אופטימיזציה - עידן אלתר, תשפ"ה

רגב יחזקאל אימרה

March 5, 2025

1 מנהלה.

מרצה: עידן אלתר.

מייל $alterdan@gmail.com.$

שעות קבלה: בתיאום מראש.

ציון:

90% מבחן (חומר סגור, מותר מחשבון + דף נוסחאות)

10% תרגילי בית (שלושה לאורך הסמסטר).

2 הקדמה.

דוגמה 2.1. בעיה: במפעל לפחיות שימורים, רוצים לייצר פחיות עם נפח מקסימלי ושטח פנים מינימלי. אני רוצה שטח פנים מינימלי, כי המתכת שאני מייצר ממנה את הפחית עולה לי כסף ואני רוצה לבזבז כמה שפחות כסף.

כדי לפתור את הבעיה אני צריך להמיר את הבעיה המילולית למודל מתמטי, תוך כדי שאני אניח הנחות על המודל שלי לאורך הדרך.

פתיחת המודל המתמטי:

הנחה ראשונה: הפחית בצורת גליל. זה לא אבסורדי כי בחיים האמיתיים פרט לקופסת סרדינים כל הפחיות שאנחנו רואים בצורת גליל.

לכן נסמן שנפח הגליל יהיה V ושטח הפנים של הגליל יסומן כתור S. אנו יודעים מהם V, S:

$$V = \pi r^2 h$$
$$S = 2\pi r^2 + 2\pi r h$$

כאשר r הוא רדיוס הבסיס של הגליל ו-h הוא גובה הגליל.

כעת אם אני רוצה למקסם את V ולמזער את S אני יכול פשוט לקחת את r להיות מספר שלילי גדול ככרצוני, לכן אנחנו נכתוב אילוצים $0 < r, h$.

הנחה שנייה: יש תקציב של A שטח פנים לפחית.

בעיית האופטימיזציה: בעצם במילים, אני רוצה למצוא את V המקסימלי עבורו שטח הפנים S קטן או שווה ל-A וכן $0 < r, h$. במתמטית:

$$\begin{aligned} P: \max_{r,h} V &= \pi r^2 h \\ \text{s.t.} S &= 2\pi r^2 + 2\pi r h \leq A \\ 0 &\leq r, h \end{aligned}$$

איך פותרים:

תשובה מהירה: חפשו בגוגל gurobi, מכניסים את הבעיה והבעיה נפתרת.

תשובה פחות מהירה: מה gurobi עושה?

כותבים בצורה נוחה יותר (נדע בהמשך) לפתרון, כלומר לומר $z = r^2$ ואז פונקציית המטרה תהיה

$$\max_{z,h} V = \pi z h$$

כלומר אנחנו רוצים למקסם פונקציה ריבועית ולזה יש לנו הרבה אלגוריתמים מוכרים.

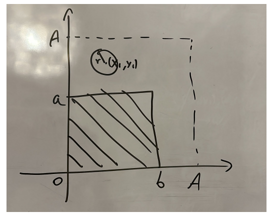
רוב הקורס יעסוק ב"בהינתן בעיית אופטימיזציה, מה האלגוריתם המתאים לפתרון שלה?".

דוגמה 2.2. (חזרה לבעית הפחיות): מצאנו r, h הממקסמים את V וממזערים את S אבל הם לא עובדים במציאות כי במפעל יש מכונה שמקבלת יריעת מתכת מגודל $A \times A$ והמכונה עוברת וחותכת את החלקים שצריך לחתוך, וכל מה שנשאר הולך לפח. זה בזבוז! יכול להיות שמצאתי את הפתרון הכי טוב אבל שאנחנו מבזבזים יותר מדי מתכת בכל יריעה מה שהופך את הפתרון שלנו ללא הפתרון הכי טוב.

איך אני אביא לידי ביטוי את הבעיה החדשה?

המודל החדש: נשים את ריבוע המתכת במערכת צירים.

הנחה ראשונה: את הגוף גוזרים החל מ-$(0,0)$ עד ל-(b,a). (אפשר להוכיח שלא מאבדים ככה פתרונות טובים בעזרת אי שוויונים וסימטריה, במבחן חשוב לנמק למה בעזרת פתרון מתמטי!). נסמן: r-רדיוס הפחית. (x_1,y_1) מרכז מכסה 1, (x_2,y_2) מרכז מכסה 2.



דוגמה 2.3. מודל מתמטי:

$$P : \max S = \pi r^2 h$$

אילוצים:

1. אסור למעגל לצאת מיריעת המתכת: $r \le x_i, y_u \le A - r$
2. צריך שהמעגלים לא יחפפו: $2r \le \|\binom{x_1}{y_1} - \binom{x_2}{y_2}\|$.
3. צריך שהמעגלים לא יחפפו עם הגוף: אם המעגל i מעל הגוף (בתוך היריעה) אזי $a + r \le y_1$.
4. צריך שהמעגלים לא יחפפו עם הגוף: אם המעגל מימין לגוף: $b + r \le x_i$.
5. נניח שמגלגלים את הגוף סביב ציר ה-y (משיקולי סימטריה לא נאבד פתרונות). לכן $b = 2\pi r$.
6. נניח שמגלגלים את הגוף סביב ציר ה-y (משיקולי סימטריה לא נאבד פתרונות). לכן $h = a$.
7. אילוצי חיוביות: $0 \le x_i, y_i, r, a$.
8. בעיה: מה עושים עם אילוצים שתקפים רק לפעמים?

טריק: נוסיף משתנים בינאריים:

$$z_i = \begin{cases} 1 & \text{מעגד } i \text{ מעל הגוף} \\ 0 & \text{מעגל } i \text{ מימין לגוף} \end{cases}$$

נכניס את z_i לאילוצים:

אילוץ (3) הופך להיות $a + r \le y_i + (1 - z_i) \cdot M$ כאשר M מספר חיובי גדול. כעת $z_i = 1$ לא קורה כלום: זה האילו. הקודם. אחרת: M יהיה מספיק גדול כדי שאי השיוויון יתקיים תמיד. מהתבוננות בבעיה נבחר $M = 1.5A$ (כי $a \le A$ וכן $r \le \frac{1}{2}A$).

מאותו היגיון אילוץ (4) יהפוך להיות $b + r \le x_i + zM$ כאשר שוב $M = 1.5A$.

הערה: כדאי לבחור M קרוב לחסם העליון שהוא יכול להיות (כלומר כדאי לבחור $M = 2A$ מאשר $M = 21000A$).

לכן הבעיה הופכת להיות:

$$\begin{aligned} P : \max_{x_i, y_i, a, b, z_i} \ & V = \pi r^2 h \\ \text{s.t.} \ & r \le x_i, y_i \le A - r \\ & 2r \le \left\| \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix} \right\| \\ & b + r \le x_i + zM \\ & a + r \le y_i + (1 - z_i) \cdot M \\ & b = 2\pi r \\ & a = h \\ & x_i, y_i, a, b \ge 0 \\ & z_i \in \{0, 1\} \end{aligned}$$

בעיה כזו נקראת בעיית אופטימיזציה עם משתנים בדידיים ורציפים עם אילוצים ריבועיים MIQCP. האלגוריתם מסובך אבל עובד טוב.

בעיות נוספות מציאותיות:

1. סודוקו.
2. איך למקסם רווח של תחנת חשמל? (כי ברגע שאני מדליק את תחנת החשמל אני לא יכול לכבות אותה בשנייה).
3. איפה למקם אתר פסולת גרעינית? (אף אחד לא רוצה אותו קרוב).

חלק I

אופטימיזציה ללא אילוצים.

נניח שנתונה לנו בעיה

$$\begin{aligned} P:\ &\min_{x\in\mathbb{R}^n} f(x):\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}\\ &\text{s.t.} x\in M\end{aligned}$$

כאשר x רציף כרגע. ככל ש-f, M פשוטות יותר, יש אלגוריתמים טובים יותר לבעיה.

דוגמה 2.4. נתונה הבעיה

$$\begin{aligned} &\min_{x\in\mathbb{R}^n} c^Tx+b\\ &\text{s.t.} Ax\le d\\ &\quad Bx=e\end{aligned}$$

כאשר $b,c,d,e\in\mathbb{R}^n$ וכן $A,B\in\mathbb{R}^{n\times n}$.

זוהי בעיית אופטימיזציה ליניארית, יש אלגורימים מעולים לפתרון כמו אלגוריתם ה-simplex של דנציג משנת 1940.

3 מורד הגרדיאנט.

נתונה בעיית אופטימיזציה

$$P:\ \max_{x\in\mathbb{R}^n}\ f(x)$$

זוהי אופטימיזציה ללא אילוצים. נניח שיש ל-f צורה פשוטה:

$$f(x)=\frac{1}{2}x^TAx+b^Tx+c$$

ל-f הזו יש 4 אפשרויות שונות לצורה:

1. קערה: קורה כאשר העקמומיות חיובית בכל כיוון, כלומר $A\succ 0$, מטריצה חיובית לחלוטין עם ע"ע חיובים.
2. קערה הפוכה: קורה כאשר העקמומיות שלילית בכל כיוון, כלומר $A\prec 0$, מטריצה שלילית לחלוטין עם ע"ע שליליים.
3. אוכף: כאשר יש ל-A ע"ע חיובים ושליליים
4. צורה מנוונת: כאשר יש ל-A ע"ע 0.

אם $A\not\succ 0$ אזי אין נקודת מינימום (אפשרויות (2) ו-(3)), ובאפשרות (4) יהיו ∞ נקודות מינימום.

נתרכז במקרים שבהם $A\succ 0$.

למה המקרה הריבועי כל כך חשוב? תשובה: מאינפי 3, אם f חלקה מספיק אזי

$$f(x)=f(x_0)+\langle\nabla f(x_0),x-x_0\rangle+\frac{1}{2}(x-x_0)^TH_f(x-x_0)+o(\|x-x_0\|^2)$$

מסקנה: אם x_0 נקודת מינימום של f (וגם $H_f(x_0)\succ 0$) אזי f דומה לקערה סביב x_0.

סימון: x^* יהיה נקודת מינימום גלובאלית.

