

DESCENSO GRADIENTE

ALAN REYES-FIGUEROA
MÉTODOS NUMÉRICOS II

(AULA 21) 26.SEPTIEMBRE.2023

Algoritmos para Optimización

Algoritmos para minimización sin restricciones:

Los algoritmos para minimización sin restricciones son métodos iterativos que encuentran una solución aproximada.

Todos los algoritmos para minimización sin restricciones requieren que el usuario proporcione un punto de partida $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$. El usuario con conocimiento sobre la función o el conjunto de datos *input* puede estar en una buena posición para elegir \mathbf{x}_0 como una estimación razonable de la solución.

De lo contrario, el punto inicial \mathbf{x}_0 debe ser elegido por el algoritmo, ya sea mediante un enfoque sistemático o de alguna manera arbitraria (aleatorio dentro de cierto dominio).

- A partir de \mathbf{x}_0 , se genera una secuencia $\{\mathbf{x}_k\}_{k \geq 0}$ de aproximaciones.
- Para pasar de una iteración \mathbf{x}_k a la siguiente, los algoritmos usan información sobre la función f en \mathbf{x}_k , y posiblemente también información de iteraciones anteriores.
- Con esta información, se espera hallar una nueva iteración \mathbf{x}_{k+1} , usualmente con la propiedad $f(\mathbf{x}_{k+1}) < f(\mathbf{x}_k)$.

Descenso Gradiente

- Sin embargo, existen algoritmos no monótonos en los que f no disminuye en cada paso, pero f debería disminuir después de algún número m de iteraciones es decir, $f(\mathbf{x}_{k+1}) < f(\mathbf{x}_{k-j})$ para algún $j \in \{0, 1, \dots, m\}$.

Por ejemplo, seleccione

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{d}_k, \quad \text{donde } \mathbf{d}_k = -\frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{\|\nabla f(\mathbf{x}_k)\|}$$

si

$$f(\mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{d}_k) < \max_{0 \leq j \leq m} f(\mathbf{x}_{k-j}) + \gamma \alpha \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d}_k.$$

Framework general:

- Elegir \mathbf{x}_0 ,
- Hallar o establecer un criterio de paro,
- Definir cómo actualizar \mathbf{x}_k .

Descenso Gradiente

¿Cómo actualizar \mathbf{x}_k ?:

La idea es elegir una dirección \mathbf{d}_k y buscar a lo largo del semirrayo en esta dirección, $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + t\mathbf{d}_k$, para una nueva iteración \mathbf{x}_{k+1} donde la función reduzca su valor.

Definición

Dada $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ diferenciable, y un punto $\mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$, una **dirección de descenso** para f en \mathbf{x}_k es cualquier vector $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$, tal que

$$f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}) < f(\mathbf{x}_k), \quad \text{para todo } t \in (0, T). \quad (1)$$

En el contexto de optimización, una dirección de descenso en \mathbf{x}_k mueve el punto \mathbf{x}_k un poco más cerca de un mínimo local.

Muchos de los métodos de optimización basan su estrategia en hallar una dirección de descenso, por ejemplo: el método de descenso gradiente, el método de gradiente conjugado, ...

Descenso Gradiente

Ejemplo: La dirección de descenso más común para una función es $\mathbf{u} = -\frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{\|\nabla f(\mathbf{x}_k)\|}$.

Ya hemos mencionado que $-\frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{\|\nabla f(\mathbf{x}_k)\|}$ indica la dirección en la cual f decrece lo más rápido posible en el punto \mathbf{x}_k . En particular, del Teorema de Taylor, tenemos

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{u}) &= f(\mathbf{x}_k) + t\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{u} + o(\|\mathbf{u}\|) \approx f(\mathbf{x}_k) - t\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{\|\nabla f(\mathbf{x}_k)\|} \\ &\approx f(\mathbf{x}_k) - t\|\nabla f(\mathbf{x}_k)\| < f(\mathbf{x}_k). \end{aligned} \quad (2)$$

Luego, $f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{u}) < f(\mathbf{x}_k)$, para $t \in (0, 1)$ y $\mathbf{u} = -\frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)}{\|\nabla f(\mathbf{x}_k)\|}$ es una dirección de descenso.

general, lo anterior vale para cualquier vector \mathbf{d} tal que $\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d} < 0$.

Proposición

Dada $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ de clase C^1 , y $\mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$. Entonces, $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ es una dirección de descenso para f en \mathbf{x}_k , si y sólo si, $\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d} < 0$.

