Descenso Gradiente

Alan Reyes-Figueroa

Métodos Numéricos II

(Aula 17) 30.agosto.2021

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 $j \in \{0, 1, \ldots, m\}$.

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

¿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 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 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*

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

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 grdiente conjugado, ...

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

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

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 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 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

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

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: $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 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,... hasta que se cumpla un criterio de paro:
    Compute d_k a descent direction
    (for example, any d_k such that ∠(−∇f(x_k), d_k) < |π/2|).
    Set x_{k+1} = x_k + α d_k.
Return x_{k+1}.
```

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

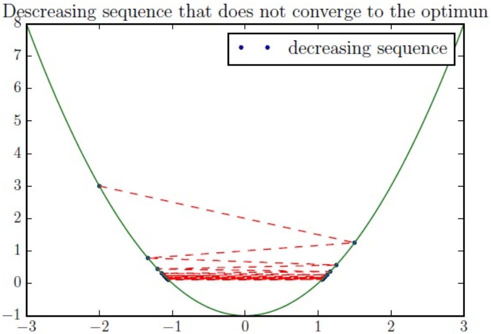
Algoritmo: (*Steepest descent*, versión naïve)
Inputs: $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ función de clase C^1, $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$, $\alpha > 0$ tamaño de paso.
Outputs: $\mathbf{x}$ punto crítico de f.

```
For k = 0,1,2,... hasta que se cumpla un criterio de paro:
    Set x_{k+1} = x_k − α ∇f(x_k).
Return x_{k+1}.
```

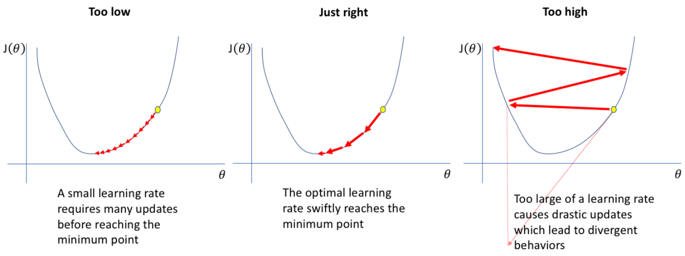
Descenso Gradiente

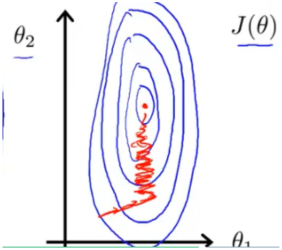
A la constante $\alpha_k > 0$ se le llama el **tamaño de paso**. Usualmente este tamaño de paso α_k cambia en cada iteración, y se elige en función de la iteración y del punto, α_k. El caso más simple se da al elegir $\alpha_k = \alpha$ constante, como en los algoritmos naïve anteriores.

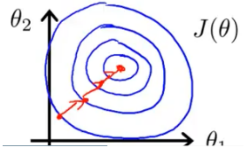
Elegir el tamaño de paso adecuado es crucial. Si α_k es demasiado grande, es posible que el algoritmos no detecte las regiones donde de encuentra el mínimo local.



Descenso Gradiente







Ejemplo: Considere la función $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^2$. 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 $\mathbf{x}_0, -\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0, -\mathbf{x}_0, \ldots$, no convergente.
- Tomando $\alpha = \frac{1}{4}$, obtenemos la iteración de descenso máximo
$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \tfrac{1}{4}\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}_k - \tfrac{2}{4}\mathbf{x}_k = \tfrac{1}{2}\mathbf{x}_k.$$
Esta es una secuencia geométrica convergente $\mathbf{x}_0, \frac{1}{2}\mathbf{x}_0, \frac{1}{4}\mathbf{x}_0, \frac{1}{8}\mathbf{x}_0, \ldots$.

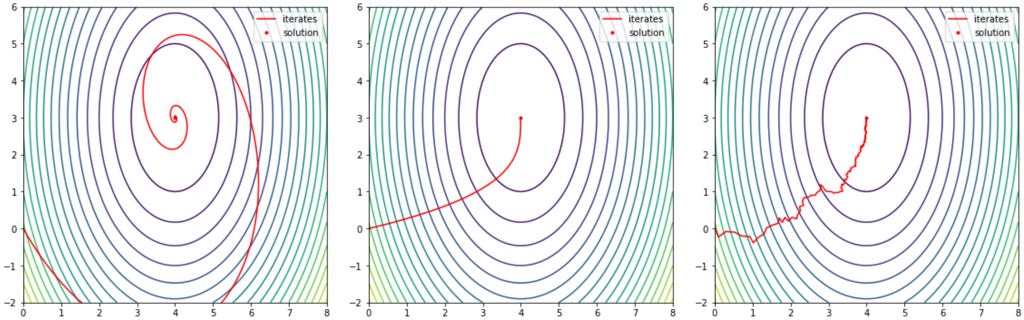
Una estrategia empírica muy simple, pero bastante útil, para elgir α es comenzar con un valor pequeño (*e.g.* $\alpha = 0.1$). Si con este valor de α no se observa convergencia del método de descenso gradiente, se prueban valores usando una escala potencial:

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

Criterios de paro: Existen muchos criterios de paro que pueden usarse para deterner 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**.

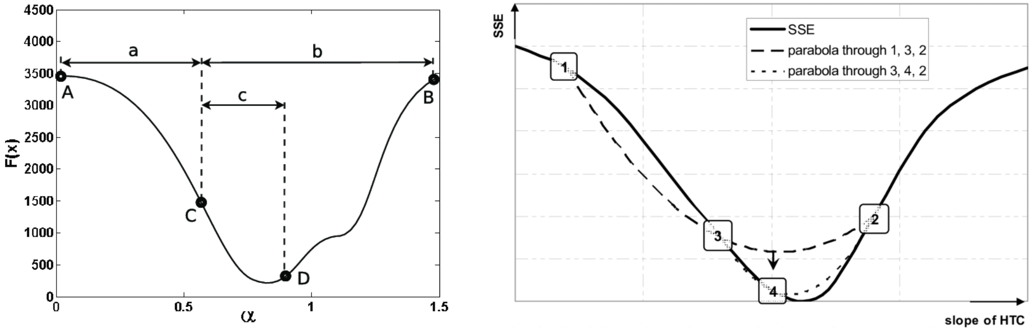
Este consiste en lo siguiente: Dado $\mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$, luego de elegir la dirección de búsqueda $\mathbf{d}_k$, buscamos cuál es el valor de $\alpha_k > 0$ que minimiza la función f, restricta a la recta $\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}_k$, $t > 0$. Esto es, definimos

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

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 razon aúrea (*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`

Algoritmo: (*Descenso gradiente*, versión esquema de Cauchy)
Inputs: $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ función de clase C^1, $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$.
Outputs: $\mathbf{x}$ punto crítico de f.