עוד תזכורות מאינפי 3:

1. אם $x^*=\arg\min_{x\in\mathbb{R}^n} f(x)$ אזי $\nabla f(x)=0$.
2. $\nabla f(x)$ ניצב לקווי הגובה של f. פורמלית: $L_f(a)\{x\in\mathbb{R}^n|f(x)=a\}$ וכן $T_f(x)=\left\{s\in\mathbb{R}^n|s=\frac{y_k-x}{\|y_k-x\|},y_k\to x,f(y_k)=f(x)\right\}$, אזי $s\perp\nabla f(x)$ לכל $s\in T_f(x)$. משמעות: ∇f ניצב לקווי הגובה $\iff$ ∇f ניצב למשיקים לקו הגובה.
3. $\nabla f(x)$ הוא בכיוון של הגידול המהיר ביותר בערך של f, בסביבת x.
$\Leftarrow$ $-\nabla f(x)$ הואכיוון הירידה המהיר ביותר בערך f.

פורמלית: יהי $s\in\mathbb{R}^n$ ווקטור יחידה $\|s\|=1$. נגדיר $\triangle(s)=\lim_{\alpha\to 0^+}\frac{f(x+\alpha s)-f(x)}{\alpha}$ להיות הנגזרת הכיוונית בכיוון s. אזי

$$\frac{\nabla f(x)}{\|\nabla f(x)\|}=\arg\max_s\triangle(s)$$

הוכחה. של (2): נקרב את f:

$$f(x)=f(x_0)+\langle\nabla f(x_0),x-x_0\rangle+o(\|x-x_0\|)$$

כעת

$$f(y_k)=f(x)+\langle\nabla f(x),y_k-x\rangle+o(\|y_k-x\|)$$

אבל $x,y_k\in L_f(f(x))$ ולכן $f(y_k)=f(x)$ כלומר $0=\langle\nabla f(x),y_k-x\rangle+o(\|y_k-x\|)$. נחלק ב-$\|y_k-x\|$ ונקבל

$$0=\left\langle\nabla f(x),\frac{y_k-x}{\|y_k-x\|}\right\rangle+\frac{o(\|y_k-x\|)}{\|y_k-x\|}\xrightarrow[k\to\infty]{}0=\langle\nabla f(x),s\rangle$$

כנדרש. ■

הוכחה. של (3):

$$f(x+\alpha s)=f(x)+\langle\nabla f(x),\alpha s\rangle+o(\|\alpha\|)$$

נעשה אלגברה ונקבל

$$\triangle(s)=\lim_{\alpha\to0^+}\frac{\langle\nabla f(x),\alpha s\rangle+o(\|\alpha\|)}{\alpha}=\langle\nabla f(x),s\rangle$$

ולפי אי שוויון קושי שוורץ

$$-\|\nabla f(x)\|\cdot\|s\|\le\langle\nabla f(x),s\rangle\le\|\nabla f(x)\|\cdot\|s\|$$

וכיוון ש-s הוא וקטור יחידה נקבל

$$-\|\nabla f(x)\|\le\langle\nabla f(x),s\rangle\le\|\nabla f(x)\|$$

והמקסימום מתקבל עבור $s=\frac{\nabla f(x)}{\|\nabla f(x)\|}$ והמינימום מתקבל עבור $s=-\frac{\nabla f(x)}{\|\nabla f(x)\|}$. ■

תזכורת אחרונה מאינפי 3:

מבחן הנגזרת השנייה:

1. אם $x^*=\arg\min f$ אזי $\nabla f(x^*)=0$ וגם $H_f(x^*)\succeq0$ (ע"ע אי שליליים).
2. אם $\nabla f(x^*)=0$ וגם $H_f(x^*)\succ0$ אזי $x^*=\arg\min f$.

בחזרה לאופטימיזציה: יש לנו בעיית

$$\min f(x)=\frac{1}{2}x^TAx+b^Tx+c$$

אזי

$$\nabla f(x)=\frac{1}{2}A^Tx+\frac{1}{2}Ax+b$$

נניח כי $A^T=A$ (לא אבסורד כי f הולכת לקרב פונקציה אחרת בהמשך ו-A הולכת להיות H_f בערך ועבור f מספיק חלקה $H_f=H_f^T$).

לפיכך:

$$\nabla f(x)=Ax+b$$

אם $A\succ0$ אזי היא הפיכה (כי אין לה ע"ע 0) ולכן $x^*=-A^{-1}b$ הפתרון היחיד של $\nabla f(x)=0$ וזה חייב להיות מינימום לפי מבחן הנגזרת השנייה.

מצאנו x^*, למה צריך אלגוריתם?

במציאות, לחשב A^{-1} זה מאוד יקר, וכדי למצוא $-A^{-1}b$ אני פותר את בעיית האופטימיזציה.

אלגוריתם 3.1. מורד הגרדיאנט:

1. בוחרים נקודת התחלה x_0.
2. מחשבים את $\nabla f(x_0)$.
3. בוחרים "גודל צעד" $0<\alpha$.
4. מחשבים $x_{k+1}=x_k-\alpha\nabla f(x_k)$.

נסמן בהמשך: $x=x_k$ המיקום הנוכחי, $x^+=x_{k+1}$ המיקום הבא בתור.

"גודל צעד": נשים ♡ כי $\|x-x^+\|=\|\alpha\nabla f(x)\|=\alpha\underbrace{\|\nabla f(x)\|}_{\text{רוב הזמן לא 1}}$. גודל הצעד הוא כפולה של α ולא α עצמו, אבל בכל זאת קוראים ל-α גודל הצעד, כי ככה.

3.1 חיפוש קו- line search.

כדי למצוא את α אנחנו מחפשים את המינימום של f על הקרן בכיוון $-\nabla f(x)$, כלומר נפתור

$$\min_{\alpha\geq 0} f(x-\alpha\nabla f(x))$$

יתרון: במקום אופטימיזציה במרחב $\mathbb{R}^n$ עושים ב-$\mathbb{R}$ (קל).

חיסרון: עבור f כללית זה בדר"כ עדיין קשה/ יקר (כי צריך לפתור את הבעיה בכל איטרציה של מורד הגרדיאנט).

נניח לרגע כי

$$f(x)=x^TAx+bx+c, x\in\mathbb{R}^n$$

אפשר לפתור את line search במדויק:

נגזור:

$$\frac{\partial}{\partial\alpha}f(x-\alpha\nabla f(x))=\langle\nabla f(x-\alpha\nabla f(x)),-\nabla f(x)\rangle$$

אבל

$$\nabla f(x)=Ax+b$$

ולכן

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial\alpha}f(x-\alpha\nabla f(x))&=-\langle Ax-\alpha A\nabla f(x)+b,\nabla f(x)\rangle\\&=-\langle\nabla f(x)-\alpha A\nabla f(x),\nabla f(x)\rangle\\&=-\|\nabla f(x)\|^2+\alpha\langle A\nabla f(x),\nabla f(x)\rangle\end{aligned}$$

נשווה ל-0: נקבל כי

$$\alpha^*=\frac{\|\nabla f(x)\|^2}{\langle A\nabla f(x),f(x)\rangle}$$

כעת מצאתי כי α^* נקודה קריטית. האם היא מינימום? נלך למבחן הנגזרת השנייה

$$\frac{\partial^2}{\partial^2\alpha}f(x-\alpha\nabla f(x))=\frac{\partial}{\partial\alpha}\left(-\|\nabla f(x)\|^2+\alpha\langle A\nabla f(x),\nabla f(x)\rangle\right)=\underbrace{\langle A\nabla f(x),f(x)\rangle}_{\text{קבוע}}$$

זה בהכרח חיובי כאשר $A\succ 0$ וכן $\nabla f(x)\neq 0$, כלומר α^* מינימום (גלובלי).

לפיכך, עבור f ריבועית:

$$\begin{aligned}x^+&=x-\alpha^*\nabla f(x)\\\alpha^*&=\frac{\|\nabla f(x)\|^2}{\langle A\nabla f(x),f(x)\rangle}\end{aligned}$$

שאלות:

1. מתי עוצרים?
   כמה איטרציות צריך בשביל להגיע לפתרון טוב מספיק?
   נוכיח בהמשך: $x_k\to x^*=\arg\min f$ תחת הנחות.
   כמה מהר זה קורה?
2. איך בוחרים את α?
   α קטן $\Leftarrow$ לא נתקדם הרבה $\Leftarrow$ התכנסות איטית.
   α גדול $\Leftarrow$ אולי x_k מתבדר

תשובות (נתרכז במקרה הפרטי הנ"ל $f(x)=x^TAx+bx+c$):

1. נניח ובמזל יצא שx_0 נבחר כך ש-$\nabla f(x_0)$ הוא ו"ע של A.
   אזי:

$$\alpha^*=\frac{\|\nabla f(x_0)\|^2}{\langle A\nabla f(x_0),f(x_0)\rangle}=\frac{1}{\lambda}\frac{\|\nabla f(x_0)\|^2}{\|\nabla f(x_0)\|^2}=\frac{1}{\lambda}$$

ולכן

$$x^+=x-\frac{1}{\lambda}\nabla f(x)$$

באיטרציה הבאה:

$$\begin{aligned}\nabla f(x^+) &= Ax^+ + b\\ &= Ax - \frac{1}{\lambda}A\nabla f(x) + b\\ &= Ax - \frac{1}{\lambda}\cdot\lambda\nabla f(x) + b\\ &= Ax + b - \nabla f(x)\\ &= \nabla f(x) - \nabla f(x)\\ &= 0\end{aligned}$$

כלומר מצאתי נקודה קריטית! אבל f ריבועית לכן הנקודה הקריטית היחידה היא המינימום שאנחנו רוצים! לכן מצאנו כי

$$\arg\min f = x^+$$

טענה:

$$f(x^+) - f(x^*) \le \left(\frac{k-1}{k+1}\right)^2 (f(x) - f(x^*))$$

כאשר

$$x^* = \arg\min_{x\in\mathbb{R}^n} f$$

$$k = \text{cond}(A) = \frac{\lambda_{max}}{\lambda_{min}}$$

הוכחה: נוכיח

$$f(x^+) - f(x^*) \le \frac{k-1}{k}(f(x) - f(x^*))$$

טענות עזר (נזכור כי $f(x) = x^TAx + bx + c$):

1) f זהה לקירוב טיילור שלה:

$$f(y) = f(x) + \langle\nabla f(x), y-x\rangle + \frac{1}{2}\langle H_f(x)(y-x), y-x\rangle$$

הוכחה: נציב

$$\begin{aligned}\nabla f(x) &= Ax + b\\ H_f(x) &= A\end{aligned}$$

ונפשט.