Prueba: (\Leftarrow) Se deduce directamente de la aproximación de Taylor de $f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d})$.

Descenso Gradiente

$$f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}) = f(\mathbf{x}_k) + t\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d} + o(\|\mathbf{d}\|) \approx f(\mathbf{x}_k) + \underbrace{t \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d}}_{<0} < f(\mathbf{x}_k),$$

para $t \in (0, 1)$, y \mathbf{d} es dirección de descenso.

(\Rightarrow) Si \mathbf{d} es dirección de descenso de f en \mathbf{x}_k , entonces existe $t_0 \in (0, T)$, tal que $f(\mathbf{x}_k + t_0\mathbf{d}) < f(\mathbf{x}_k)$.

Luego, por continuidad de ∇f y la preservación de signo, se tiene que $\nabla f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d})^T \mathbf{d} < 0$, para todo $t \in (0, t_0)$. Usando Taylor, existe $h \in (0, 1)$ tal que

$$f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}) = f(\mathbf{x}_k) + t\nabla f(\mathbf{x}_k + ht\mathbf{d})^T \mathbf{d}.$$

Como $0 < ht < t < t_0$, entonces $\nabla f(\mathbf{x}_k + ht\mathbf{d})^T \mathbf{d} < 0$, para todo $h \in (0, 1)$ y por lo tanto, $f(\mathbf{x}_k + ht\mathbf{d}) < f(\mathbf{x}_k)$, $\forall ht \in (0, t)$. Esto muestra que \mathbf{d} es una dirección de descenso. \square

La estrategia anterior ya nos da un algoritmo básico de optimización.

Descenso Gradiente

Algoritmo: (Descenso gradiente, versión naïve)

Inputs: $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ función de clase C^1 , $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$, $\alpha > 0$ tamaño de paso.

Outputs: \mathbf{x} punto crítico de f .

For $k = 0, 1, 2, \dots$ hasta que se cumpla un criterio de paro:

 Compute \mathbf{d}_k a descent direction

 (for example, any \mathbf{d}_k such that $\angle(-\nabla f(\mathbf{x}_k), \mathbf{d}_k) < |\frac{\pi}{2}|$).

 Set $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{d}_k$.

Return \mathbf{x}_{k+1} .

En el caso en que $\mathbf{d}_k = -\nabla f(\mathbf{x}_k)$, tenemos

Algoritmo: (Steepest descent, versión naïve)

Inputs: $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ función de clase C^1 , $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$, $\alpha > 0$ tamaño de paso.

Outputs: \mathbf{x} punto crítico de f .

For $k = 0, 1, 2, \dots$ hasta que se cumpla un criterio de paro:

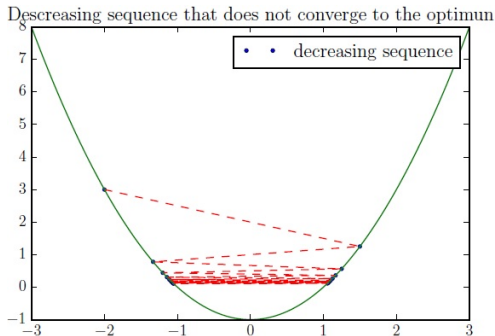
 Set $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \alpha \nabla f(\mathbf{x}_k)$.

Return \mathbf{x}_{k+1} .

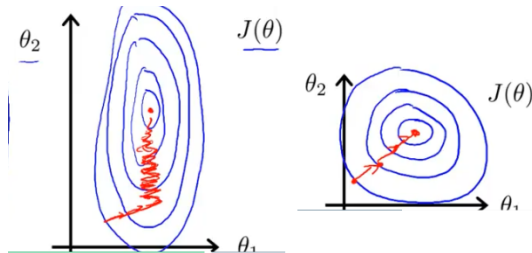
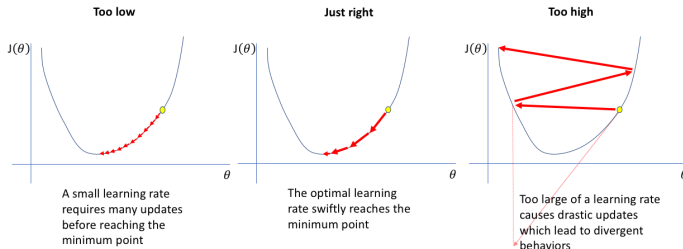
Descenso Gradiente

A la constante $\alpha_k > 0$ se le llama el **tamaño de paso**. Usualmente este tamaño de paso α_k cambia en cada iteración, y se elige en función de la iteración y del punto, α_k . El caso más simple se da al elegir $\alpha_k = \alpha$ constante, como en los algoritmos naïve anteriores.

