Ejercicio 4

Parte a

Dado el problema sin restricciones siguiente:

$$\min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x})$$

Se tiene que la condición necesaria de optimalidad es

$$\nabla f = \mathbf{0}$$

Si además f es convexa, se tiene que es una condición suficiente. Es decir, si se anula el gradiente en un punto $\bar{x}$ ($\nabla f(\bar{\mathbf{x}}) = \mathbf{0}$), entonces este punto es un mínimo global de f.

Veamos que el problema de mínimos cuadrados, $\min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2^2$, es convexo

Tenemos que la función $g(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|_2^2$ es convexa (esta prueba se realiza en el Ejercicio 5). Por otro lado, como se probo en el ejercicio 1 parte c, $f(\mathbf{x}) = g(\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b})$ es convexa si g es convexa. Entonces el problema de mínimos cuadrados sin restricciones es convexo.

Ahora calculemos el gradiente de $f(\mathbf{x})$. Sea $g(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}$, entonces $f(\mathbf{x}) = f(g(\mathbf{x})) = \|g\|_2^2$. Por la regla de la cadena

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \frac{\partial g(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial f(g)}{\partial g}$$

Recurriendo a "The Matrix Cookbook" se tiene que

$$\frac{\partial f(g)}{\partial g} = \frac{\partial \|g\|_2^2}{\partial g} = 2g$$

$$\frac{\partial g(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{A}^T$$

Entonces el gradiente sera

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{A}^T 2g$$

$$\nabla f(\mathbf{x}) = 2\mathbf{A}^T(\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}) \tag{1}$$

Busquemos el punto $\bar{\mathbf{x}}$, para esto igualamos la ecuación anterior a 0 y despejamos el valor $\bar{\mathbf{x}}$.

$$\nabla f(\bar{\mathbf{x}}) = \mathbf{0} \Leftrightarrow \mathbf{A}^T(\mathbf{A}\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{b}) = \mathbf{0} \Leftrightarrow \mathbf{A}^T\mathbf{A}\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{A}^T\mathbf{b} = \mathbf{0} \Leftrightarrow \mathbf{A}^T\mathbf{A}\bar{\mathbf{x}} = \mathbf{A}^T\mathbf{b} \Leftrightarrow$$

$$\bar{\mathbf{x}} = (\mathbf{A}^T\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T\mathbf{b} \tag{2}$$

En el caso del problema dado, el punto optimo es

$$\bar{\mathbf{x}} = (-0.13285, 0.12793)^T$$

Implementación

En el archivo "ej4.py" adjunto en la entrega contiene el código de las 4 implementaciones. Para los 4 tipos de pasos se graficar evolucion del error $\frac{\|\bar{\mathbf{x}}-\mathbf{x_k}\|}{\|\bar{\mathbf{x}}\|}$.

De forma arbitraria se escoge comenzar desde el punto $\mathbf{x_0} = (0, 0)$, ya que esta elección inicial no modifica cualitativamente el resultado (se probó con otros puntos).

En todos los métodos, el criterio de parada elegido es la combinación de:

$$k < MAX\_ITER = 1000$$

$$\frac{\|\mathbf{x_k} - \mathbf{x_{k-1}}\|}{\|\mathbf{x_{k-1}}\|} < \epsilon = 0.0001$$

Se fijo la matriz $\mathbf{D^k}$ de todos estos métodos como la identidad ($\mathbf{D^k} = \mathbf{Id}$), es decir, no se uso ni Newton ni Diagonal Scaling.

En la Figura 1 se presentan las gráficas de evolución del error para cada uno de los tipos de paso, indicándose, en los casos necesarios, los parámetros utilizados.

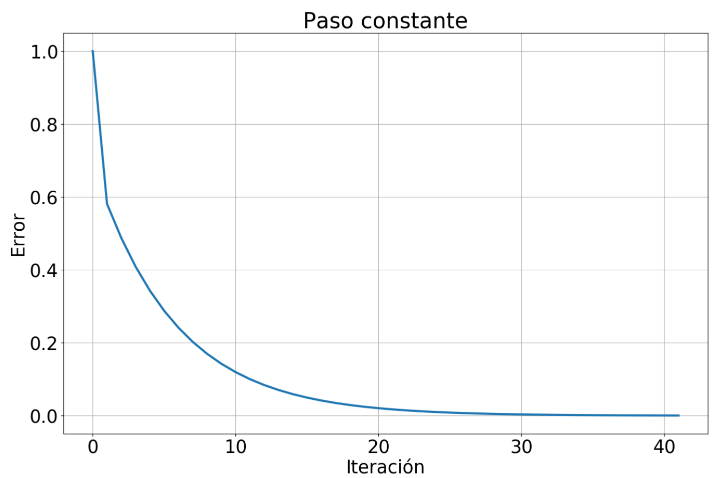
A continuación se muestra en una tabla la cantidad de iteraciones de cada método, el punto obtenido y el error final.