2) לכל $s\in\mathbb{R}^n$:

$$\lambda_{\min}\cdot\|s\|^2 \le \langle As, s\rangle \le \lambda_{\max}\|s\|^2$$

הערה 1: ב-$\mathbb{R}^2$ זה משפט העקמומיות של אוילר: האמצע זה העקמומיות בכיוון של הגרף של f. הצדדים: ערכי העקמומיויות הראשיים.

הערה 2: עם משפט דומה, ז'ורדן הוכיח שקיימת ל-A פירוק SVD.

הוכחת $\lambda_{\min}\cdot\|s\|^2 \le \langle As, s\rangle \le \lambda_{\max}\|s\|^2$:

A סימטרית ולכן לכסינה אורתוגונלית כלומר קיים בסיס אורתונורמלי של ו"ע $\{v_1, ..., v_n\}$. נסתכל על s בקואורדינטות הבסיס:

$$s = \sum_{i=1}^n \beta_i v_i$$

לכן:

$$\begin{aligned}\langle As, s\rangle &= \left\langle A\sum_{i=1}^n \beta_i v_i, \sum_{j=1}^n \beta_j v_j\right\rangle\\ &= \sum_{i=1}^n\sum_{j=1}^n \beta_i\beta_j\langle Av_i, v_j\rangle\\ &= \sum_{i=1}^n\sum_{j=1}^n \beta_i\beta_j\langle \lambda_i v_i, v_j\rangle\\ &= \sum_{i=1}^n\sum_{j=1}^n \lambda_i\beta_i\beta_j\langle v_i, v_j\rangle\\ &= \sum_{i=1}^n \lambda_i\beta_i^2\end{aligned}$$

אבל
$$\lambda_{\min}\|s\|^2=\lambda_{\min}\sum_{i=1}^n\beta_i^2\le\langle As,s\rangle=\sum_{i=1}^n\lambda_i\beta_i^2\le\lambda_{\max}\sum_{i=1}^n\beta_i^2=\lambda_{\max}\|s\|^2$$
טענה 3: f כלואה בין 2 קערות סימטריות.
הוכחה: נסמן

$$f_\downarrow(y)=f(x)+\langle\nabla f(x),y-x\rangle+\frac{\lambda_{\min}}{2}\|y-x\|^2$$
$$f_\uparrow(y)=f(x)+\langle\nabla f(x),y-x\rangle+\frac{\lambda_{\max}}{2}\|y-x\|^2$$

ונוכיח

$$f_\downarrow(y)\le f(y)\le f_\uparrow(y)$$

ההוכחה פשוטה: נציב את טענה(2) בטענה (1):

$$f(y)=f(x)+\langle\nabla f(x),y-x\rangle+\frac{1}{2}\left\langle A(\underbrace{y-x}_{s}),\underbrace{y-x}_{s}\right\rangle\le f(x)++\langle\nabla f(x),y-x\rangle+\frac{1}{2}\lambda_{max}\cdot\|y-x\|^2=f_\uparrow(y)$$

והכיוון השני דומה.
טענה 4:

$$f(x^*)\ge f(x)-\frac{1}{2\lambda_{\min}}\|\nabla f(x)\|^2$$

משמעות: אם $\|\nabla f(x)\|$ קטן, הנקודה x כמעט אופטימלית.
הוכחה: מסתכללים על החסם התחתון $f_\downarrow(y)$ ושואלים איפה מתקבל מינימום?
$f_\downarrow(y)=y^T\begin{pmatrix}\lambda_{min}&0&0\\0&\ddots&0\\0&0&\lambda_{min}\end{pmatrix}y+\underbrace{\cdots}_{\text{לינארי ב-}y}$ פונקציה ריבועית של y עם מטריצה חיובית לחלוטין, כלומר יש ל-$f_\downarrow(y)$ נק' מינימום יחידה. נמצא אותה על ידי

$$\nabla_y f_\downarrow(y)=0$$

ומקבלים

$$y^*=\arg\min_{y\in\mathbb{R}^n}f_\downarrow(y)=x-\frac{1}{\lambda_{min}}\nabla_x f(x)$$

וכן

$$\begin{aligned}f_\downarrow(y^*)&=f(x)+\langle\nabla f(x),y^*-x\rangle+\frac{\lambda_{\min}}{2}\|y^*-x\|^2\\&=f(x)+\left\langle\nabla f(x),-\frac{1}{\lambda_{\min}}\nabla f(x)\right\rangle+\frac{\lambda_{\min}}{2}\|\frac{1}{\lambda_{\min}}\nabla f(x)\|^2\\&=f(x)-\frac{1}{\lambda_{\min}}\|\nabla f(x)\|^2+\frac{\lambda_{\min}}{2}\|\frac{1}{\lambda_{\min}}\nabla f(x)\|^2\\&f(x)-\frac{1}{2\lambda_{\min}}\|\nabla f(x)\|^2\end{aligned}$$

אבל

$$f_\downarrow(y)\le f(y)$$

וזה נכון גם ל-x אופטימלי $y=x^*$.
כלומר

$$f(x)-\frac{1}{2\lambda_{\min}}\|\nabla f(x)\|^2\le f(y)$$

ועכשיו אנחנו יכולים להוכיח את קצב ההתכנסות של מורד הגרדיאנט: נוכיח

$$f(x^+)-f(x^*)\le\frac{k-1}{k}\left(f(x)-f(x^*)\right)$$

תזכורת:

$$\begin{aligned}x^*&=\arg\min f\\x^+&=x-\alpha\nabla f(x)\\\alpha&=\frac{\|\nabla f(x_0)\|^2}{\langle A\nabla f(x_0),f(x_0)\rangle}\end{aligned}$$

נגדיר:
$$x_t = x - t\nabla f(x)$$
לפי טענת עזר (3) כשמציבים בטענת עזר (4) $y = x_t$:
$$(*) f(x_t) \le f_{\uparrow}(x_t)$$
וכן
$$\begin{aligned} f_{\uparrow}(x_t) &= f(x) + \langle \nabla f(x), x_t - x\rangle + \frac{\lambda_{\max}}{2}\|x_t - x\|^2 \\ &= f(x) - t\|\nabla f(x)\|^2 + \frac{\lambda_{\max}}{2}t^2\|\nabla f(x)\|^2 \end{aligned}$$
ולפי (*) נקבל
$$(**)\ f(x^+) = \min_{t\ge 0} f(x_t) \le \min_{t\ge 0} f_{\uparrow}(x_t)$$
נחפש:
$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f_{\uparrow}(x_t) &= 0 \\ -\|\nabla f(x)\|^2 + \lambda_{\max} t\|\nabla f(x)\|^2 &= 0 \\ t &= \frac{1}{\lambda_{\max}} \end{aligned}$$
וזה בהכרח מינימום כי פרבולה מחייכת, לכן
$$(***)\ f(x^+) \le f_{\uparrow}(x_{t=\frac{1}{\lambda_{\max}}}) = f(x) - \frac{1}{\lambda_{\max}}\|\nabla f(x)\|^2 + \frac{\lambda_{\max}}{2}\cdot\frac{1}{\lambda_{\max}^2}\|\nabla f(x)\|^2 = f(x) - \frac{1}{2\lambda_{\max}}\|\nabla f(x)\|^2$$
מ(4) נקבל חסם ל-$\|\nabla f(x)\|^2$:
$$f(x) - \frac{1}{2\lambda_{min}}\|\nabla f(x)\|^2 \le f(x^*)$$
כלומר
$$f(x) - f(x^*) \le \frac{1}{2\lambda_{min}}\|\nabla f(x)\|^2$$
ולפי $(***)$ נקבל
ונמשיך שבוע הבא :)
הערות:
א) ככל ש-k גדול יותר, החסם גרוע יותר.
ב) עוד איטרציה אחת משפרת את $\triangle x$ פי כמה? אם מודדים את המרחק בערך f: פי $\left(\frac{k-1}{k+1}\right)^2$. לזה קוראים התכנסות ליניארית (קצב ליניארי), הכי איטי שיש בשימוש.
מתי מתקיים $\left(\frac{k-1}{k+1}\right)^2 = 0$? כאשר $k = 1$ כלומר $\lambda_{max} = \lambda_{min}$ אבל מכך זה אומר שיש ל-A רק ע"ע יחיד כלומר כל $\mathbb{R}^n$ הוא מרחב עצמי של λ, אבל זה נכון כי $A^T = A$ ולכן A לכסינה אורתוגונלית, ואז $\nabla f(x)$ ו"ע של A לכל x. במקרה זה אם $f(x^+) - f(x^*) \le 0$ כלומר $f(x^+) \le f(x^*)$ ולכן $x^+ = \arg\min f$
כאשר $k >> 1$ ענק: החסם אומר שאנחנו בקושי מתקדמים בכל איטרציה, כלומר $\lambda_{max} >> \lambda_{min}$ ולכן אנחנו לא מתכנסים לערך מינימלי.

4 אלגוריתם Backtracking.

אנחנו מחפשים $\min\ f(x)$ במורד הגרדיאנט עבור f כללית, לא ריבועית.
הבעיה: לחשב $\alpha = \arg\min_{t\ge 0} f(x - t\nabla f)$ זה מאוד יקר/ בלתי אפשרי בכלל.

אלגוריתם 4.1. אלגוריתם Armijo.
קלט: $x, \nabla f(x), f(x)$.
פלט: גודל צעד α עבור דעיכת גרדיאנט $x^+ = x - \alpha\nabla f$.
אתחול: $\alpha = 1$ (שרירותי לגמרי).
בלולאת while:
כל עוד $f(x - \alpha\nabla f) > f(x) - \alpha\cdot\sigma\cdot\|\nabla f\|^2$, נעשה $\alpha = \rho\cdot\alpha$ (מקטינים את α).