```
For k = 0,1,2,... hasta que se cumpla un criterio de paro:
    Define d_k = -∇f(x_k), or any other descent direction.
    Compute α_k such that
```

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

```
    by any 1-dimensional optimization method,
    Set x_{k+1} = x_k + α_k d_k.
Return 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

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

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

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

- Podemos usar la dirección de Newton en un método de descenso gradiente siempre que $D^2 f \succ 0$.
- 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: $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ función de clase C^2, con Hessiana $D^2 f$ 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,... hasta que se cumpla un criterio de paro:`
    `Define` $\mathbf{d}_k = -\big(D^2 f(\mathbf{x}_k)\big)^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_k)$,
    `Set` $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k$.
`Return` $\mathbf{x}_{k+1}$.

Obs:

- Cuando $D^2 f(\mathbf{x}_k)$ no es positiva definida en alguno de los puntos iterados $\mathbf{x}_k$, el método aún se pude 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 $D^2 f(\mathbf{x}_k) = U \Lambda U^T$, y reemplazando todos los autovalores negativos de Λ por $\varepsilon > 0$; $A = U \Lambda_\varepsilon U^T$.

Descenso Gradiente

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

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

  De la aproximación de Taylor

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

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

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

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**:

$$B_{k+1}\mathbf{s}_k = \mathbf{y}_k, \tag{6}$$

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)**:

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