	Cantidad de Iteraciones	Punto obtenido	Error final
Paso Constante	41	(-0.13285,0.12783)	0.00052
Paso Decreciente	23	(-0.13285,0.12793)	0.00002
Line Search	6	(-0.13285,0.12793)	0.00000
Armijo	25	(-0.13285,0.12791)	0.00009

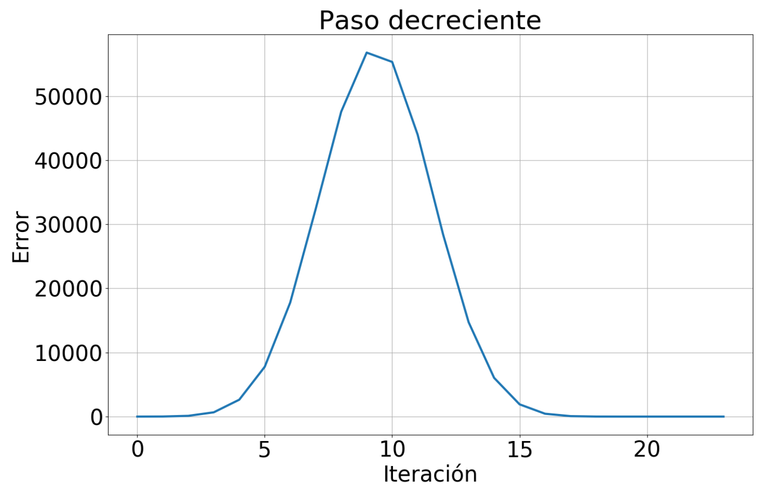
A partir de los resultados vemos que todos los métodos convergen al óptimo. El error en todos los casos es muy pequeño, destacándose que en Line Search es el menor debido a su búsqueda exhaustiva.

La gráfica del "Paso Decreciente" tiene una forma que puede llamar la atención a primera vista. El error elevado se debe que para las primeras iteraciones los valores de los pasos son grandes, lo que lleva a que si bien nos movemos en una dirección de descenso, x_{k+1} este muy lejos de x_k y por tanto es posible moverse a un punto "mucho" peor, esto se debe a que no es un método de descenso. Lo anterior se puede ver con más detalle en la Figura 3 adjunta al final de la sección, en la cual se observa la trayectoria.

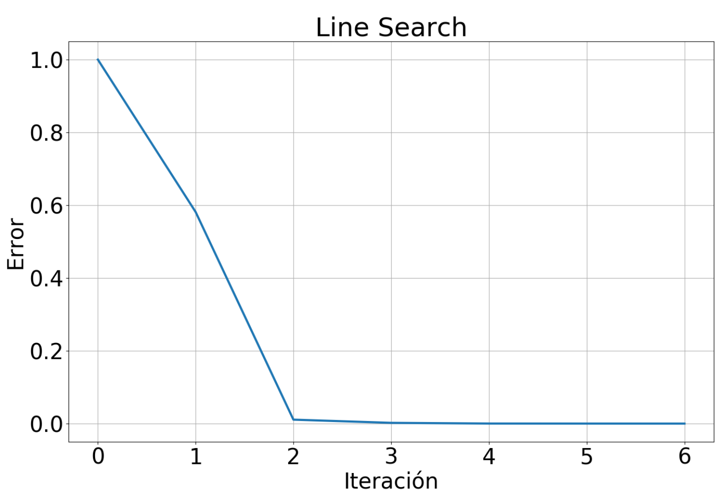
La velocidad de convergencia del "Line Search" es la más alta, esto es porque que busca en una grilla el mejor punto, por lo que se garantiza que paso a paso se va hacia un "muy buen" punto. Esta velocidad en iteraciones no significa menor costo ya que se debe evaluar la función una gran cantidad de veces por