ρ, σ הם פרמטרים שאנחנו בוחרים, מקובל לבחור $\rho = 0.5, \sigma \in (0.01, 0.2)$.

מה משמעות התנאי? בעזרת קירוב טיילור נקבל

$$\begin{aligned} f(x - \alpha\nabla f) &\approx f(x) - \alpha \langle \nabla f, \nabla f \rangle \\ &\approx \underbrace{f(x) - \alpha \|\nabla f\|^2}_{f\text{ המשיק ל-}} \end{aligned}$$

בעצם המשיק (שמתקבל מקירוב טיילור) הוא הישר הכי קרוב ל-f בסביבת x, כלומר עבור α מספיק קטן אנחנו נרד במורד f אל עבר המינימום (המקומי), ואז מתישהו האלגוריתם יעצור. בשביל שזה יקרה צריך שהשיפוע של המשיק לא ישתנה מהר מדי.

בנוסף אפשר להוכיח שמורד הגרדיאנט עבור f עם H_f חסום מתכנס ליניארית.

5 אפשר מהר יותר?

אם f ריבועית, כלומר $f(x) = x^T Ax + bx + c$ אזי קווי הגובה הם אליפסואידים או היפר ספירות. אם קווי הגובה הם היפר ספירות, אזי GD מתכנס באיטרציה אחת!

מכאן נקבל את הרעיון שאם אנחנו "נמחץ" את האליפסואידים לכדי ספירות, נמצא את המינימום/ מקסימום ונחזור לקואורדינטות המקוריות שלנו, אזי האלגוריתם שלנו יעבור יותר טוב.

נחליף קואורדינטות:

$$\begin{aligned} x &\to z \\ f(x) &\to f(z) \\ z &= Q \cdot x \\ f(z) &= f(Qx) \end{aligned}$$

כלומר במעבר ל-z נמחץ צירים ארוכים ונמתח צירים קצרים כך שהערכים העצמיים של A יהיו שווים אחד לשני.

מה צריך: צריך למצוא את הצירים של האליפסואידים, כלומר הוקטורים העצמיים $v_1, \ldots, v_n$ של A ולמתוח/ לכווץ בהתאם לערך העצמי המתאים.

נחשב:

$$f(x) = x^T Ax$$

כאשר A סימטרית חיובית לחלוטין, לכן A לכסינה אורתוגונלית:

$$P^T AP = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix} = \Lambda$$

וכן

$$P = \begin{pmatrix} | & & | \\ v_1 & \cdots & v_n \\ | & & | \end{pmatrix}$$

עבור v_i וקטור עצמי המתאים לערך עצמי λ_i. לכן $A = P\Lambda P^T$. נציב את A ב-f:

$$\begin{aligned} f(x) = x^T Ax &= \underbrace{x^T P}_{y^T} \Lambda \underbrace{P^T x}_{y} = y^T \Lambda y \\ &= y^T \begin{pmatrix} \left(\sqrt{\lambda_1}\right)^2 & & \\ & \ddots & \\ & & \left(\sqrt{\lambda_n}\right)^2 \end{pmatrix} y \\ &= \underbrace{y^T \begin{pmatrix} \sqrt{\lambda_1} & & \\ & \ddots & \\ & & \sqrt{\lambda_n} \end{pmatrix}}_{\sqrt{\Lambda}\text{ נסמן ב-}} \underbrace{\begin{pmatrix} \sqrt{\lambda_1} & & \\ & \ddots & \\ & & \sqrt{\lambda_n} \end{pmatrix} y}_{z := \left(\sqrt{\lambda_1} y_1, \ldots, \sqrt{\lambda_n} y_n\right)} \\ &= z^T \cdot I \cdot z \\ &= \tilde{f}(z) \end{aligned}$$

כלומר החלפנו קואורדינטות $z = \sqrt{\Lambda} P^T x$. עכשיו על $\tilde{f}(z)$ נפעיל GD.

אלגוריתם 5.1. מורד הגרדיאנט המשופר:
1. נגדיר $z=\sqrt{\Lambda}P^Tx$.
2. נחשב $\tilde{f}(z)=z^T\cdot I\cdot z$.
3. נפעיל GD על $\tilde{f}(z)$.
(א) בחרו z_0 כלשהו.
(ב) $z^+=z_0-\alpha\nabla_z\tilde{f}(z_0)$ וכן $\alpha=\frac{\|\nabla f\|^2}{\langle A\nabla f,\nabla f\rangle}\underset{A=I}{=}1$. בגלל שיש ל-$I$ ע"ע יחיד $\lambda=1$ נקבל כי $z^+=\arg\min\tilde{f}(z)$.
4. $f(x)=\cdots=\tilde{f}(z)$ וכן נגדיר $z^+=\sqrt{\Lambda}P^Tx^+$ כלומר $x^+=P\Lambda^{-\frac{1}{2}}z^+$.

נקבל $f(x^+)=\cdots\tilde{f}(z^+)$ כלומר $x^+=\arg\min f$

נתרגם את האלגוריתם לאלגוריתם שעובד עם x בלבד:

תחילה אני רוצה להביע את $\nabla_z\tilde{f}(z)$ כתור פונקציה של x:

$$\begin{aligned}\nabla_z\tilde{f}(z)&=\nabla_zf\left(\sqrt{\Lambda}P^Tx\right)\\&=\nabla_zf\left(\sqrt{\Lambda}P^Tx\right)\\&\vdots\\&=\Lambda^{-\frac{1}{2}}P^T\nabla_xf(x)\end{aligned}$$

נתרגם את האלגוריתם ל-x:
1. בחרו x_0 (על ידי $z_0=\sqrt{\Lambda}P^Tx_0$).
2. חשבו $\nabla_xf(x_0)$ (על ידי $\nabla_z\tilde{f}(z)=\Lambda^{-\frac{1}{2}}P^T\nabla_xf(x)$).
3. חשבו x^+:

$$\begin{aligned}x^+&=P\Lambda^{-\frac{1}{2}}z^+\\&=P\Lambda^{-\frac{1}{2}}\left(z_0-\nabla_z\tilde{f}(z)\right)\\&=P\Lambda^{-\frac{1}{2}}\left(\sqrt{\Lambda}P^Tx_0-\Lambda^{-\frac{1}{2}}P^T\nabla_xf(x)\right)\\&=I\cdot x_0-P\Lambda^{-1}P^T\nabla_xf(x)\\&=x_0-A^{-1}\nabla_xf(x_0)\end{aligned}$$

כעת מה אם f פונקציה כללית כלשהי? מי מחליפה את A שבשלב 3?

הקירוב הריבועי ל-f:

$$f(y)\approx f(x)=\langle\nabla f(x),y-x\rangle+\frac{1}{2}(y-x)^TH_f(x)(y-x)$$

כלומר במקום A נבחר את H_f.

אלגוריתם 5.2. שיטת ניוטון:
1. בחר x_0.
2. חשבו $x^+=x-H_f^{-1}(x)\nabla f(x)$.
3. חזרו ל-2 איטרטיבית עד להתכנסות.

קשר לשיטת ניוטון רפסון? זו הכללה של השיטה, שם אנחנו פותרים משוואה אחת $g(x)=0$ ובשיטת ניוטון אנחנו פותרים מערכת $\nabla f(x)=0$.

תנאי עצירה:
1. נגמר התקציב.
2. $\|\nabla f\|$ נהיה קטן.
3. $\triangle f(x)$ קטן מאוד.

טענה 5.3. אם $g:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ עם גרדיאנט ∇g ליפשיצי (קיים $L>0$ כך ש-$\|\nabla g(x)-g(y)\|\leq L\|x-y\|$) אזי

$$|g(y)-g(x)-\langle\nabla g(x),y-x\rangle|\leq\frac{L}{2}\|y-x\|^2$$

הוכחה. נגדיר $h:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ על ידי $h(t)=E(x+t(y-x))$ כאשר $E(y)$ זה השגיאה בקירוב טיילור ממעלה 1, ידוע $o(\|y-x\|)$. לפיכך

$$\begin{aligned}h'&=\frac{\partial}{\partial t}\left(g(x-t(y-x)-g(x)-\langle\nabla g(x),x+t(y-x)-x\rangle\right)\\&=\frac{\partial}{\partial t}\left(g(x+t(y-x)-t\left\langle\nabla g(x),y-x\right\rangle\right)\\&=\langle\nabla g(x+t(y-x)-\nabla g(x),y-x\rangle\end{aligned}$$

נשים ♡: $h(0) = 0$ וכן $h(1) = E(y)$.

לפיכך:

$$E(y) = h(1) - h(0) = \int_0^1 h'(t)dt$$

כלומר

$$\begin{aligned}
|E(y)| = \left|\int_0^1 h'(t)dt\right| &\leq \int_0^1 |h'(t)|\, dt \leq \int_0^1 |\langle \nabla g(x - t(y-x) - \nabla g(x), y - x\rangle|\, dt \\
&\leq \int_0^1 \|\nabla g(x + t(y-x)) - \nabla g(x)\| \|y - x\| dt \\
&\leq \int_0^1 L\|x + t(y-x) - x\| \cdot \|y - x\| dt \\
&= \int_0^1 L\|y - x\|^2 t dt \\
&= \frac{L}{2}\|y - x\|^2
\end{aligned}$$

כנדרש. ■

טענה 5.4. נתונה $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ כך ש-H_f ליפשיצית עם קבוע $L > 0$. אזי $\nabla \frac{\partial f}{\partial x_i}$ ליפשיצי עם אותו קבוע.

