphson
- Método de Fletcher-Powell
- etc.

Algunos usan la primera derivada y otros la segunda.

Algoritmo básico:

Si $\mathbf{x}(k)$ es el punto de evaluación en la iteración k:

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

$$= \mathbf{x}(k) + \alpha(k)\, \mathbf{d}^{*}(k)$$

Donde: $\Delta\mathbf{x}(k)$: es un vector que va de $\mathbf{x}(k)$ a $\mathbf{x}(k+1)$

– $\mathbf{d}^{*}(k)$: es un vector unitario en la dirección de $\Delta\mathbf{x}(k)$
– $\alpha(k)$ escalares (tamaño de paso)

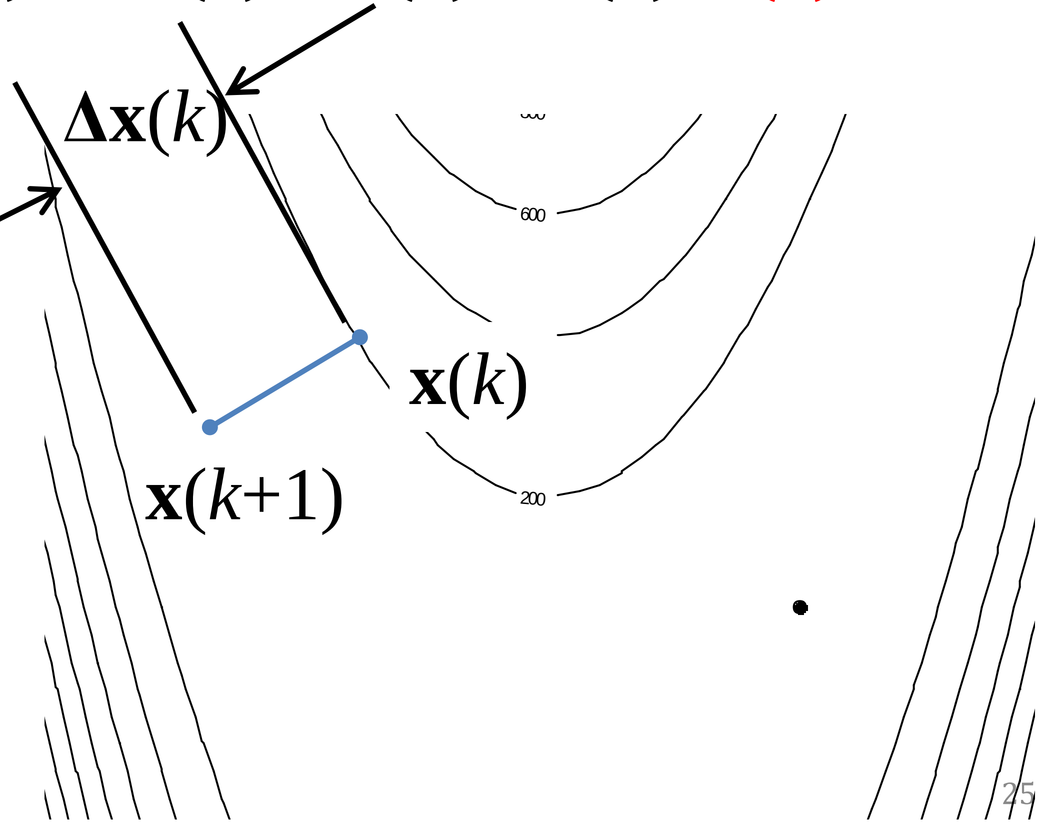
Métodos que utilizan el criterio de la primera derivada

Se base en la aproximación: $f(\mathbf{x}+\boldsymbol{\delta}) = f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x})^{\boldsymbol{T}} \times \boldsymbol{\delta} + H.O.T$

H.O.T son los términos de orden superior

$$\mathbf{x}(k+1) = \mathbf{x}(k) + \Delta\mathbf{x}(k) = \mathbf{x}(k) + \lambda(k)\, \mathbf{s}^*(k)$$

Con $\mathbf{s}^*(k) = -\dfrac{\nabla f(\mathbf{x}(k))}{\|\nabla f(\mathbf{x}(k))\|}$



Pseudocódigo para un $\lambda(k)$ fijo

```
k ← 1; λ; K
loop while k ≤ K
        x(k + 1) = x(k) + λ(k) s*(k)
end loop
```

