Trabajo 2

Alejandro García Montoro

7 de abril de 2016

Modelos lineales

Ejercicio 1 - Gradiente descendente

Apartado 1.a

Apartado 1.a.1

La función $E(u,v) = (ue^v - 2ve^{-u})^2$ tiene las siguientes derivadas parciales:

$$\frac{\delta}{\delta u}E(u,v) = 2(ue^v - 2ve^{-u})(e^v + 2ve^{-u})$$
$$\frac{\delta}{\delta v}E(u,v) = 2(ue^v - 2ve^{-u})(ue^v - 2e^{-u})$$

luego su gradiente es

$$\nabla E(u,v) = 2(ue^v - 2ve^{-u})(e^v + 2ve^{-u}, ue^v - 2e^{-u})$$

Apartado 1.a.2

Para implementar el algoritmo del gradiente descendente necesitamos definir la función gradiente siguiente:

```
# Devuelve el valor del gradiente de E en el punto (u,v)
E.gradiente <- function(punto){
  u <- punto[1]
  v <- punto[2]

  coeff <- 2*(u*exp(v) - 2*v*exp(-u))

  return(coeff * c(exp(v) + 2*v*exp(-u), u*exp(v) - 2*exp(-u)))
}
```

```
E <- function(punto){
  u <- punto[1]
  v <- punto[2]

  return((u*exp(v) - 2*v*exp(-u))^2)
}

gradienteDescendente <- function(f, f.gradiente, w_0 = c(1,1), eta = 0.1, tol = 1e-14, maxIter = 100){
  w <- w_0
  iteraciones <- 0
```

```
  while(f(w) >= tol && iteraciones < maxIter){
    direccion <- -f.gradiente(w)
    w <- w + eta*direccion
    iteraciones <- iteraciones + 1
  }

  return(list("Pesos"=w, "Iter"=iteraciones))
}
```

Ejecutamos la función anteriormente implementada:

```
resultado.E <- gradienteDescendente(E, E.gradiente)
```

Comprobamos así que el algoritmo ha ejecutado 10 iteraciones hasta obtener un valor de $E(u, v)$ inferior a 10^{-14}.

Apartado 1.a.3

De la ejecución anterior podemos ver también que los valores de u y v obtenidos tras las 10 iteraciones son los siguientes:

$$u = 0.0447363$$
$$v = 0.0239587$$

Apartado 1.b

Sea ahora la función $f(x, y) = x^2 + 2y^2 + 2\sin(2\pi x)\sin(2\pi y)$, cuyo gradiente es:

$$\nabla f(x, y) = (2x + 4\pi \sin(2\pi y)cos(2\pi x), 4y + 4\pi \sin(2\pi x)cos(2\pi y))$$

Apartado 1.b.1

Definimos las funciones f y ∇f en R:

```
f <- function(punto){
  x <- punto[1]
  y <- punto[2]

  return( x*x + 2*y*y + 2*sin(2*pi*x)*sin(2*pi*y) )
}
```