הוכחה. ניזכר כי $(H_f)_{ij} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}$ וכן הוא סימטרי וגם $\nabla \frac{\partial f}{\partial x_i} = H_f \cdot e_i$. לפיכך:

$$\|\nabla \frac{\partial f}{\partial x_i}(y) - \nabla \frac{\partial f}{\partial x_i}(x)\| = \| \left(H_f(y) - H_f(x)\right) \cdot e_i\| \leq \|H_f(y) - H_f(x)\| \cdot \|e_i\| \leq L\|x - y\|$$

כנדרש. ■

טענה 5.5. נתונה $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ וכן H_f ליפשיצי עם $L > 0$. אזי

$$\|\nabla f(y) - \left(\nabla f(x) + H_f(x)(y - x)\right)\| \leq \sqrt{n} \cdot \frac{L}{2}\|x - y\|^2$$

הוכחה. שוב נסמן $E(y) = \nabla f(y) - (\nabla f(x) + H_f(x)(y - x))$. נסתכל על הקואורדינטה ה-i של E:

$$\begin{aligned}
E_i(y) &= \|\frac{\partial f}{\partial x_i}(y) - \frac{\partial f}{\partial x_i}(x) - H_{f_i}(x)(y - x)\| \\
&= \|\frac{\partial f}{\partial x_i}(y) - \frac{\partial f}{\partial x_i}(x) - \nabla \frac{\partial f}{\partial x_i}(x)^T(y - x)\|
\end{aligned}$$

לפי טענה (2) אני יודע כי $\nabla \frac{\partial f}{\partial x_i}$ ליפשיצי עם L. לפי טענה (1) נקבל $|E_i(y)| \leq \frac{L}{2}\|y - x\|^2$ ומכאן

$$\begin{aligned}
\|E(y)\|_2 &= \sqrt{\sum_{i=1}^n |E_i(y)|^2} \\
&\leq \sqrt{\sum_{i=1}^n \frac{L}{2}\|y - x\|^2} \\
&= \sqrt{n}\frac{L}{2}\|y - x\|^2
\end{aligned}$$

כנדרש. ■

טענה 5.6. תהי $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ גזירה לפחות פעמיים ברציפות וכן H_f ליפשיצי (קיים $L > 0$ כך ש-$\|H_f(x) - H_f(y)\| \leq L\|x - y\|$). נניח שנתון x_0 מספיק קרוב ל-x^* נקודת מינימום מקומי לא מנוונת (כלומר $H_f(x) \succ 0$), אזי שיטת ניוטון מתכנסת ל-x^* בסדר התכנסות ריבועי.

הוכחה. אפשר לחסום את השגיאה בקירוב מטיילור בעזרת קבוע ליפשיץ L.

נוכיח כי בשיטת ניוטון $\|x^+ - x^*\| \leq C \cdot \|x - x^*\|$.

אכן,

$$\begin{aligned}
\|x^+ - x^*\| &= \|x - H_f^{-1}(x) \underbrace{\nabla f(x)}_{\substack{\text{נכתוב עם} \\ \text{פיתוח טיילור} \\ \text{סביב } x^*}} - x^*\| \\
&= \|x - x^* - H_f^{-1}(x) \left(\nabla f(x^*) + H_f(x) \cdot (x - x^*) + E\right) \| \\
&= \|x - x^* - H_f^{-1}(x) \left(H_f(x^*)(x - x^*) + E\right) \|
\end{aligned}$$

כעת אני רוצה לומר כי $H_f^{-1}(x)$ היא כמעט ההופכית של $H_f(x)$ ואז הייתי נשאר עם

$$\begin{aligned}
\|x^+ - x^*\| &= \|H_f^{-1}(x) \cdot E\| \\
&\leq \underbrace{\|H_f^{-1}(x)\|}_{:=C} \cdot \underbrace{\|E\|}_{\Omega(\|x-x^*\|^2)}
\end{aligned}$$

ואז כביכול סיימתי. אי אפשר לעשות את זה כי $H_f^{-1}(x^*)$ היא לא באמת ההופכית של $H_f(x)$.

לכן אני נשאר עם

$$\begin{aligned}
\|x^+ - x^*\| &= \|x - x^* - H_f^{-1}(x) \left(H_f(x^*)(x - x^*) + E\right) \| \\
&= \|H_f^{-1}(x) \left(H_f(x)(x - x^*) - H_f(x^*)(x - x^*) - E\right) \| \\
&\leq \|H_f^{-1}(x)\| \|H_f(x)(x - x^*) - H_f(x^*)(x - x^*) - E\| \\
&\leq \|H_f^{-1}(x)\| \left(\|(H_f(x) - H_f(x^*))(x - x^*)\| + \|E\|\right) \\
&\leq \|H_f^{-1}(x)\| \left(L \cdot \|x - x^*\| \cdot \|x - x^*\| + \frac{\sqrt{n}}{2}\|x - x^*\|^2\right)
\end{aligned}$$

כעת x מספיק קרוב ל-x^* ומרציפות $\|H_f^{-1}(x)\|$ ערך זה כלוא בסביבת $\|H_f^{-1}(x^*)\|$ ובפרט חסום, כלומר קיבלנו

$$\begin{aligned}
\|x^+ - x^*\| &\leq \|H_f^{-1}(x)\| \left(L \cdot \|x - x^*\| \cdot \|x - x^*\| + \frac{\sqrt{n}}{2}\|x - x^*\|^2\right) \\
&\leq C \cdot \|x - x^*\|^2
\end{aligned}$$

השאלה היחידה שעולה היא האם $H_f^{-1}(x^*)$ תמיד קיים? התשובה היא כן כי דרשנו $H_f(x^*) \succ 0$.

כלומר הוכחנו את הטענה. ■

הערה 5.7. הערות:

1. אפשר להקטין את C (לא חשוב כי זה התכנסות ריבועית).
2. x^* יכולה להיות כח נקודה קריטית (השתמשנו בזה כשאמרנו $\nabla f(x^*) = 0$, אך זה נכון לא רק עבור נקודת מינימום אלא עבור כל נקודה קריטית). עדיין צריך לבדוק ש-x^* מינימום לאחר שהפעלתי את האלגוריתם.
3. אפשר להוכיח: אם האיטרציות שלי מתכנסות, $x \to x^*$ אז בהכרח x^* נקודה קריטית.
4. במציאות, שיטת ניוטון יקרה מדי.

5.1 שיטת קוואזי ניוטון.

הרעיון: לא מחשבים $H_f^{-1}(x)$ אלא קירוב שלו, מעיין אנלוגיה לדימיון בין שיטת ניוטון ושיטת המיתר.

למשוואה קוראים תנאי קוואזי ניוטון והיא

$$\nabla f(x^+) - \nabla f(x) = A(x^+ - x)$$

כאשר אני רוצה למצוא מטריצה A שתהפוך את הנ"ל לנכון, כי בד"כ $x, \nabla f(x)$ נתונים.

בעיה: ב-A יש n^2 נעלמים. נדרוש סימטריה $A = A^T$ כלומר יש לנו $\frac{n^2+n}{2}$ נעלמים, בעוד שיש לי רק n משוואות.

הפתרון הוא שיש ∞ מטריצות A הפותרות את תנאי קוואזי ניוטון עבור $n > 1$. לכן המשתמש יבחר את המטריצה A לפי שיקול דעתו.

אלגוריתם 5.8. אלגוריתם קוואזי ניוטון:

קלט: $x, f, \nabla f(x)$ וכן A שהיא קירוב ל-$H_f^{-1}(x)$ מהאיטרציה הקודמת).

איטרציות:

1. נחשב את כיוון הירידה $d=A^{-1}\nabla f(x)$ (כיוון הירידה).
2. נבחר גודל צעד α (למשל עם כלל Armijo).
3. נעדכן $x^{+}=x+\alpha d$.
4. חשבו את $\nabla f(x^{+})$.
5. עדכנו את A ל-A^{+} בעזרת תנאי קוואזי ניוטון: $A^{+}=F(A,x,x^{+}\nabla f(x),\nabla f(x^{+}))$ עבור F שבתקווה תהיה זולה לחישוב.
6. לזרו ל-1 עם $A^{+}.x^{+},\nabla f(x^{+})$.

נשים ♡ כי בעצם צריך את A^{-1} ולא את A ולא נרצה להפוך את A מחדש בכל איטרציה (צריך לעדכן $A^{-1}\to A^{-1^{+}}$ בצורה זולה).

הדרך הכי פופולארית לעדכן את A הינה שיטת $BFGS$:

הרעיון הוא שאנחנו יודעים כי A מקיימת את תנאי קוואזי ניוטון. נגדיר $A^{+}=A+u\cdot u^{T}+v\cdot v^{T}$ עבור $u,v\in\mathbb{R}^{n}$. יש נוסחאות ל-u,v, לא נכתוב כי אין מה להגיד עליהן.

מציבים את A^{+} בתנאיי קוואזי ניוטון ומגלים שהתנאי עדיין מתקיים.

u,v נבחרו בצורה בלתי תלוייה לינארית ולכן זה "כלל עדכון מדרגה 2" וזה זול: $O(n)$ פעולות לעדכון A.

אבל צריך A^{-1}, לשם כך יש את נוסחת שרמן מוריסון שגם זולה לחישוב אבל גם אותה לא נכתוב כי אין מה להרחיב עליה.

בעיה: צריך לשמור את A וזה מלא מלא טרה בייט זיכרון בשביל מודלים קטנים!

פתרון:

1. אפשר לשמור רק את u,v בזיכרון ואת A ההתחלתית (לרוב מנחשים $A_0=I$) ואז זה הרבה פחות זיכרון.
2. אפשר לומר
$$d=A^{-1}\nabla f(x)\approx H_{f}^{-1}(x)\nabla f(x)$$
ואפשר לחפש דרך לחפש את כיוון הירידה בעזקת כיווני הירידה הקודמים
$$d_1,...,d_n\to d_{n+1}$$
בעזרת סטטיסטיקה וכו: אוספים סטטיסטיקה על עקמומיות f: אם x_i לא משתנה הרבה זמן אז להגדיל את קצב הלמידה (גודל הצעד שלו) כלומר להוסיף עקמומיות בכיוון הזה.

חלק II

אופטימיזציה עם אילוצים.

יש לי בעיה

$$\begin{aligned}P:\min & f(x)\\ \text{s.t.} & f_i(x)<0\\ & h_j(x)=0\end{aligned}$$

כאשר הקבוצה האפשרית היא $A=\left\{x\in\mathbb{R}^{n}|\begin{array}{c}f_i(x)<0\\ h_j(x)=0\end{array}\right\}$.