Con $\mathbf{s}^*(k) = -\frac{\nabla f(\mathbf{x}(k))}{\|\nabla f(\mathbf{x}(k))\|}$

Ejemplo numérico

Minimizar función de Rosenbrock

$$f(x,y) = 100\,(x^2 - y)^2 + (1 - x)^2$$

Gradiente:

$$\nabla f(x,y) = \begin{bmatrix} 400x(x^2 - y) - 2(1 - x) \\ -200(x^2 - y) \end{bmatrix}$$

Punto inicial cualquiera: $\mathbf{x}(1) = \begin{bmatrix} -0.78 \\ 2.00 \end{bmatrix}$

$$\nabla f(-0.78, 2.00) = \begin{bmatrix} 430.62 \\ 278.32 \end{bmatrix}$$

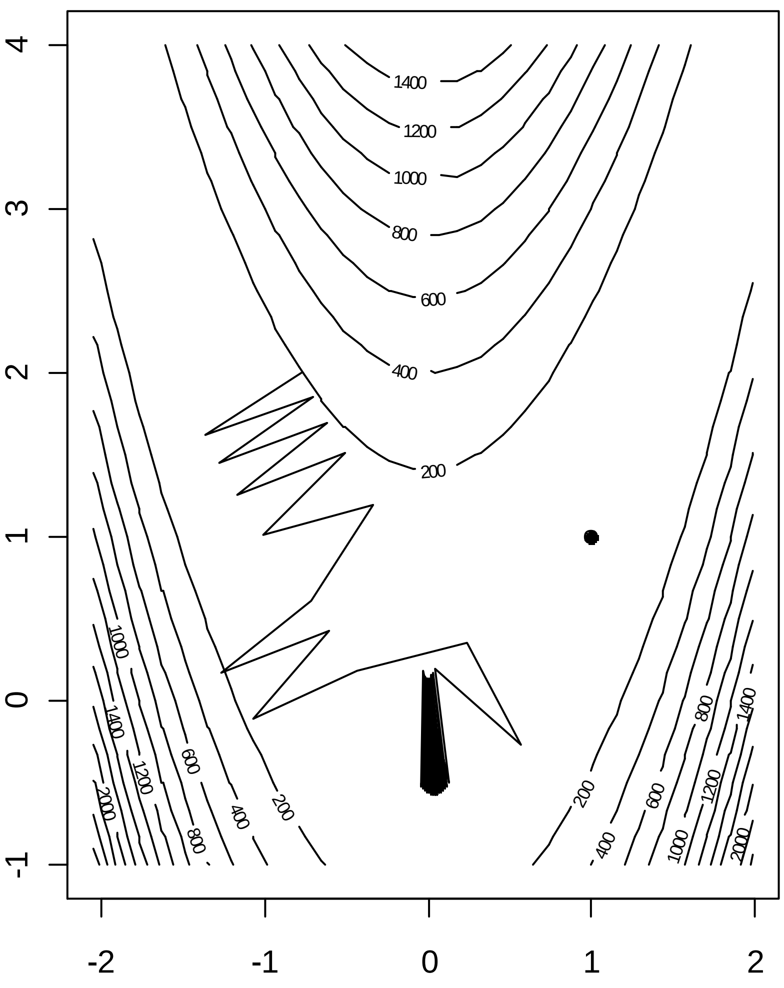
$(430.62^2+278.32^2)^{0.5}$
$=512.73$

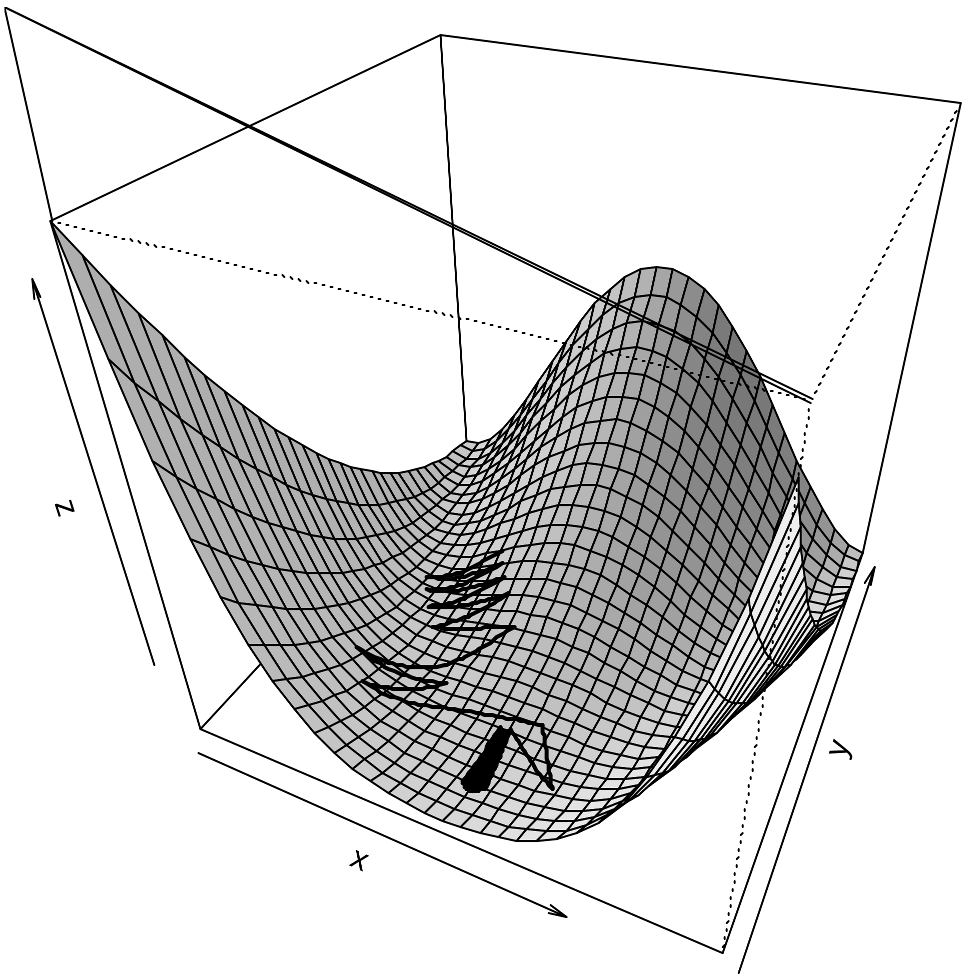
suponga λ=0.7

$$\mathbf{x}(2) = \mathbf{x}(1) - \lambda\mathbf{g}(1) = \begin{bmatrix} -0.78 \\ 2.00 \end{bmatrix} - 0.7 \begin{bmatrix} \frac{430.62}{512.73} \\ \frac{278.32}{512.73} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1.3679 \\ 1.62003 \end{bmatrix}$$