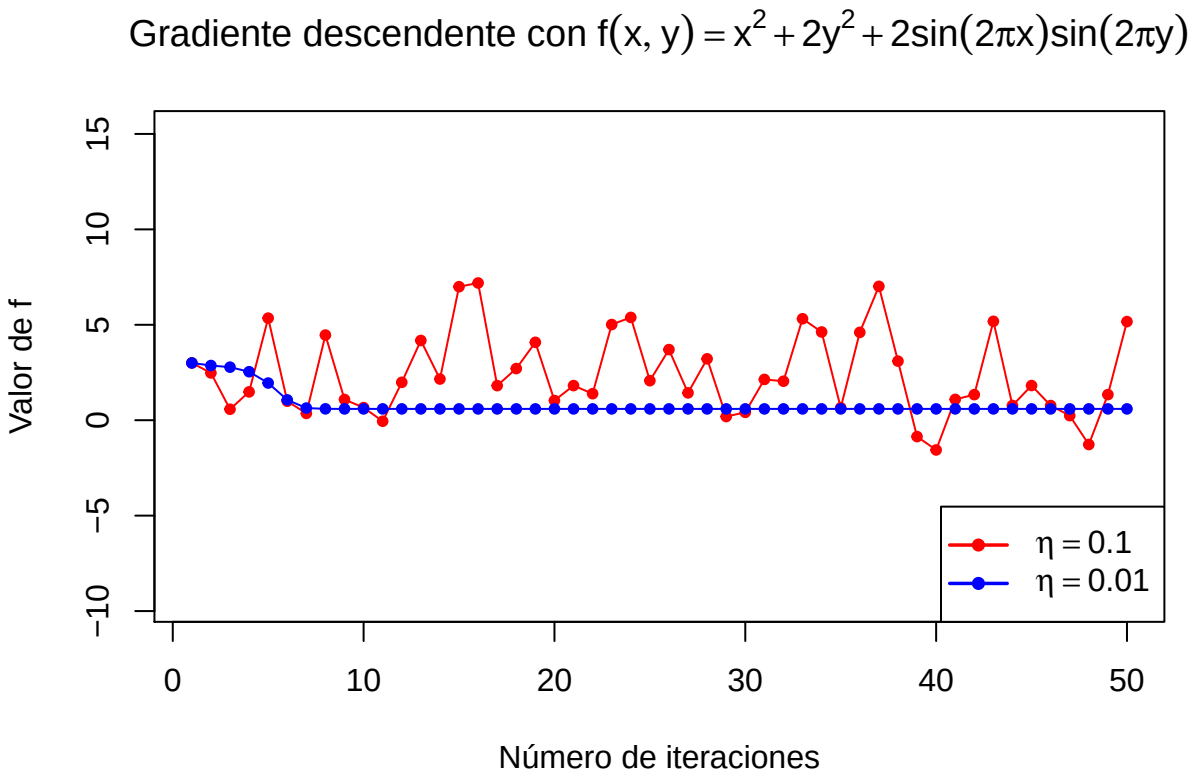
```
# Devuelve el valor del gradiente de f en el punto (x,y)
f.gradiente <- function(punto){
  x <- punto[1]
  y <- punto[2]

  f.grad.x <- 2*x + 4*pi*sin(2*pi*y)*cos(2*pi*x)
  f.grad.y <- 4*y + 4*pi*sin(2*pi*x)*cos(2*pi*y)

  return(c(f.grad.x, f.grad.y))
}
```

Para poder obtener el gráfico solicitado tenemos que modificar la función del gradiente descendente, de manera que devuelva un vector con el valor de la función en las sucesivas iteraciones y el criterio de parada sea ahora únicamente el número de iteraciones:

```
gradienteDescendente.log <- function(f, f.gradiente, w_0 = c(1,1), eta = 0.1, maxIter = 50){
  w <- w_0
  valorIter <- f(w)


  while(length(valorIter) < maxIter){
    direccion <- -f.gradiente(w)
    w <- w + eta*direccion
    valorIter <- c(valorIter, f(w))
  }

  return(list("Pesos"=w, "Iter"=length(valorIter)-1, "Valores"=valorIter))
}
```

Generamos ahora los datos y el gráfico con la función modificada:

```
# Ejecutamos el experimento con ambos parámetros
resultado.f.0.01 <- gradienteDescendente.log(f, f.gradiente, eta = 0.01)
resultado.f.0.1 <- gradienteDescendente.log(f, f.gradiente, eta = 0.1)

# Generamos los dos plots
plot(resultado.f.0.1$Valores, col = 'red', pch = 20, asp=1, type='o',
     main=expression(paste("Gradiente descendente con ",
                           f(x,y) == x^2 + 2*y^2 + 2*plain(sin)(2*pi*x)*plain(sin)(2*pi*y))),
     xlab="Número de iteraciones", ylab="Valor de f")
points(resultado.f.0.01$Valores, col = 'blue', pch = 20, asp=1, type='o')

# Añadimos leyenda de los datos dibujados.
legend("bottomright", c(expression(eta == 0.1), expression(eta == 0.01)),
       bg="white", col=c("red", "blue"), lty=1, pch=20, lwd=1.75)
```