Elegir el tamaño de paso adecuado es crucial. Si α_k es demasiado grande, es posible que el algoritmo no detecte las regiones donde se encuentra el mínimo local.



Descenso Gradiente



Descenso Gradiente

Ejemplo: Considere la función $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^2$. f es diferenciable y $\nabla f(\mathbf{x}) = 2\mathbf{x}$.

- Tomando $\alpha = 1$, obtenemos la iteración de descenso máximo

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}_k - 2\mathbf{x}_k = -\mathbf{x}_k,$$

la cual es una secuencia alternante $\mathbf{x}_0, -\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0, -\mathbf{x}_0, \dots$, no convergente.

- Tomando $\alpha = \frac{1}{4}$, obtenemos la iteración de descenso máximo

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \frac{1}{4}\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}_k - \frac{2}{4}\mathbf{x}_k = \frac{1}{2}\mathbf{x}_k.$$

Esta es una secuencia geométrica convergente $\mathbf{x}_0, \frac{1}{2}\mathbf{x}_0, \frac{1}{4}\mathbf{x}_0, \frac{1}{8}\mathbf{x}_0, \dots$

Una estrategia empírica muy simple, pero bastante útil, para elegir α es comenzar con un valor pequeño (e.g. $\alpha = 0.1$). Si con este valor de α no se observa convergencia del método de descenso gradiente, se prueban valores usando una escala potencial:

- $\alpha = 0.01, \alpha = 0.001; \alpha = 0.0001, \dots$
- $\alpha = \rho^1 \alpha_0, \alpha = \rho^2 \alpha_0, \alpha = \rho^3 \alpha_0, \dots$, donde $0 < \rho < 1$ (por ejemplo: $\rho = \frac{1}{2}, \frac{1}{4}$ ó $\rho = \frac{1}{10}$)

Descenso Gradiente

Criterios de paro: Existen muchos criterios de paro que pueden usarse para detener los algoritmos de optimización numérica.

- Error absoluto de iteraciones: Se mide el error absoluto entre dos iteraciones consecutivas

$$||\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k||_{norm} < tol.$$

- Error relativo de iteraciones: Se compara el error relativo entre dos iteraciones consecutivas \mathbf{x}_k y \mathbf{x}_{k+1}

$$\frac{||\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k||_{norm}}{||\mathbf{x}_k||_{norm}} < tol.$$

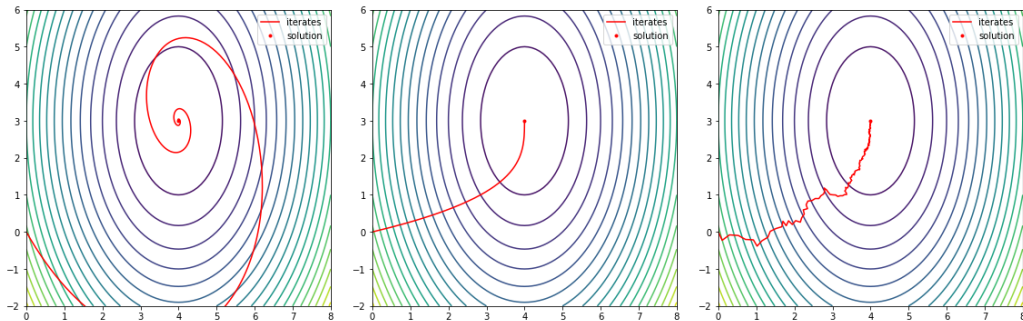
- Error abs/rel del valor de la función: Se mide el error entre dos valores de $f(\mathbf{x}_k)$ en iteraciones consecutivas. Así

$$|f(\mathbf{x}_{k+1}) - f(\mathbf{x}_k)| < tol.$$

- Norma del gradiente: En un mínimo local, sabemos que $\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$. Se busca entonces que las normas del gradiente sean suficientemente pequeñas

$$||\nabla f(\mathbf{x}_k)||_{norm} < tol.$$

Descenso Gradiente



Varios métodos gradiente aplicados a una función cuadrática: (a) Descenso gradiente con dirección de descenso con ángulo constante φ con $\nabla f(\mathbf{x}_k)$; (b) Descenso máximo; (c) Descenso gradiente con dirección de descenso aleatoria.