אנחנו מחפשים מבחן פשוט שיגיד לנו $x^{+}=\arg\min$, משהו דומה למבחן הנגזרת הראשונה $\nabla f=0$ על הקבוצה A.

נגדיר בעיה חדשה:

$$Q:\min_{x\in\mathbb{R}^{n}}L(x)$$

ואני רוצה שהמינימום של Q יהיה המינימום של P. איך אני עושה את זה? נכניס את האילוצים לתוך $L(x)$ בדרך הזו:

$$L(x)=f(x)+\sum_{i\in I}\infty\cdot 1_{+}\left(f_i(x)\right)+\sum_{j\in J}\infty\cdot 1_{\neq 0}\left(h_j(x)\right)$$

כאשר

$$1_{+}(u)=\begin{cases}1 & u>0\\ 0 & u\leq 0\end{cases}$$

וכן

$$1_{\neq 0}(u)=\begin{cases}1 & u\neq 0\\ 0 & u=0\end{cases}$$

טענה 5.9. $\arg\min Q = \arg\min P$ כלומר לפתור את P שקל ללפתור את Q.

הוכחה. לכל $x\in A$ מתקיים $L(x)=f(x)<\infty$ ולכל $x\notin A$ מתקיים $L(x)=\infty$. לכן $\min Q$ מתקבל ב-A.
אם $x^*=\arg\min Q$ אזי $f(x^*)=L(x^*)\leq L(x)$ לכל $x\in A$ ובפרט $f(x^*)\leq f(x)$ ולכן $\arg\min P = x^*$. הכיוון ההפוך עובד באותה צורה. ■

יש אלגוריתמים טובים לאופטימיזציה ללא אילוצים- נפעיל אותם על Q.

בעיה 1: $L(x):\mathbb{R}\to\mathbb{R}\cup\{\infty\}$ ובעייתי לנו לעתעסק עם ∞.

פתרון: בתקום ∞ נרשום M מספיק גדול כך שהמינימום על L יתקבל בוודאות בתוך A. כל מקרה דורש קצת מחשבה, כמה נמוך f יכולה לרדת מחוץ ל-A (חסם תחתון)- זה יהיה M. לכן

$$L(x)=f(x)+\sum_i M\cdot 1_+(f_i(x))+\sum_j M\cdot 1_{\neq 0}(h_j(x))$$

בעיה 2: כשאני מחשב את ∇L אני צריך לגזור אינדיקטורים, וזה בעיה בשפה של התחום שלי.

פתרון: נחליף את האינדיקטורים בפונקציות גזירות. במקום $M1_+(u_i)$ נכתוב $\lambda_i u_i$ ובמקום $M1_{\neq 0}(u_j)$ נכתוב $\mu_j u_j$ (קירוב לינארי לאינדיקטור). לכן נקבל

$$L(x)=f(x)+\sum_i \lambda_i f_i(x)+\sum_j \mu_j h_j(x)$$

כאן כאשר $\lambda_i>0$ אז כאשר $f_i(x)>0$ הקנס שלי יותר גדול וכאשר $f_i(x)<0$ נקבל "פרס" על זה שאנחנו בתוך התחום שלנו.

מסקנה: לא בהכרח $\min L=\min f$.

נחפש $\min L$.

$$\inf_{x\in\mathbb{R}} L(x,\lambda,\mu)=:g(\lambda,\mu)$$

אנחנו משתמשים ב-inf ולא ב-min כי f לא בהכרח חסומה.

g נקראת הפונקציה הדואלית של f.

משפט 5.10. דואליות חלשה: אם לבעיה המקורית P יש פתרון x^* אז בהנחה ש-$\lambda_i\geq 0$ נקבל

$$g(\lambda,\mu)\leq\min_{x\in A} f(x)$$

הוכחה. אם $x^*=\arg\min P$ אז בפרט $x^*\in A$ כלומר $f_i(x^*)\leq 0, h(x^*)=0$. לכן

$$L(x^*,\lambda,\mu)=f(x^*)+\underbrace{\sum_i \lambda_i f_i(x)}_{\leq 0}+\underbrace{\sum_j \mu_j h_j(x)}_{=0}\leq f(x^*)=\min_{x\in A} f(x)$$

כלומר

$$g(\lambda,\mu)=\inf L\leq L(x^*,\lambda,\mu)\leq\min_{x\in A} f(x)$$

■

מסקנה: למצוא inf כלומר $g(\lambda,\mu)=\inf_x L$ עבור $\lambda\geq 0$ שקול ללמצוא חסם תחתון של P.

רעיון: נחפש את החסם התחתון הכי טוב. נגדיר

$$P_{LD}:\max_{\lambda,\mu} g(\lambda,\mu)$$
$$\text{s.t.}\lambda_i\geq 0$$

אם λ^*,μ^* פתרון של P_{LD} אזי

$$g(\lambda^*,\mu^*)\leq\min_{x\in A} f(x)$$

נשאל את השאלה מתי יהיה שיוויון? אני מאוד רוצה שיוויון כי כאשר יש שיוויון אז אפשר לפתור את P_{LD} במקום P.

נגדיר את הערך הדואלי V_{LD} להיות

$$V_{LD}=\max_{\lambda\geq 0} g(\lambda,\mu)$$

כלומר הפתרון של P_{LD}, ואת הערך הפרימאלי להיות

$$V_P=\min_{x\in A} f(x)$$

בעצם הוכחנו כבר $V_{LD}\leq V_P$. נגדיר את פער הדואליות להיות $0\leq V_P-V_{LD}$.

השאלה המרכזית היא מהם התנאים אין פער דואליות? מתי לפתור P_{LD} זהה ללפתור P?

למשל: ראינו בחקר ביצועים כי אם P לינארית, אין פער דואליות.

דוגמה 5.11. אם נתונה לנו הבעיה

$$
\begin{aligned}
P : \min & c^T x \\
\text{s.t.} & Ax = b \\
& x \geq 0
\end{aligned}
$$

מיהי P_{LD}?

נגדיר L:

$$L(x,\lambda,\mu) = c^T x - \lambda^T x + \mu^T (Ax - b) = (c - \lambda + A^T \mu)x - \mu^T b$$

ולכן

$$g(\lambda,\mu) = \inf(c - \lambda + A^T \mu)x - \mu^T b = \begin{cases} -\mu^T b & else \\ -\infty & c - \lambda + A^T \mu \neq 0 \end{cases}$$

לכן נבחר $\mu = (c - \lambda + A^T \mu)\mu$ ונקבל $L(x,\lambda,\mu) = \mu\|c - \lambda + A^T \mu\|^2 - \mu^T b$ ועבור $\mu \to -\infty$ ומקבלים $L \to -\infty$.

כלומר הבעיה

$$
\begin{aligned}
P_{LD} : \max & g(\lambda,\mu) \\
\text{s.t.} & \lambda_i \geq 0
\end{aligned}
$$

הופכת לבעיה

$$
\begin{aligned}
\max & -\mu^T b \\
\text{s.t.} & c - \lambda + A^T \mu \geq 0 \\
& \lambda_i \geq 0
\end{aligned}
$$

וניתן לרשום אותה כתור

$$
\begin{aligned}
\max & -\mu^T b \\
\text{s.t.} & c + A^T \mu \geq 0 \\
& \lambda_i \geq 0
\end{aligned}
$$

דוגמה 5.12. יש לנו בעיה

$$
\begin{aligned}
P : \min & f(x) = x^2 \\
\text{s.t.} & 1 - x^4 \leq 0
\end{aligned}
$$

אינטואיטיבית אני יודע שהמינימום יהיה ב-$x = \pm 1$ כי האילוץ שלי הוא $x \notin (-1,1)$. נרצה לראות האם אנחנו מקבלים את זה מהמעבר לבעיה הדואלית:

$$L(x,\lambda) = x^2 + \lambda(1 - x^4)$$

$$g(\lambda) = \inf_{x\in\mathbb{R}} L(x,\lambda) = \begin{cases} -\infty & \lambda > 0 \\ 0 & \lambda = 0 \end{cases}$$

וכן

$$\max g(\lambda) = 0 < 1 = \min f(x)$$

ואכן איבדנו משהו במעבר לבעיה הצמודה.

דוגמה 5.13. יש לנו בעיה

$$
\begin{aligned}
P : \min & f(x) = x^2 \\
\text{s.t.} & 1 - x^4 \leq 0
\end{aligned}
$$

זו אותה בעיה כמו ממקודם, רק מנוסחת אחרת.

$$L(x,\lambda) = x^2 + \lambda(1 - x^2) = (1 - \lambda)x^2 + \lambda$$

$$g(\lambda) = \inf_{x\in\mathbb{R}} L(x,\lambda) = \begin{cases} -\infty & \lambda > 1 \\ \lambda & 0 < \lambda \leq 1 \\ 0 & \lambda = 0 \end{cases}$$

נכתוב את הבעיה הדואלית:

$$P_{LD} : \max_{\lambda \geq 0} g(\lambda) = 1$$

כאשר $\lambda = 1$ ומצאנו $V_{LD} = V_P$.

חוץ מדוגמאות פשוטות, למצוא את $\inf L$ זה קשה עד בלתי אפשרי.

אם $\inf L$ מתקבל:

$$\inf_x L(x,\lambda,\mu) = \min_x L(x,\lambda,\mu)$$
$$x^* = \arg\min_x L(x,\lambda,\mu)$$

זה אומר כי x^* היא נגזרת קריטית של L (לפי מבחן הנגזרת הראשונה).

זה אומר כי $\nabla_x L(x,\lambda,\mu)$. אם L מספיק נחמד אז כל נקודה קריטית היא מינימום גלובאלי. (*)

במקרה זה, אפשר לפתור בעיה פשוטה יותר:

5.2 הדואלית של וולף.

יש לנו הפעם בעיה דואלית

$$\begin{aligned} P_{WD} : \max & L(x,\lambda,\mu) \\ \text{s.t.} & \nabla_x L(x,\lambda,\mu) \\ & \lambda_i \geq 0 \end{aligned}$$

לפי (*): אם x^* פתרון של P_{WD}:

$$\begin{aligned} \nabla_x L(x^*,\lambda^*,\mu^*) &= 0 \\ L(x^*,\lambda^*,\mu^*) &= \min_x L(x^*,\lambda^*,\mu^*) = \max_{\lambda,\mu}\min_x L(x,\lambda,\mu) \end{aligned}$$

וזה בדיוק פונקציית המטרה ב-P_{LD}.