Apartado 1.b.2

Redefinimos la función, de nuevo, para que devuelva también un vector de los puntos por los que pasa. El criterio de parada sigue siendo el número máximo —cincuenta en este caso— de iteraciones:

```
gradienteDescendente.log2 <- function(f, f.gradiente, w_0 = c(1,1), eta = 0.1, maxIter = 50){
  w <- w_0
  variables.x <- w[1]
  variables.y <- w[2]
  valores <- f(w)


  while(length(valores) < maxIter){
    direccion <- -f.gradiente(w)
    w <- w + eta*direccion
    variables.x <- c(variables.x, w[1])
    variables.y <- c(variables.y, w[2])
    valores <- c(valores, f(w))
  }

  return(list("Pesos"=w, "Iter"=length(valores)-1,
              "Res"=data.frame(X = variables.x, Y = variables.y, Value = valores)))
}
```

Generamos ahora los datos desde los datos iniciales indicados y tomamos los mínimos

```r
# Definimos una función que, dado p, devuelve el valor mínimo del gradiente descendente
# con punto inicial = (p,p) y dónde se alcanza este:
minimoGradiente <- function(p){
  valores <- gradienteDescendente.log2(f, f.gradiente, c(p, p))$Res
  unlist(valores[which.min(valores$Value),])
}

# Definimos los puntos iniciales
puntosIniciales <- c(0.1, 1, -0.5, -1)

# Usamos la funcion minimoGradiente sobre cada uno de los puntos anteriores
tablaMinimos <- lapply(puntosIniciales, minimoGradiente)

# Convertimos la lista devuelta en un data frame y ponemos nombres a columnas y filas
tablaMinimos <- data.frame(matrix(unlist(tablaMinimos), nrow=4, byrow=T))
colnames(tablaMinimos) <- c("X", "Y", "Valor")
rownames(tablaMinimos) <- c("(0.1, 0.1)", "(1, 1)", "(-0.5, 0.5)", "(-1, -1)")

# Generamos la tabla solicitada
kable(tablaMinimos, digits=5)
```

	X	Y	Valor
(0.1, 0.1)	0.20646	-0.17155	-1.59489
(1, 1)	0.26879	-0.31392	-1.55870
(-0.5, 0.5)	0.28629	-0.33151	-1.39647
(-1, -1)	-0.26879	0.31392	-1.55870

Ejercicio 2 - Coordenada descendente

Apartado 2.1

Redefinimos, de nuevo, la función `gradienteDescendente` del primer apartado para realizar la técnica de *coordenada descendente*:

```r
coordenadaDescendente <- function(f, f.grad, w_0 = c(1,1), eta = 0.1, tol = 1e-14, maxIter = 50){
  w <- w_0
  iteraciones <- 0

  while(f(w) >= tol && iteraciones < maxIter){
    direccion.x <- c(-f.grad(w)[1], 0)
    w <- w + eta*direccion.x

    direccion.y <- c(0, -f.grad(w)[2])
    w <- w + eta*direccion.y

    iteraciones <- iteraciones + 1
  }

  return(list("Pesos"=w, "Iter"=iteraciones))
}
```

```
res.coordDesc <- coordenadaDescendente(E, E.gradiente, maxIter = 15)
```

De la ejecución anterior podemos ver que los valores de u y v obtenidos tras las 15 iteraciones son los siguientes:

$$u = 6.2970759$$
$$v = -2.852307$$

El valor alcanzado es además $f(6.2970759, -2.852307) = 0.1398138$.

Apartado 2.b

Como primera aproximación a la comparación, vamos a ejecutar ambos métodos sobre las funciones f y E con un máximo de 20 iteraciones cada uno, con el parámetro `tol` puesto a un valor virtualmente $-\infty$ para asegurarnos de que las iteraciones se realizan:

```
# Tomamos los resultados para f
comp.f.grad <- gradienteDescendente(f, f.gradiente, maxIter = 20, tol=-999999)
comp.f.coor <- coordenadaDescendente(f, f.gradiente, maxIter = 20, tol=-999999)

# Tomamos los resultados para E
comp.E.grad <- gradienteDescendente(E, E.gradiente, maxIter = 20, tol=-999999)
comp.E.coor <- coordenadaDescendente(E, E.gradiente, maxIter = 20, tol=-999999)

# Obtenemos el valor de f en el mínimo devuelto por ambos algoritmos
min.f.grad <- f(comp.f.grad$Pesos)
min.f.coor <- f(comp.f.coor$Pesos)

# Obtenemos el valor de E en el mínimo devuelto por ambos algoritmos
min.E.grad <- E(comp.E.grad$Pesos)
min.E.coor <- E(comp.E.coor$Pesos)
```