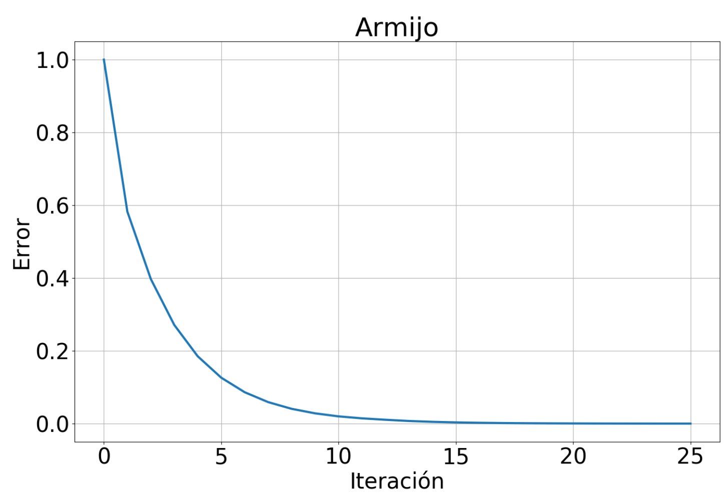
(a) $\alpha = \frac{1}{2\|\mathbf{A}\|_2^2}$



(b) $\alpha = \frac{0{,}001}{k}$. Nota: No se usa $\alpha = \frac{0{,}01}{k}$ debido a que el método no converge en las 1000 iteraciones propuestas.



(c) Grilla de 100 puntos con un largo de $0,001x$.



(d) $\sigma = 0,1$, $\beta = 0,5$, $\alpha = 0,1$

Figure 1: Evolución del error: $\frac{\|\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{x_k}\|}{\|\bar{\mathbf{x}}\|}$

iteración. También, era de esperar que el paso constante, debido a la sencillez de este método, fuera quien tuviera una mayor cantidad de iteraciones.

En cuanto a la velocidad de convergencia al usar Armijo, se puede decir que los hiperparametros elegidos no son los mejores ya que en la teoría es un método que busca aproximarse al "Line Search" sin la necesidad de evaluar muchos puntos. En este aspecto, para mejorar el resultado, se realiza una búsqueda en una grilla de hiperparametros, obteniéndose para $\sigma = 0.17$, $\beta = 0.55$, $\alpha = 0.02$ una cantidad de 7 iteraciones y un error de 0.00002, lo cual confirma que existe un conjunto de parámetros para el cual el método es mucho más veloz. En la figura 2 se ve la gráfica del error correspondiente a estos parámetros.

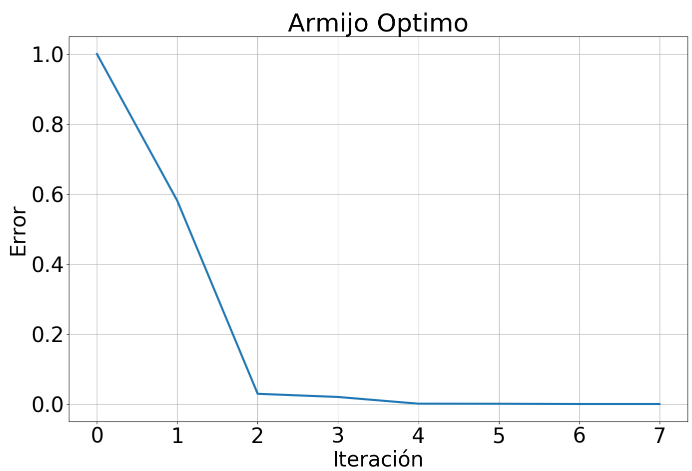
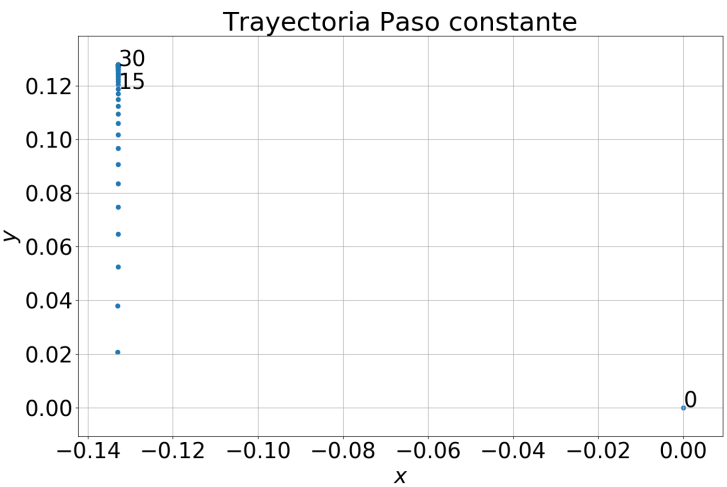