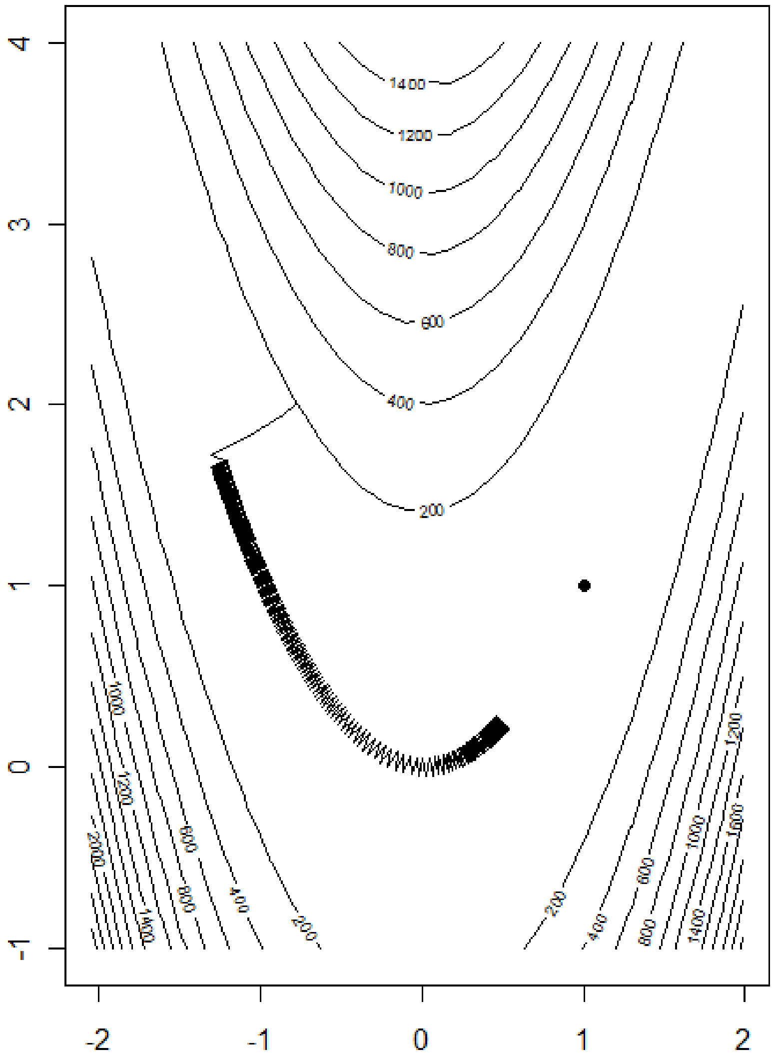
Sigue iterando

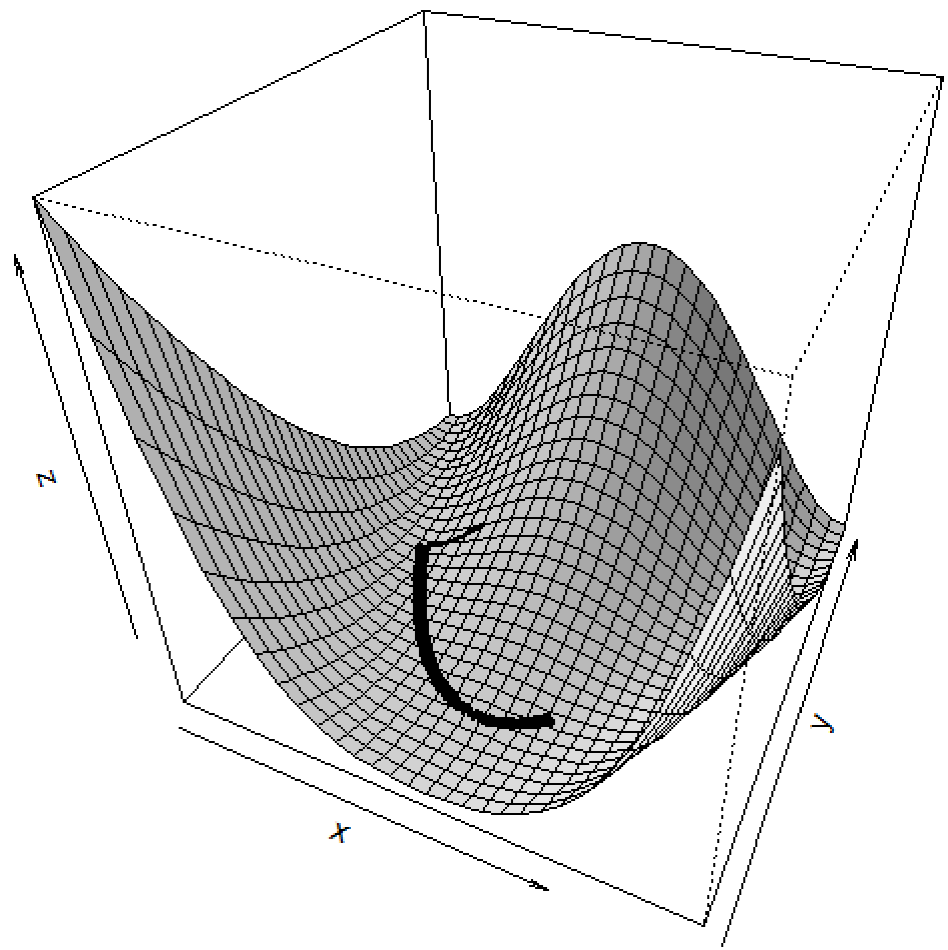
Resultados para $\lambda(k)$=0.7, k=1000





Resultados para $\lambda(k)$=0.1, k=1000





¿Cuándo para?

Cuando se cumpla uno de los criterios:

- C_1: el número máximo de iteraciones.
- C_2 es la tolerancia para la función objetivo. Hay convergencia cuando el cambio en la función objetivo es menor que este valor.
- C_3 es la tolerancia para $\mathbf{x}$. Hay convergencia cuando el cambio en **x** es menor que este valor.
- C_5 es la tolerancia para el gradiente