Podemos hacer una tabla rápida para comparar estos mínimos:

```
# Generamos un data frame con los datos obtenidos
tablaComp <- data.frame(c(min.f.coor, min.E.coor),
                        c(min.f.grad, min.E.grad))

colnames(tablaComp) <- c("Valor de f", "Valor de E")
rownames(tablaComp) <- c("Coordenada descendente", "Gradiente descendente")

# Generamos la tabla a partir del data frame
kable(tablaComp, digits=15)
```

	Valor de f	Valor de E
Coordenada descendente	2.5500174	1.814305
Gradiente descendente	0.1103108	0.000000

Ante estos datos parece que es claro que el método del gradiente descendente es mejor que el de coordenada

descendente. Sin embargo, esta comparación no ha sido justa, ya que el método de coordenada está haciendo en realidad el doble de iteraciones que el de gradiente.

Así, para ser justos en la comparación, tenemos que ejecutar el método inicial de gradiente el doble de veces que el de la coordenada. Vamos a comparar entonces con 20 y 10 iteraciones, respectivamente, ambos métodos con las mismas funciones anteriores

```
# Tomamos los resultados para f
comp.f.grad <- gradienteDescendente(f, f.gradiente, maxIter = 20, tol=-999999)
comp.f.coor <- coordenadaDescendente(f, f.gradiente, maxIter = 10, tol=-999999)

# Tomamos los resultados para E
comp.E.grad <- gradienteDescendente(E, E.gradiente, maxIter = 20, tol=-999999)
comp.E.coor <- coordenadaDescendente(E, E.gradiente, maxIter = 10, tol=-999999)

# Obtenemos el valor de f en el mínimo devuelto por ambos algoritmos
min.f.grad <- f(comp.f.grad$Pesos)
min.f.coor <- f(comp.f.coor$Pesos)

# Obtenemos el valor de E en el mínimo devuelto por ambos algoritmos
min.E.grad <- E(comp.E.grad$Pesos)
min.E.coor <- E(comp.E.coor$Pesos)
```

Rehacemos la tabla:

```
# Generamos un data frame con los datos obtenidos
tablaComp <- data.frame(c(min.f.coor, min.E.coor),
                        c(min.f.grad, min.E.grad))

colnames(tablaComp) <- c("Valor de f", "Valor de E")
rownames(tablaComp) <- c("Coordenada descendente", "Gradiente descendente")

# Generamos la tabla a partir del data frame
kable(tablaComp, digits=15)
```

	Valor de f	Valor de E
Coordenada descendente	7.8390825	1.814305
Gradiente descendente	0.1926057	0.000000

Como vemos, en el caso de E no ha habido cambio, pero en el caso de f sí: el gradiente, en este caso, mucho más justo que el anterior, da unos valores muchísimo mejores, como era de esperar.

Ejercicio 3 - Método de Newton

El método de Newton es igual que el de gradiente descendente, pero esta vez la dirección de cambio viene dada por $H^{-1}\nabla f(w)$, donde H es la matriz Hessiana de f. Por tanto, basta adaptar la función anterior para que use esta nueva dirección. Además, vamos ahora a facilitar la llamada a la función: haremos uso del paquete `numDeriv`, que se debe instalar antes de ejecutar el siguiente trozo de código; con él, tenemos a disposición las funciones `grad(func, x)`, que devuelve el valor de la función `func` en el punto `x` y `hessian(func, x)` que, del mismo modo, devuelve el valor de la matriz hessiana de `func` en el punto `x`. Así, podemos obviar el

parámetro `f.grad` de las funciones anteriores y pasar sólo la función; el código se encargará de calcular los gradientes y hessianas necesarios.