Descenso Gradiente

Otra estrategia más adecuada para elegir el tamaño de paso es el llamado **esquema de Cauchy**.

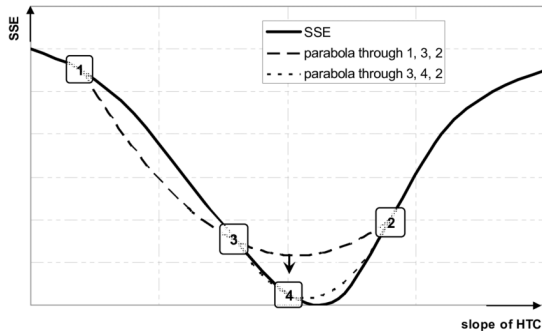
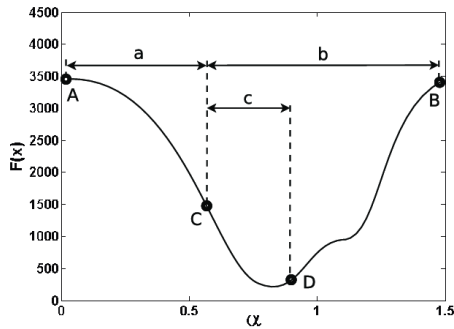
Este consiste en lo siguiente: Dado $\mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$, luego de elegir la dirección de búsqueda \mathbf{d}_k , buscamos cuál es el valor de $\alpha_k > 0$ que minimiza la función f , restringida a la recta $\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}_k$, $t > 0$. Esto es, definimos

$$\alpha_k = \operatorname{argmin}_{t \in \mathbb{R}} f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}_k). \quad (3)$$

Observe que (3) corresponde a un problema de minimización 1-dimensional. Es posible aplicar aquí las técnicas de optimización que aprendieron en Métodos Numéricos I.

- Método de búsqueda de Fibonacci (*Fibonacci search*),
- Método de la razón áurea (*golden ration search*),
- Interpolación parabólica (*quadratic interpolation*),
- Método de Newton,
- ...

Descenso Gradiente



Optimización 1-dimensional: (a) *Golden-search*, (b) interpolación parabólica.

Ver <https://web2.qatar.cmu.edu/~gdicaro/15382/additional/one-dimensional-search-methods.pdf>

Descenso Gradiente

Algoritmo: (*Descenso gradiente*, versión esquema de Cauchy)

Inputs: $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ función de clase C^1 , $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$.

Outputs: \mathbf{x} punto crítico de f .

For $k = 0, 1, 2, \dots$ hasta que se cumpla un criterio de paro:

 Define $\mathbf{d}_k = -\nabla f(\mathbf{x}_k)$, or any other descent direction.

 Compute α_k such that

$$\alpha_k = \operatorname{argmin}_{t \in \mathbb{R}} f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}_k),$$

 by any 1-dimensional optimization method,

 Set $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k$.

Return \mathbf{x}_{k+1} .

Descenso Gradiente

Otra dirección de búsqueda importante es la **dirección de Newton**. Ésta se deriva de la aproximación de Taylor de segundo orden

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}) &= f(\mathbf{x}_k) + \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d} + \frac{1}{2} \mathbf{d}^T D^2 f(\mathbf{x}_k) \mathbf{d} + o(\|\mathbf{d}\|^2). \\ &\approx \underbrace{f(\mathbf{x}_k) + \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d} + \frac{1}{2} \mathbf{d}^T D^2 f(\mathbf{x}_k) \mathbf{d}}_{m_k(\mathbf{d})}. \end{aligned} \quad (4)$$

Observe que $m_k(\mathbf{d})$ es una función cuadrática en \mathbb{R}^n . Si $D^2 f(\mathbf{x}_k)$ es positiva definida, entonces m_k es convexa, y encontramos la dirección de Newton hallando el vector $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ como el mínimo global de esta función cuadrática. Esto es

$$\nabla m_k(\mathbf{d}) = \nabla f(\mathbf{x}_k) + D^2 f(\mathbf{x}_k) \mathbf{d} = \mathbf{0} \implies \mathbf{d}_{Newton} = -(D^2 f(\mathbf{x}_k))^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_k).$$

- Podemos usar la dirección de Newton en un método de descenso gradiente siempre que $D^2 f \succ \mathbf{0}$.
- Usamos tamaño de paso $\alpha = 1$ con la dirección de Newton. Sin embargo, α puede ajustarse cuando los resultados no son satisfactorios.

