Descenso Gradiente

Alan Reyes-Figueroa

Modelación y Simulación (Aula 22) 08.octubre.2024

Algoritmos para Optimización

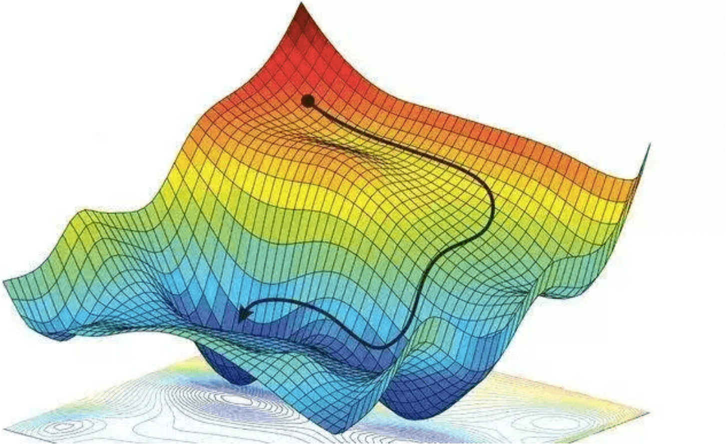
Algoritmos para minimización sin restricciones:

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

UVG UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Descenso Gradiente



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

Framework general:

- Elegir $\mathbf{x}_0$,
- Definir cómo actualizar $\mathbf{x}_k$,
- Establecer un criterio de paro.

¿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*

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

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.

Estrategia para definir una dirección de descenso:

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

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

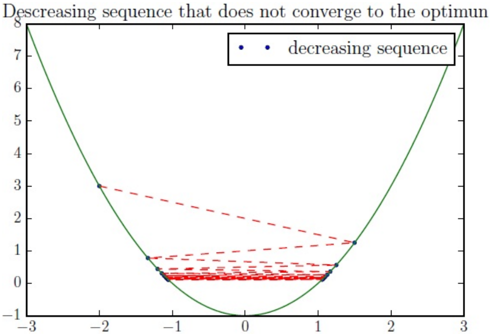
Algoritmo: (*Steepest descent*, versión naïve)
Inputs: $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ función de clase C^1, $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$, $\alpha > 0$ tamaño de paso.
Outputs: $\mathbf{x}$ punto crítico de f.

```
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}.
```

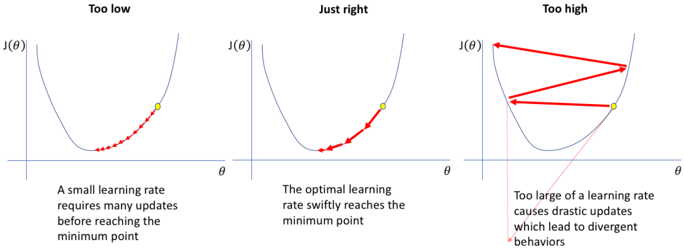
Descenso Gradiente

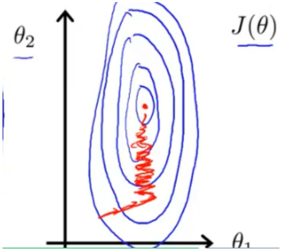
A la constante $\alpha_k > 0$ se le llama el **tamaño de paso**. Usualmente este tamaño de paso α_k cambia en cada iteración, y se elige en función de la iteración y del punto, α_k. El caso más simple se da al elegir $\alpha_k = \alpha$ constante, como en los algoritmos naïve anteriores.

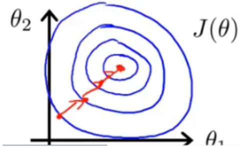
Elegir el tamaño de paso adecuado es **crucial**! Si α_k es demasiado grande, es posible que el algoritmos no detecte las regiones donde de encuentra el mínimo local.



Descenso Gradiente







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:

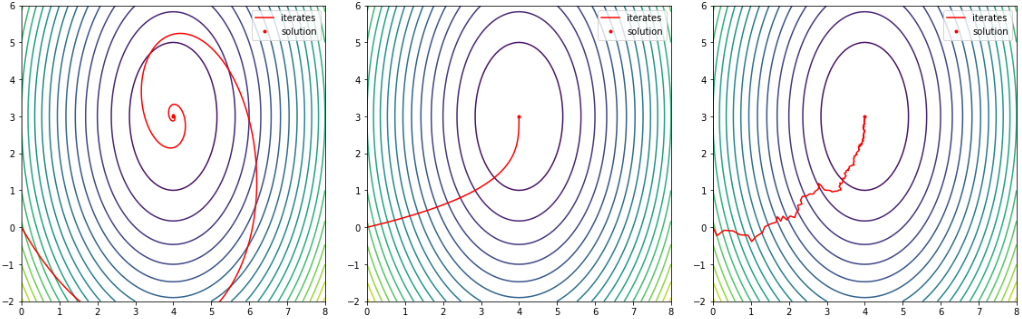
- $\alpha = 0.01$, $\alpha = 0.001$; $\alpha = 0.0001, \ldots$
- $\alpha = \rho^1\alpha_0$, $\alpha = \rho^2\alpha_0$, $\alpha = \rho^3\alpha_0, \ldots$, donde $0 < \rho < 1$ (por ejemplo: $\rho = \frac{1}{2}, \frac{1}{4}$ ó $\rho = \frac{1}{10}$)

Descenso Gradiente

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 de Cauchy

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

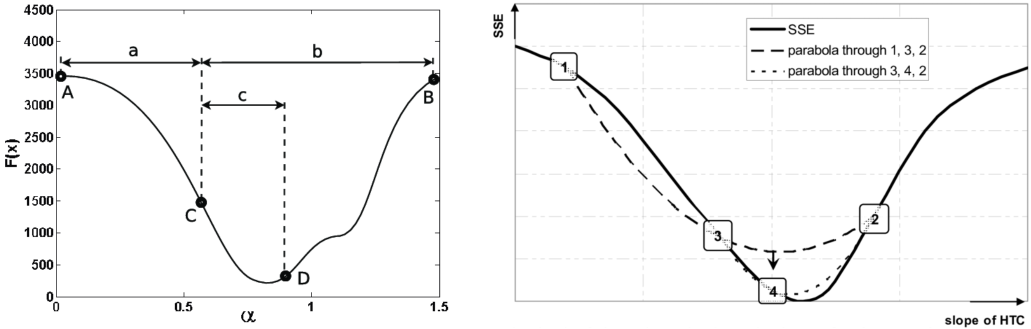
Este consiste en lo siguiente: Dado $\mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$, luego de elegir la dirección de búsqueda $\mathbf{d}_k$, buscamos cuál es el valor de $\alpha_k > 0$ que minimiza la función f, restricta a la recta $\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}_k$, $t > 0$. Esto es, definimos

$$\alpha_k = \text{argmin}_{t\in\mathbb{R}} f(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}_k). \tag{2}$$

Observe que (2) 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 de Cauchy



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

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

Descenso de Cauchy

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}.
```