Como además vamos a comparar el funcionamiento del método de Newton con lo analizado del gradiente descendente en el apartado 1.b, vamos a fijar como único criterio de parada el número de iteraciones, para estudiar qué pasa en cada momento:

```
metodoNewton <- function(f, w_0 = c(1,1), eta = 0.1, maxIter = 50){
  w <- w_0
  variables.x <- w[1]
  variables.y <- w[2]
  valores <- f(w)


  while(length(valores) < maxIter){
    direccion <- -solve(hessian(f, w)) %*% grad(f, w)
    w <- w + eta*direccion
    variables.x <- c(variables.x, w[1])
    variables.y <- c(variables.y, w[2])
    valores <- c(valores, f(w))
  }

  return(list("Pesos"=w, "Iter"=length(valores)-1,
              "Res"=data.frame(X = variables.x, Y = variables.y, Value = valores)))
}
```

Estudiamos ahora de nuevo la mejor solución encontrada por el Método de Newton tras 50 iteraciones con los puntos iniciales $(0.1, 0.1)$, $(1, 1)$, $(-0.5, -0.5)$ y $(-1, -1)$, creando una tabla comparativa en la que vemos el mínimo alcanzado y el punto donde se alcanza:

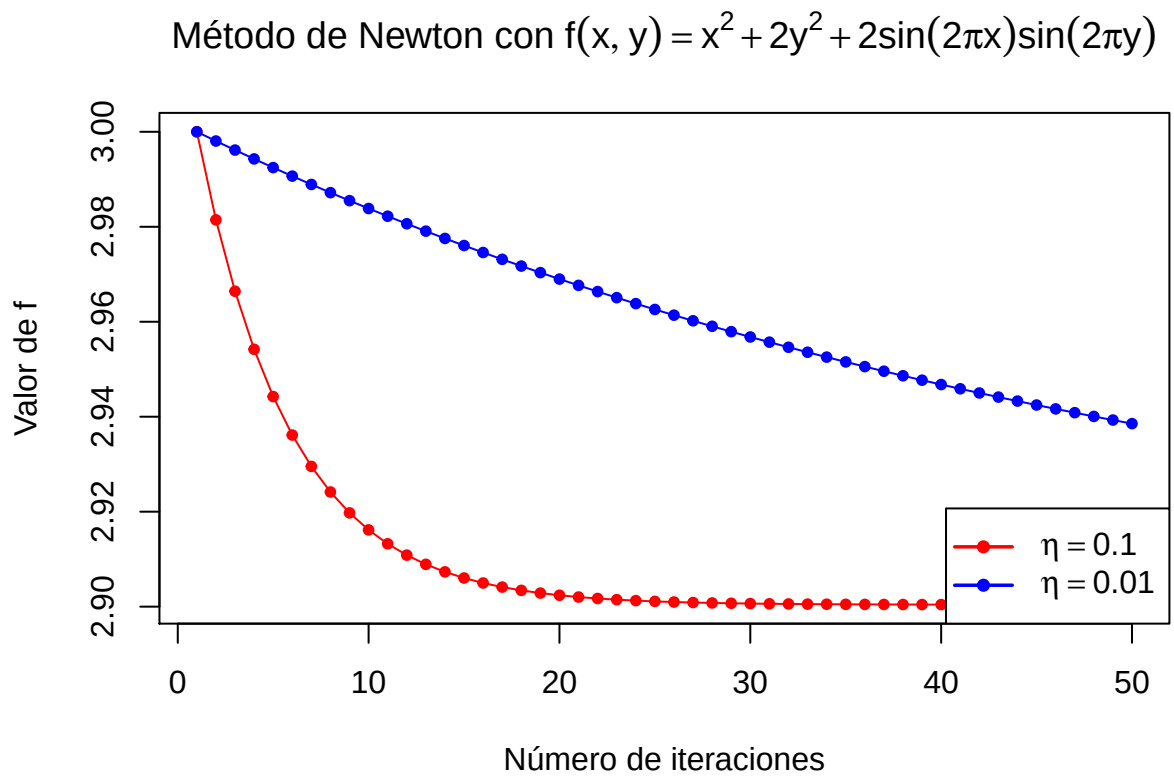
```
# Definimos una función que, dado p, devuelve el valor mínimo del método de Newton
# con punto inicial = (p,p) y dónde se alcanza este:
minimoGradiente <- function(p){
  valores <- metodoNewton(f, c(p, p))$Res
  unlist(valores[which.min(valores$Value),])
}

# Definimos los puntos iniciales
puntosIniciales <- c(0.1, 1, -0.5, -1)

# Usamos la funcion minimoGradiente sobre cada uno de los puntos anteriores
tablaMinimos.N <- lapply(puntosIniciales, minimoGradiente)

# Convertimos la lista devuelta en un data frame y ponemos nombres a columnas y filas
tablaMinimos.N <- data.frame(matrix(unlist(tablaMinimos.N), nrow=4, byrow=T))
colnames(tablaMinimos.N) <- c("X", "Y", "Valor")
rownames(tablaMinimos.N) <- c("(0.1, 0.1)", "(1, 1)", "(-0.5, 0.5)", "(-1, -1)")

# Generamos la tabla solicitada
kable(tablaMinimos.N, digits=5)
```