Descenso Gradiente

Algoritmo: (Descenso gradiente, versión Newton)

Inputs: $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ función de clase C^2 , con Hessiana D^2f positiva definida en cada punto; $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$, $\alpha_k > 0$ tamaño de paso (usualmente $\alpha_k = 1$).

Outputs: \mathbf{x} punto crítico de f .

For $k = 0, 1, 2, \dots$ hasta que se cumpla un criterio de paro:

 Define $\mathbf{d}_k = -(D^2f(\mathbf{x}_k))^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_k)$,

 Set $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k$.

Return \mathbf{x}_{k+1} .

Obs:

- Cuando $D^2f(\mathbf{x}_k)$ no es positiva definida en alguno de los puntos iterados \mathbf{x}_k , el método aún se puede utilizar. En este caso, se reemplaza el hessiano por su aproximación simétrica $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, más cercana, que sea positiva definida.
- Esto puede hacerse hallando la descomposición espectral $D^2f(\mathbf{x}_k) = U\Lambda U^T$, y reemplazando todos los autovalores negativos de Λ por $\varepsilon > 0$; $A = U\Lambda_\varepsilon U^T$.

Descenso Gradiente

- El cálculo de la hessiana $D^2f(\mathbf{x}_k)$ en cada iteración, consume mucho costo computacional (sobre todo en altas dimensiones).

Existen otros métodos de tipo gradiente que, en lugar de calcular exactamente el hessiano $D^2f(\mathbf{x}_k)$, utilizan una aproximación B_k , que se actualiza en cada paso.

De la aproximación de Taylor

$$\begin{aligned}\nabla f(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}) &= \nabla f(\mathbf{x}_k) + \int_0^1 D^2f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}) \mathbf{d} dt \\ &= \nabla f(\mathbf{x}_k) + D^2f(\mathbf{x}_k) \mathbf{d} + \underbrace{\int_0^1 [D^2f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}) - D^2f(\mathbf{x}_k)] \mathbf{d} dt}_{o(\|\mathbf{d}\|)}.\end{aligned}$$

Haciendo $\mathbf{d} = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k \Rightarrow \nabla f(\mathbf{x}_{k+1}) = \nabla f(\mathbf{x}_k) + D^2f(\mathbf{x}_k) (\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k) + o(\|\mathbf{d}\|)$.
Cuando $\mathbf{x}_k, \mathbf{x}_{k+1}$ están en una región cercana al mínimo \mathbf{x}^* , donde $D^2f(\mathbf{x}_k) \succ 0$, resulta

$$D^2f(\mathbf{x}_k) \mathbf{d} \approx \nabla f(\mathbf{x}_{k+1}) - \nabla f(\mathbf{x}_k). \quad (5)$$

Descenso Gradiente

Así, elegimos la aproximación de B_{k+1} de modo que imite la propiedad (5) anterior. Así, requerimos que B_{k+1} cumpla la **ecuación secante**:

$$B_{k+1}\mathbf{s}_k = \mathbf{y}_k, \quad (6)$$

donde $\mathbf{s}_k = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k$, y $\mathbf{y}_k = \nabla f(\mathbf{x}_{k+1}) - \nabla f(\mathbf{x}_k)$. Además, requerimos que B_{k+1} sea simétrica, y que la diferencia $B_{k+1} - B_k$ sea de bajo rango.

Estos son los métodos llamados **métodos quasi-Newton**. Dos de las fórmulas más populares para actualizar el hessiano son

- el método **simétrico de rango 1 (SR1)**:

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(\mathbf{y}_k - B_k\mathbf{s}_k)(\mathbf{y}_k - B_k\mathbf{s}_k)^T}{(\mathbf{y}_k - B_k\mathbf{s}_k)^T\mathbf{s}_k}.$$

- el método **BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno)**:

$$B_{k+1} = B_k - \frac{B_k\mathbf{s}_k\mathbf{s}_k^TB_k}{\mathbf{s}_k^TB_k\mathbf{s}_k} + \frac{\mathbf{y}_k\mathbf{y}_k^T}{\mathbf{y}_k^T\mathbf{s}_k}.$$