בעיות אפשריות: אם ל-L יש נקודות קריטיות שהן מקס' מקומי אזי הן קריטיות ולכן בקבוצה האפשרית של P_{WD}, ואז

$$L(x^*,\lambda^*,\mu^*) \neq \min_x L(x^*,\lambda^*,\mu^*)$$

וזה אומר

$$P_{WD} \neq P_{LD}$$

השוואה ל-P_{LD}:

1. יותר קל לפתור את P_{WD}.
2. יש אילוצים יחסית פשוטים, יותר פשוטים מאלו של P.
3. x עדיין משתנה בבעיה: פתרון של P_{WD} הוא (x^*,λ^*,μ^*).

דוגמה 5.14 נתונה $z \in \mathbb{R}^n$. מחפשים את המרחק של z מעל מישור $\{x | a^T x - b = 0\}$.

ננסח כבעיית אופטימיזציה:

$$\begin{aligned} P : \min & \|x - z\| \\ \text{s.t.} & a^T x = b \end{aligned}$$

הבעיה היא ש-$\|\cdot\|$ לא גזירה ב-0. ננסח מחדש את הבעיה:

$$\begin{aligned} Q : \min & \|x - z\|^2 \\ \text{s.t.} & a^T x = b \end{aligned}$$

פונקציית המטרה תהיה

$$\begin{aligned} f(x) &= \langle x - z, x - z \rangle \\ &= x^T x - 2z^T x + z^T z \end{aligned}$$

ומה שאנחנו לא רואים זה ש-$x^T x = x^T I x$ כלומר f קערה.

$$L(x,\mu) = f(x) + \mu(a^T x - b)$$

אני רוצה לדעת האם L יפה.

L קמורה: כי ההסיאן של L לפי x הוא $H_{L,x} = I$, לכן יש מינימום גלובאלי יחיד.

לכן: $Q_{WD} = Q_{LD}$.

חישוב צד:

$$L(x,\mu)=x^Tx-2z^Tx+z^Tz+\mu(a^Tx-b)$$

ולכן

$$\nabla_x L=2x-2z+\mu a$$

כלומר הדואלית של וולף הינה

$$Q_{WD}:\max_{x,\mu}L(x,\mu)$$
$$\text{s.t.}\nabla_x L=2x-2z+\mu a=0$$

נחלץ את x:

$$x=z-\frac{\mu}{2}a$$

ונציב בפונקציית המטרה:

$$Q'_{WD}:\max_{\mu}L(z-\frac{\mu}{2}a)$$

שימו ♡: זו בעיית אופטימיזציה במימד אחד בלי אילוצים! היא שקולה ל-Q_{WD}.

נסמן

$$g:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$$
$$g(\mu)=L(z-\frac{\mu}{2}a)$$

נחשב

$$g'(\mu)=0$$

ונקבל

$$\mu^*=z\cdot\frac{a^Tz-b}{a^Ta}$$

מחשבים $g''(\mu^*)$ ונקבלים

$$g^{''}(\mu^*)=-\frac{a^Ta}{2}<0$$

כלומר μ^* היא מקסימום גלובאלי.

נחשב $x^*=z-\frac{\mu^*}{2}a$ ולכן

$$V_{WD}=L(x^*,\mu^*)=\left(\frac{|a^Tz-b|}{\|a\|}\right)^2$$

מצאנו חסם תחתון ל-V_D, זה הקירוב למרחק של z מ-$a^Tx=b$. אולי מתקיים $V_{LD}=V_P$? (כן, אבל איך יודעים?).

למה 5.15. למת KKT:

אם (*) מתקיים $(P_{WD}=P_{LD})$ ונתונה (x^*,λ^*,μ^*) כך ש:

1. x^* אפשרית ב-P (מקיימת את האילוצים, $x^*\in M$).
2. (x^*,λ^*,μ^*) אפשרית ב-P_{WD}.
3. $f(x^*)=L(x^*,\lambda^*,\mu^*)$.

אזי x^* פתרון של P.

הוכחה. צריך להוכיח:

$$f(x^*)=\min f(x)$$
$$\text{s.t.}x\in M$$

ידוע: $x^*\in M$ ולכן

$$f(x^*)\geq\inf_{x\in M}f(x)=V_P\geq V_{LD}=V_{WD}=\sup_{(x,\lambda,\mu)\in M_{WD}}L(x,\lambda,\mu)\geq L(x^*,\lambda^*,\mu^*)$$

אבל (3) אומר $f(x^*)=L(x^*,\lambda^*,\mu^*)$ כלומר סה"כ אנחנו מקבלים $f(x^*)\geq\cdots\geq f(x^*)$ כלומר יש לנו סדרה של שיוויונות. ■

מסקנה: $V_P=V_{WD}=V_{LD}$ כלומר אין פער דואליות.

הערה 5.16. בדוגמה הקודמת, בדקו שהתנאים של הלמה מתקיימים, כלומר $V_{WD}=V_P$ ולכן פתרון של Q_{WD} הוא פתרון של Q. (בעזרת אינפי 1 בלבד.)

מסקנה: אם

$$\begin{aligned} P: & \min f(x) \\ & \text{s.t.} h_j(x)=0 \end{aligned}$$

כלומר אין אילוצי $\leq$, אז לא צריך את תנאי (3) בלמה, הוא מתקיים אוטומטית.

הוכחה. ניזכר כי

$$L(x^*,\mu^*)=f(x^*)+\Sigma\mu_j^*h_j(x^*)=f(x^*)$$

ומכאן משתמשים בלמה. ■

הערה 5.17. אם אין אילוצי $\leq$, התנאים בלמה שקולים ל:

1. $h_j(x^*)=0$ לכל j (שקול לומר $\nabla_\mu L(x^*,\mu^*)=0$).
2. $\nabla_x L(x^*,\mu^*)=0$.

שני התנאים האלו הם בדיוק כופלי לגראנז'.

זה נותן לי מוטיבציה לעשות אותו דבר גם כשיש לי אילוצי $\leq$, כלומר במקרה הכללי:

$$\begin{aligned} P: & \min f(x) \\ & \text{s.t.} f_i(x)\leq 0 \\ & \quad h_j(x)=0 \end{aligned}$$

לכן הלמה הופכת להיות

1. $f_i(x)\leq 0, h_j(x)=0$.
2. $\lambda_i^*\geq 0$ לכל i וגם $\nabla_x L(x^*,\mu^*)=0$.
3. $\sum\lambda_i^* f_i(x^*)=0$.

כיוון שהסכום ב-(3) הוא אי חיובי, האילוץ (3) הופך להיות

$$\forall i,\lambda_i f_i(x^*)=0 \tag{3}$$

נסמן את תנאי הלמה באותיות רומיות:

I: $f_i(x)\leq 0$.

II: $h_j(x)=0$.

III: $\lambda_i^*\geq 0$ לכל i.

IV: $\nabla_x L(x^*,\mu^*)=0$.

V: $\forall i,\lambda_i f_i(x^*)=0$.

הגדרה 5.18. נק' (x^*,λ^*,μ^*) המקיימת $I-V$ נקראת נקודת KKT.

הערה 5.19. כל האלגוריתמים שיש לפתרון P מחפשים נקודת KKT.

דוגמה 5.20. נחפש

$$\begin{aligned} P: & \min x \\ & \text{s.t.} x^2\leq 0 \end{aligned}$$

דוגמה מטופשת, האילוץ הוא $x=0$ והפתרון אכן יהיה $x=0$. האם $x=0$ הוא בהכרח נקודת KKT?

$$L(x,\lambda)=x+\lambda x^2$$

הלגראנז'יאן קמור ולכן אני יכול לבדוק נקודות KKT. בנוסף כיוון ש-L קמור $P_{WD}=P_{LD}$ כלומר נקודת KKT היא תהיה מינימום גלובאלי.

נחפש נקודות KKT: לפי תנאי IV נקבל

$$(*)\nabla_x L=1+2\lambda x=0$$

ומתנאי V נקבל $\lambda x^2=0$. לפיכך, ל-$(*)$ אין פתרון!

מסקנה: אין נקודות KKT ובפרט $x=0$ היא לא נקודת KKT.

טענה 5.21. אם נתונה (x^*,λ^*,μ^*) כך ש-

1. x^* אופטימלית ב-P.
2. (λ^*,μ^*) אופטימלי ב-P_{LD}.
3. אין פער דואליות, $V_{LD}=V_P$.

אזי (x^*,λ^*,μ^*) נקודת KKT.

הוכחה. קחו הוכחה מלמת KKT. ■

שאלה 5.22. מתי $V_P = V_{LD}$?

פתרון: תשובה 1: אם P לינארית:

$$\min c^T x$$
$$\text{s.t.} Ax = b$$

ו-A מדרגה מלאה, אזי $V_P = V_{LD}$.

תשובה 2: אם

$$P : \min_y \max_x x^T Ay$$
$$\text{s.t.} \text{ וקטורי התפלגויות } x,y$$
$$\Sigma x_i = 1$$
$$x_i \geq 0$$

אפשר להוכיח:

$$P_{LD} : \max_x \min_y x^T Ay$$
$$\text{s.t.} \text{ וקטורי התפלגויות } x,y$$

אזי משפט המינימקס מוכיח $V_P = V_{LD}$.

תשובה 3: כאשר (א) הבעיה קמורה: f, f_i פונקציות קמורות, h_j ליניאריות.

(ב) יש לקבוצה האפשרית פנים: קיימת x כך ש-$f_i(x) < 0$ וכן $h_j(x) = 0$.

6 משמעות גיאומטרית של KKT.

הגדרה 6.1. נגדיר שהאילוץ f_i פעיל ב-x אם $f_i(x) = 0$.

נסמן: $I(x) = \{i | f_i(x) = 0\}$.

ניזכר בתנאי KKT:

I: $f_i(x) \leq 0$.

II: $h_j(x) = 0$.