	X	Y	Valor
(0.1, 0.1)	0.00041	0.00040	0.00001

	X	Y	Valor
(1, 1)	0.94944	0.97473	2.90041
(-0.5, 0.5)	-0.47526	-0.48788	0.72548
(-1, -1)	-0.94944	-0.97473	2.90041

Por último, del mismo modo en el que en el ejercicio 1.b estudiamos el comportamiento ante tasas de aprendizaje distintas, generamos ahora un gráfico parecido para determinar cómo se comporta el método de Newton:

```
# Ejecutamos el experimento con ambos parámetros
newton01 <- unlist(metodoNewton(f, eta = 0.1)$Res["Value"])
newton001 <- unlist(metodoNewton(f, eta = 0.01)$Res["Value"])

# Generamos los dos plots
plot(newton01, col = 'red', pch = 20, type='o',
     main=expression(paste("Método de Newton con ",
                           f(x,y) == x^2 + 2*y^2 + 2*plain(sin)(2*pi*x)*plain(sin)(2*pi*y))),
     xlab="Número de iteraciones", ylab="Valor de f")
points(newton001, col = 'blue', pch = 20, type='o')

# Añadimos leyenda de los datos dibujados.
legend("bottomright", c(expression(eta == 0.1), expression(eta == 0.01)),
       bg="white", col=c("red", "blue"), lty=1, pch=20, lwd=1.75)
```

