מודלים לא ליניאריים בחקר ביצועים --- תרגיל בית 5

26 במאי 2024

הנחיות:

- יש להגיש שני קבצים בלבד:
  - קובץ PDF עם תשובות לשאלות וצילום מסך של קוד ופלטים.
  - קובץ ZIP המכיל את כל קובצי הקוד אותם נדרשתם לכתוב.

שאלה 1

פונקציית מטרה שימושית בלמידת מכונה מונחית היא $l\colon \mathbb{R}^{n+1} \to \mathbb{R}$ המוגדרת על־ידי

$$l(\mathbf{w}, v) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \log\left(1 + e^{b_i\left(\mathbf{w}^T \mathbf{a}_i + v\right)}\right),$$

כאשר $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \ldots, \mathbf{a}_N \in \mathbb{R}^n$ עבור $N \in \mathbb{N}$ הם וקטורים כלשהם, $b_1, b_2, \ldots, b_N \in \{-1, 1\}$ קבועים ו־$\mathbf{w} \in \mathbb{R}^n, v \in \mathbb{R}$ משתנים. הסבירו במילים מדוע l גזירה ברציפות והוכיחו שקבוע ליפשיץ של הגרדיאנט של l הוא $\frac{1}{4N} \sum_{i=1}^{N} \left(\|\mathbf{a}_i\|^2 + 1\right)$.
הכוונה: אל תחשבו את הקבוע ישירות, אלא השתמשו בטענות ובדוגמה שראינו בתרגול.

שאלה 2

תהי $\{\mathbf{x}_k\}_{k\geq 0}$ סדרה הנוצרת ע"י שיטת הגרדיאנט עם חיפוש קווי מדויק למזעור הפונקציה הריבועית $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{Q} \mathbf{x}$ עבור מטריצה $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ $0 \prec$. הוכיחו כי לכל $k \in \mathbb{N}$ מתקיים

$$f(\mathbf{x}_{k+1}) \leq \left(\frac{\lambda_{\max}(\mathbf{Q}) - \lambda_{\min}(\mathbf{Q})}{\lambda_{\max}(\mathbf{Q}) + \lambda_{\min}(\mathbf{Q})}\right)^2 f\left(\mathbf{x}^k\right).$$

הכוונה: השתמשו באי־שוויון הבא (ללא הוכחה): אם $\mathbf{Q} \succ 0$ אז לכל $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ מתקיים

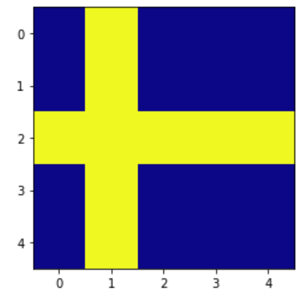
$$\frac{\left(\mathbf{y}^T \mathbf{y}\right)^2}{\left(\mathbf{y}^T \mathbf{A} \mathbf{y}\right)\left(\mathbf{y}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{y}\right)} \geq \frac{4\lambda_{\max}(\mathbf{Q})\,\lambda_{\min}(\mathbf{Q})}{\left(\lambda_{\max}(\mathbf{Q}) + \lambda_{\min}(\mathbf{Q})\right)^2}.$$

כמו כן, ניתן להניח כי $\mathbf{x}_k^T \mathbf{Q} \mathbf{x}_k > 0$ לכל k.

שאלה 3

שאלה זו עוסקת בשחזור תמונה מטושטשת (Image Deblurring). תמונה היא מטריצה שבה כל רכיב מייצג פיקסל עם צבע לפי שיטת צבעים מסוימת (gray, plasma, etc.). למשל, הפקודות הבאות יוצרות את דגל שוודיה:

```
A=[[1,2,1,1,1],[1,2,1,1,1],[2,2,2,2,2],[1,2,1,1,1],[1,2,1,1,1]]
A = np.array(A)
plt.imshow(A, cmap='plasma')
plt.show()
```



ניתן לייצג טשטוש תמונה כהעתקה לינארית עליה (למשל, צילום תוך כדי נסיעה). לצורך כך נתייחס לתמונה בתצורתה הווקטורית, המתקבלת ע"י שרשור עמודותיה לווקטור עמודה אחד. מכאן, פעולת הטשטוש של תמונה מקורית $\mathbf{x}$ ניתנת להצגה כ־$\mathbf{b} = \mathbf{A}\mathbf{x}$. המטריצה $\mathbf{A}$ נקראת מטריצת הטשטוש והווקטור $\mathbf{b}$ הוא התמונה המטושטשת. אנו מעוניינים למצוא את התמונה המקורית $\mathbf{x}$ (ללא הטשטוש), ולכן נפתור את בעיית הריבועים הפחותים הבאה:

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} \left\{ f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2 \right\}.$$