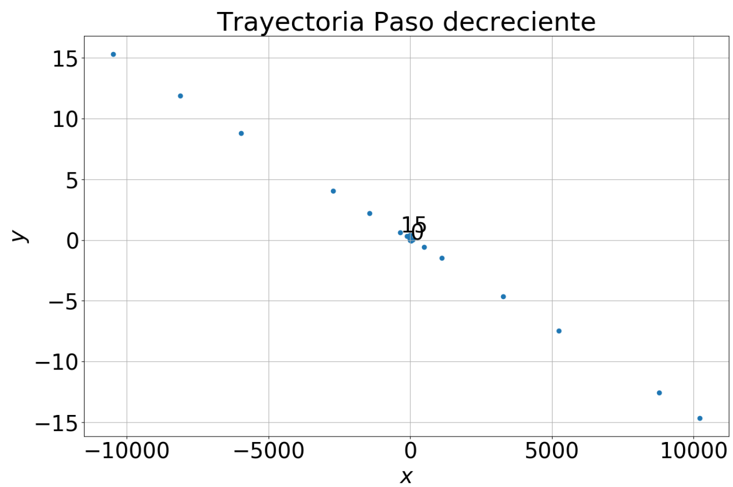
Figure 2: $\sigma = 0.17$, $\beta = 0.55$, $\alpha = 0.02$

El grid search realizado bien podría realizarse con los otros 3 métodos, pero debido a que esto esta fuera de alcance no se realiza en este caso.

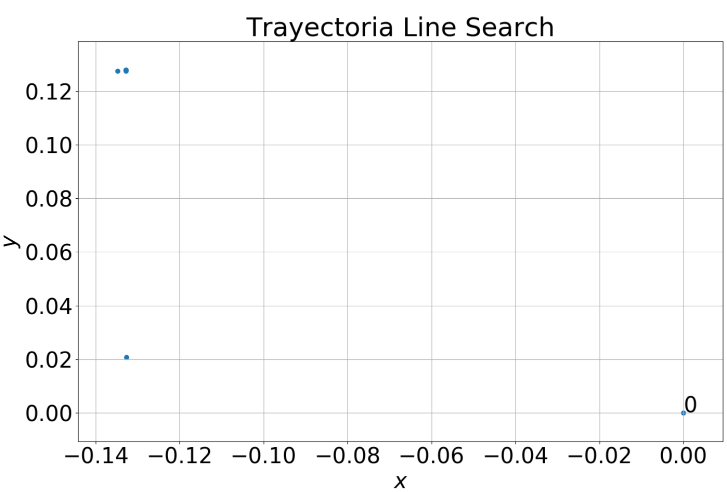
En la Figura 3 se puede observar las gráficas de trayectorias de los métodos.



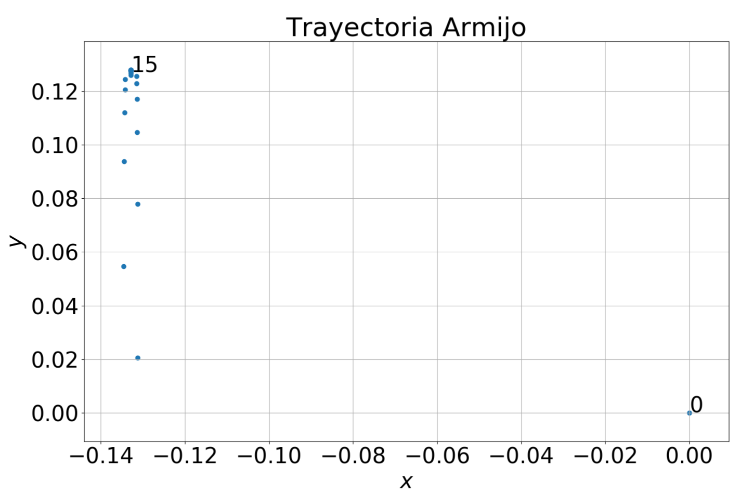
(a) $\alpha = \frac{1}{2\|\mathbf{A}\|_2^2}$



(b) $\alpha = \frac{0{,}001}{k}$.



(c) Grilla de 100 puntos con un largo de $0,001$.



(d) $\sigma = 0,1$, $\beta = 0,5$, $\alpha = 0,1$

Figure 3: Trayectoria de $\mathbf{x_k}$