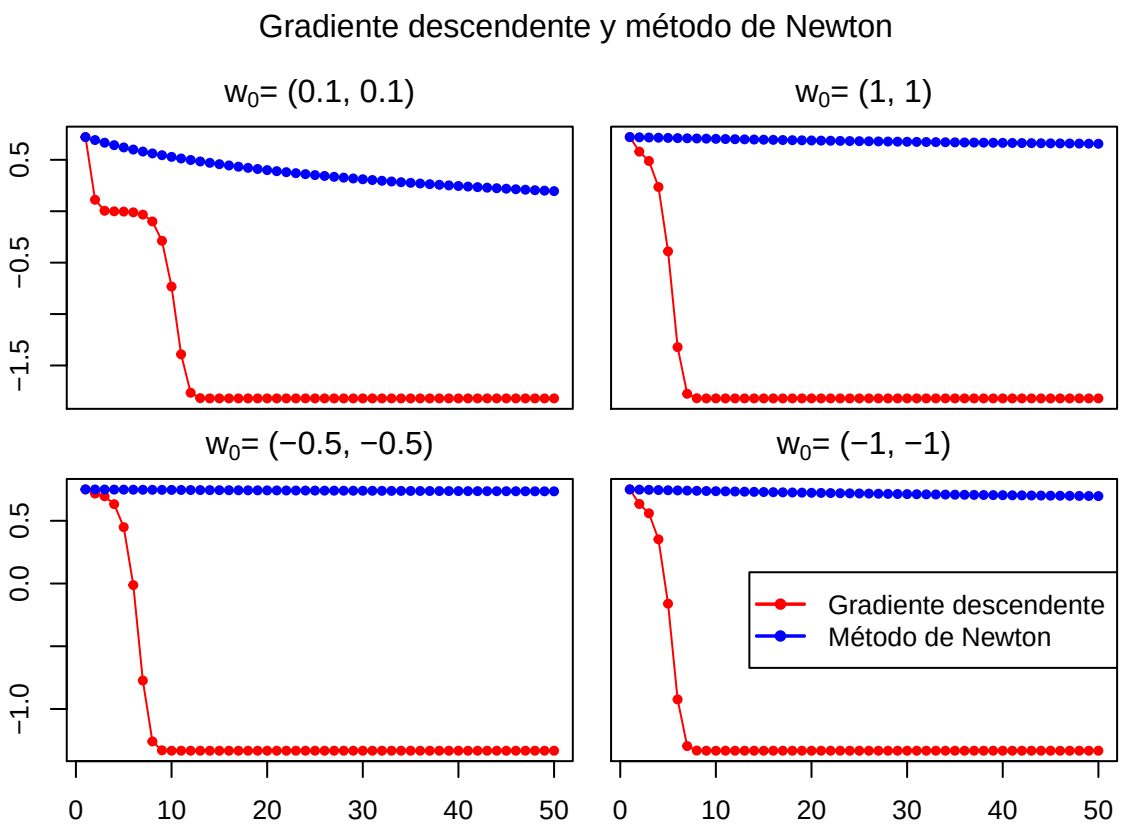


En este caso es claro que la tasa de aprendizaje más alta encuentra más rápido el óptimo local, ya que se mueve más rápido.

Comparemos ahora ambos métodos, mostrando las curvas de descenso con cada punto inicial considerado y

con una tasa de aprendizaje $\eta = 0.1$. Definimos para esto una función que recibe un punto inicial, un método de descenso y una función, de manera que genere el gráfico correspondiente:

```
dibujarComparacion <- function(p, foo = f, tasa = 0.01, ...){
  res.grad <- unlist(gradienteDescendente.log2(f, f.gradiente, w_0 = c(p,p), eta = tasa)$Res["Value"])
  res.newt <- unlist(metodoNewton(f, w_0 = c(p,p), eta = tasa)$Res["Value"])

  plot(res.grad, pch = 20, type='o', col="red", main=bquote(paste(w[0],"= (",.(p),", ",.(p), ")")), ...)
  points(res.newt, pch = 20, type='o', col="blue", ...)
}


# Definimos una rejilla 2x2 para los plots
prev_par <- par(no.readonly = T)

par(mfrow=c(2, 2), mar=c(0.1, 1.1, 2.1, 0.1), oma=2.5*c(1,1,1,1))

 # . <- lapply(puntosIniciales, dibujarComparacion)
dibujarComparacion(0.1, xaxt="n")
dibujarComparacion(1, xaxt="n", yaxt="n")
dibujarComparacion(-0.5)
dibujarComparacion(-1, yaxt="n")

mtext("Gradiente descendente y método de Newton", outer=TRUE, line=0.5)

legend("right", c("Gradiente descendente", "Método de Newton"),
       bg="white", col=c("red", "blue"), lty=1, pch=20, lwd=1.75)
```



```
# Dejamos los parámetros como estaban anteriormente
par(prev_par)
```

Es claro que el gradiente descendente converge y consigue unos resultados muchísimo mejores que los del método de Newton con las mismas iteraciones. El último se queda estancado muy rápido y el primero consigue descender rápidamente para converger a un estado estable muy pronto, normalmente entre las 10 primeras iteraciones.

Ejercicio 4 - Regresión logística

Para este ejercicio vamos a reusar código de la práctica anterior:

```
simula_unif <- function(N, dim, rango){
    lapply(rep(dim, N), runif, min = rango[1], max = rango[2])
}

simula_recta <- function(intervalo){
    # Simulamos dos puntos dentro del cuadrado intervalo x intervalo
    punto1 <- runif(2, min=intervalo[1], max=intervalo[2])
    punto2 <- runif(2, min=intervalo[1], max=intervalo[2])

    # Generamos los parámetros que definen la recta
    a <- (punto2[2] - punto1[2]) / (punto2[1] - punto1[1])
    b <- -a * punto1[1] + punto1[2]

    # Devolvemos un vector concatenando ambos parámetros
    c(a,b)
}

generador_etiquetados <- function(f){
    function(x,y){
        sign(f(x,y))
    }
}
```