הורידו את הקובץ blur.ipynb מאתר הקורס. אין צורך להבין כיצד פועלת פונקציה זו. הפקודות הבאות יוצרות תמונה ואת התמונה המטושטשת:

```
A,b,x = blur(256, 5, 1)
plt.figure(figsize=(6,6))
plt.imshow(x.reshape(256,256), cmap='gray')
plt.show()
plt.figure(figsize=(6,6))
plt.imshow(b.reshape(256,256), cmap='gray')
plt.show()
```

א. הפעילו את שיטת הגרדיאנט עם חיפוש קווי מדויק על־מנת לשחזר את התמונה הלא מטושטשת $\mathbf{x}$. התמונה ההתחלתית היא תמונת האפסים. צרפו את הפלט המתקבל לאחר 1, 10, 100 ו־1000 איטרציות. (ניתן להשתמש בפונקציות מתרגיל הבית הקודם -- רק שימו לב לשנות את תנאי העצירה בהתאם). אין צורך לבדוק את נכונות הקלט. הניחו ש־$\mathbf{A}$ בעלת עמודות בת"ל.

ב. ראינו בכיתה שקבוע ליפשיץ של הגרדיאנט של f הוא $2\lambda_{\max}\left(\mathbf{A}^T\mathbf{A}\right)$. הוכיחו שזהו קבוע ליפשיץ ההדוק (קטן) ביותר.

הכוונה: הראו שיש וקטורים עבורם האי־שוויון שקיים בהגדרת קבוע ליפשיץ הוא שוויון.

חיזרו על הסעיף הקודם עם גודל צעד קבוע $\frac{1}{L}$, כאשר L הוא קבוע ליפשיץ ההדוק ביותר של הפונקציה ∇f. השתמשו בפונקציה `eigs` בשביל לחשב את L (בזמן ההרצה, חשבו את L והציבו את ערכו במשתנה, והימנעו

מלחשב את L בכל איטרציה מחדש). איזו משתי הגישות מהירה יותר? איזו משתי הגישות נותנת תוצאה איכותית יותר?

ג. שיטת גרדיאנט מואצת (Accelerated Gradient) משיגה קצב התכנסות של $O\left(\frac{1}{k^2}\right)$, בעוד שזה של שיטת הגרדיאנט הוא $O\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$ (החיסרון הוא שהשיטה המואצת לא בטוח מתכנסת לנקודה סטציונרית). השיטה המואצת נראית כך:

$$\begin{aligned}
&\text{set } \mathbf{y}^1 := \mathbf{x}^0 \text{ and } t^1 = 1\\
&\text{for } k = 1, 2, \ldots \text{ do:}\\
&\quad \mathbf{x}^k = \mathbf{y}^k - \frac{1}{L}\nabla f\left(\mathbf{y}^k\right)\\
&\quad t_{k+1} = \frac{1 + \sqrt{1 + 4t_k^2}}{2}\\
&\quad \mathbf{y}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \frac{t^k - 1}{t^{k+1}}\left(\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k-1}\right)\\
&\text{end for}
\end{aligned}$$

כיתבו פונקציית python המופעלת באופן הבא:

```
x  ,fs  ,gs  ,ts = AG(f, gf, L, x0, max_iter)
```

עבור f פונקציה בעלת גרדיאנט ליפשיצי עם קבוע L. תנאי העצירה הוא `max_iter` איטרציות ומשמעות שאר המשתנים האחרים זהה למה שמוגדר בשאלה 1 בתרגיל הבית הקודם.

ד. חיזרו על סעיף א' עבור שיטת הגרדיאנט המואצת. איזו משלוש השיטות נותנת תוצאה איכותית יותר?

בנוסף, צרפו תרשים אחד עם ארבעה גרפים עבור ערכי פונקציית המטרה והזמן המצטבר ל־1000 איטרציות עבור שיטת צעד קבוע ועבור שיטת הגדריאנט המואצת. השתמשו בסולם לוגריתמי בציר ה־y. איזו משתי השיטות סיימה 1000 איטרציות מהר יותר? איזו משתי השיטות זקוקה לפחות איטרציות בשביל להגיע לערך פונקציית מטרה נמוך יותר?

שאלה 4

בבעיית איכון מיקום של עצם מסוים (למשל, מקום נפילת רקטה על־סמך גורמי תצפית שונים) נתונים m מיקומים של חיישנים $\mathcal{A} \equiv \{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \ldots, \mathbf{a}_m\} \subset \mathbb{R}^n$ ומרחקים מוערכים $d_1, d_2, \ldots, d_m \geq 0$ בין החיישנים לבין העצם. כלומר, אם נסמן את מיקום העצם ב־$\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, אז אנו יודעים כי $\|\mathbf{x} - \mathbf{a}_i\| \approx d_i$ לכל $1, 2, \ldots, m$. לכן, דרך להעריך את מיקום העצם $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ היא לפתור את בעיית האופטימיזציה הבאה:

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \left\{ f(\mathbf{x}) \equiv \sum_{i=1}^{m} \left(\|\mathbf{x} - \mathbf{a}_i\| - d_i\right)^2 \right\}.$$

א. הסבירו (אין צורך בהוכחה מתמטית) מדוע פתרון בעיית אופטימיזציה זו אכן נותן הערכה עבור מיקומו האמיתי של העצם.