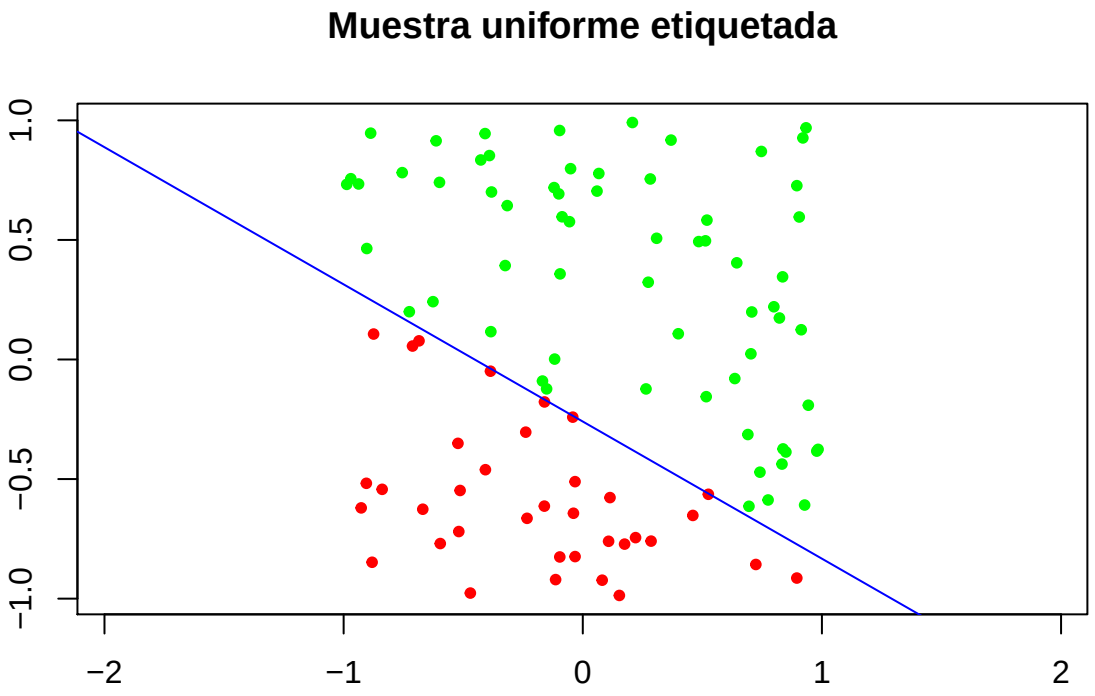
Definimos la función f y el conjunto $\mathcal{D}$:

```
regLog.frontera <- simula_recta(c(-1,1))
datos <- simula_unif(100, 2, c(-1,1))
regLog.datos <- matrix(unlist(datos), ncol = 2, byrow = T)

regLog.f <- function(x,y){
    y - regLog.frontera[1]*x - regLog.frontera[2]
}
```

Echémosle un vistazo a nuestros datos:

```
regLog.etiquetado <- generador_etiquetados(regLog.f)
regLog.etiquetas <- regLog.etiquetado(regLog.datos[,1], regLog.datos[,2])

# Genera vector de colores basado en las etiquetas
```

```r
colores <- ifelse(regLog.etiquetas == 1, "green", "red")

# Generamos la gráfica
plot(regLog.datos, asp = 1, col = colores, pch = 20,
     main="Muestra uniforme etiquetada", xlab="", ylab="")
abline(rev(regLog.frontera), col="blue")
```



Apartado 4.a

Definimos una función que implementa regresión logística con gradiente descendente estocástico:

```r
distance <- function(x,y){
  return(sqrt(sum((x-y)^2)))
}

RL.SGD <- function(datos, etiquetas, w_0 = c(0,0), eta = 0.01, tol= 0.01){
  w.curr <- w_0

  iteraciones <- 0

  while(iteraciones == 0 || distance(w.prev, w.curr) > tol){
    iteraciones <- iteraciones+1

    w.prev <- w.curr

    # Tomamos una permutación de los datos
    indices <- sample(length(etiquetas))

    # Bucle sobre toda la muestra
    for(index in indices){
```

```
      dato <- datos[index,]
      etiq <- etiquetas[index]

      g_t <- -(etiq*dato)/(1+exp(-etiq*w.curr*dato))
      w.curr <- w.curr + eta*g_t
    }

    iteraciones <- iteraciones + 1
  }

return(list("Pesos"=w.curr, "Iter"=iteraciones))
}

regLog.res <- RL.SGD(regLog.datos, regLog.etiquetas)
#abline(rev(regLog.res$Pesos), col="red")
```