ב. הראו שתנאי האופטימליות $\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}_n$ עבור $\mathbf{x} \notin \mathcal{A}$ שקול לתנאי

$$\mathbf{x} = \frac{1}{m}\left(\sum_{i=1}^{m} \mathbf{a}_i + \sum_{i=1}^{m} d_i \frac{\mathbf{x} - \mathbf{a}_i}{\|\mathbf{x} - \mathbf{a}_i\|}\right).$$

ג. הראו ששיטת נקודה השבת הבאה

$$\mathbf{x}^{k+1}=\frac{1}{m}\left(\sum_{i=1}^{m}\mathbf{a}_i+\sum_{i=1}^{m}d_i\frac{\mathbf{x}^k-\mathbf{a}_i}{\|\mathbf{x}^k-\mathbf{a}_i\|}\right),$$

היא שיטת גרדיאנט, תחת ההנחה ש־$\mathbf{x}^k\notin\mathcal{A}$ לכל k. מהו גודל הצעד?

שאלה 5

א. תהי $\mathbf{A}\in\mathbb{R}^n$ הפיכה ויהי $\mathbf{b}\in\mathbb{R}^n$. יהי $\Delta\in\mathbb{R}^n$ כך ש־$\|\Delta\|\approx 0$. נסמן $\Delta\mathbf{b}\equiv\mathbf{b}+\Delta$. נסמן ב־$\mathbf{x}$ וב־$\Delta\mathbf{x}$ את הפתרונות של מערכות המשוואות $\mathbf{Ay}=\mathbf{b}$ ו־$\mathbf{Ay}=\Delta\mathbf{b}$ בהתאמה. הוכיחו כי

$$\frac{\|\Delta\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|}\le\kappa\left(\mathbf{A}\right)\frac{\|\Delta\mathbf{b}\|}{\|\mathbf{b}\|}.$$

מהי המשמעות של אי־שוויון זה?

ב. נתונות הפונקציות $f\colon\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ ו־$g\colon\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ המוגדרות על־ידי $f\left(\mathbf{x}\right)=\frac{1}{2}\mathbf{x}^T\mathbf{F}\mathbf{x}$ ו־$g\left(\mathbf{x}\right)=\frac{1}{2}\mathbf{x}^T\mathbf{G}\mathbf{x}$ עבור

$$\mathbf{G}=\begin{pmatrix}10&8&9\\8&13&11\\9&11&15\end{pmatrix},\quad\mathbf{F}=\begin{pmatrix}2&2&3\\2&5&5\\3&5&7\end{pmatrix}.$$

נניח והפעלנו את שיטת הגרדיאנט למציאת ממזער של f ושל g עם גודל צעד קבוע מיטבי. נניח שתנאי העצירה הוא $\|\nabla f\left(\mathbf{x}\right)\|\le\varepsilon$. איזו משתי הבעיות צפויה להתכנס מהר יותר עבור נקודת ההתחלה $(1000,1000,1000)$? הסבירו את תשובתכם (תוכלו להשתמש ב־python בשביל להימנע מלבצע חישובים ידניים, אך אין צורך להגיש קוד).

שאלה 6 (אין חובת הגשה -- בונוס 10 נקודות)

נתונה $f\colon\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ גזירה ברציפות, חסומה מלרע ובעלת גרדיאנט ליפשיצי עם קבוע L. נניח ש־$\nabla^2 f\left(\mathbf{x}\right)\succeq 0$ לכל $\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n$. תהי $\left\{\mathbf{x}^k\right\}_{k\ge 0}$ הסדרה הנוצרת ע"י שיטת הגרדיאנט עם גודל צעד קבוע $t\in\left(0,\frac{2}{L}\right)$. נניח שלבעיה $\min_{x\in\mathbb{R}^n}f\left(\mathbf{x}\right)$ קיים פתרון ב־$\mathbb{R}^n$ ונסמן $f^*=\min_{x\in\mathbb{R}^n}f\left(\mathbf{x}\right)\in\mathbb{R}$. נניח שהסדרה $\left\{\mathbf{x}^k\right\}_{k\ge 0}$ חסומה. הוכיחו כי $f\left(\mathbf{x}^k\right)\to f^*$ כאשר $k\to\infty$.