III: $\lambda_i^* \geq 0$ לכל i.

IV: $\nabla_x L(x^*, \mu^*) = 0$.

V: $\forall i, \lambda_i f_i(x^*) = 0$.

נשים ♡ כי אנחנו יכולים לפצל את זה לפי אילוצים פעילים:

1: $f_i(x) = 0$ לכל $i \in I(x)$.

2: $f_i(x) < 0$ לכל $i \notin I(x)$.

3: $h_j(x) = 0$.

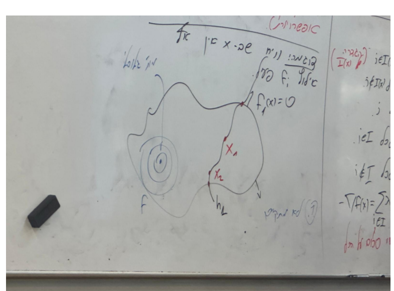
4: $\lambda_i^* \geq 0$ לכל $i \in I(x)$.

5: $\lambda_i^* = 0$ לכל $i \notin I(x)$.

6: $\nabla f + \sum_{i \in I} \lambda_i \nabla f_i + \sum \mu_i \nabla h_j = 0$.

פעם $\sum_{i \in I}$ היה סכום על הכל, עכשיו זה על קבוצה קטנה יותר.

דוגמה 6.2. נניח כי בנקודה x אין אף אילוץ f_i פעיל.



דוגמה 6.3. אילו תנאי KKT מתקיימים?

(1) לא מתקיים. ✗

(2) $f_i(x) < 0$ גם ב-x_1, x_2. ✓

(3) כנ"ל. ✓

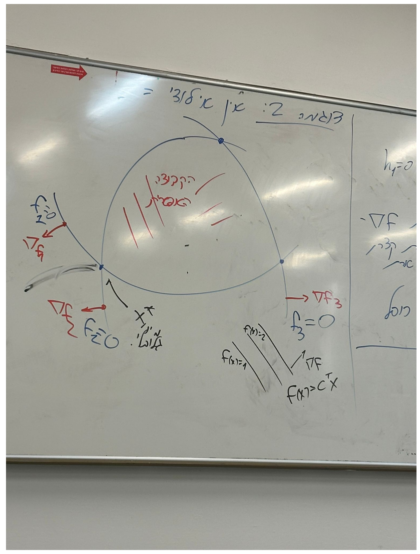
(4) מתקיים באופן ריק. ✓

(5) נבחר $\lambda_i = 0$ לכל i. ✓

(6) נבחר $-\nabla f(x) = \mu_1 \nabla h_1$. ב-$x_1$: $\nabla f \neq \mu \nabla h_1$ ולכן x_1 לא נקודת KKT. ב-x_2: אם $\nabla f, \mu\nabla h_1$ ת"ל אזי (6) מתקיים ולכן x_2 נקודת KKT.

משמעות: ∇f צריך להיות ניצב ל-$h_1 = 0$. אחרת: אפשר להטיל את $-\nabla f$ על האילוץ $h_1 = 0$ וללכת קצת בכיוון הזה כדי להוריד את ערך הפונקציה.

דוגמה 6.4. אין אילוצי שיוויון.



דוגמה 6.5. פונקציית המטרה היא מישור $f(x) = c^T x$.

שאלה: האם תיתכן x_1 נקודת KKT בפנים הקבוצה האפשרית? (כלומר $f_i(x_1) < 0$).

תשובה: תנאי (6) אומר לי $\nabla f = -\sum_{i\in I} \lambda_i \nabla f_i$. ב-$x_1$ מתקיים $I(x_1) = \emptyset$ ולכן (6) מתקיים $\iff \nabla f(x_1) = 0$. אבל f לינארית ולכן $\nabla f = c$ קבוע ובפרט $\nabla f \neq 0$ כלומר x_1 לא נקודת KKT.

ב-x_2: $I(x_2) = \{1, 3\}$ ולכן $-\nabla f(x_2) = \lambda_1 \nabla f_1(x_2) + \lambda_3 \nabla f_3(x_2)$. שאלה: האם אפשר למצוא $\lambda_1, \lambda_3 \geq 0$? אם כן, כל השאר מתקיים אוטומטית ו-x_2 תהיה נקודת KKT. נסמן $F(x) = \{d | d = \alpha \nabla f_1(x_2) + \beta \nabla f_3(x_2) \wedge \alpha, \beta \geq 0\}$. הקבוצה הזאת היא כמו $span$ רק עם מקדמי צירוף חיובים וקוראים לזה חרוט.

החרוט F מצביע "החוצה" מהקבוצה האפשרית. את כל הכיוונים שבו אי אפשר להטיל על הקבוצה האפשרית וללכת בכיוון ההיטל בתוך הקבוצה האפשרית. מהציור אנחנו רואים ש-$-\nabla f$ לא ב-F גדול ולכן תנאי (6) לא יתקיים כלומר x_2 לא נקודת KKT.

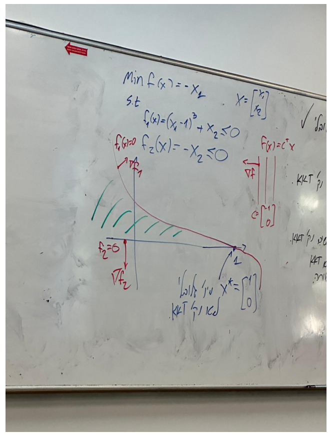
ב-x_3: $I(x_3) = \{1, 2\}$. (6) דורש $-\nabla f(x_3) = \lambda_1 \nabla f_1(x_3) + \lambda_2 \nabla f_2(x_3)$ וזה אכן מתקיים, לכן x_3 היא נקודת KKT.

סיכום ביניים:

1. x^* נקודת KKT $\Leftarrow$ x^* מינימום גלובאלי.
2. ראינו דוגמאות בהם x^* מינימום גלובאלי $\Leftarrow$ x^* נקודת KKT. מתי זה לא עובד? השאלה חשובה כי
   (א) רוב האלגוריתמים מחפשים נקודות KKT.
   (ב) אם x^* מינימום גלובאלי ו-x^* לא נקודת KKT אז האלגוריתם לא ימצא אותה.

דוגמה 6.6. נפתור את הבעיה

$$\begin{aligned} &\min f(x) = -x_1 \\ &\text{s.t.} f_1(x) = (x_1 - 1)^3 + x_2 \leq 0 \\ &\quad f_2(x) = -x_2 \leq 0 \end{aligned}$$



דוגמה 6.7. באופן מפתיע נקבל $x^* = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}$ לא נקודת KKT. נבדוק את התנאים. ב-x^*, $I(x^*) = \{1, 2\}$.

1. $f_i(x^*) = 0$ ✓.
2. $f_i(x^*) < 0$ לכל $i \notin I$ מתקיים באופן ריק ✓.
3. $h_j(x^*) = 0$ באופן ריק ✓.
4. $\lambda_{1,2} \geq 0$ עוד לא ידוע.
5. $\lambda_i = 0$ לכל $i \notin I$ מתקיים באופן ריק ✓.
6. $-\nabla f(x^*) = \lambda_1 \nabla f_1(x^*) + \lambda_2 \nabla f_2(x^*)$ אולי קורה.

$\nabla f_1 = \begin{pmatrix} 3(x_1 - 1)^2 \\ 1 \end{pmatrix}$ ולכן $\nabla f_1^* = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

$\nabla f_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}$ בכל נקודה. בנוסף, $\nabla f = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}$. בעיה: ∇f הוא אפילו לא צירוף לינארית של $\nabla f_1, \nabla f_2$. לכן (6) לא מתקיים לא משנה מה נבחר להיות λ_1, λ_2, כלומר x^* לא נקודת KKT.

למה זה קרה? החרוט הנפרש על ידי $\nabla f_1, \nabla f_2$ אמור להיות הכיוונים בהם יוצאים מהקבוצה האפשרית. החרוט לא חירט והוא רק היה הישר $x_1 = 1$ ולכן קיבלתי שני כיוונים כתור חרוט.

אם מחשבים את $\nabla f_1, \nabla f_2$ קרוב ל-x^* הם בלתי תלויים לינארית אבל בגבול x^* נקבל ש-$\nabla f_1, \nabla f_2$ תלויים לינארית.

משפט 6.8. אם x^* נק מינימום מקומי של P ומתקיים $\{\nabla f_i(x^*) | i \in I(x)\} \cup \{\nabla h_j(x^*) | j$ לכל$\}$ בת"ל אז זו באמת נקודת KKT.

חלק III

ניתוח רגישות-CQ.

נניח:

1. (λ^*, μ^*) פתרון של הבעיה הדואלית P_{LD}.
2. אנחנו יודעים שאין פער דואליות: $V_P = V_{LD}$.

מה המשמעות של (λ^*, μ^*)?

הגדרה 6.9. נגדיר את **הבעיה המופרת** להיות

$$\begin{aligned} P_\varepsilon : \min & f(x) \\ \text{s.t.} & f_i(x) \leq \varepsilon_i \\ & h_j(x) = \delta_j \end{aligned}$$

(בבעיה המקורית $\delta_j = \varepsilon_i = 0$). הרעיון: להזיז טיפה את הקבוצה האפשרית.

נסמן $V(\varepsilon, P) = \inf P_\varepsilon$. יתכן שהפרענו לבעיה עד כדי כך שכבר אין פתרון. בגלל זה כותבים inf במקום מינימום ואם אין פתרון ל-P_ε אז נסכים ש-$\inf P_\varepsilon = \infty$.

טענה 6.10.

$$V(\varepsilon, P) \geq V_P - \sum \lambda_i^* \varepsilon_i - \sum \mu_j^* \lambda_j$$

משמעות:

- אם λ_i^* ממש גדול, אז $\varepsilon_i < 0$ יוביל עלייה משמעותית בערך פונקציית המטרה. כלומר, שווה להדק את החגורה באילוץ f_i.
- אם $\lambda_i^* \approx 0$ הפרת האילוץ f_i לא תשפיע על הפתרון באופן ניכר.
- אם $\left|\mu_j^*\right|$ גדול ממש ממש מ-0 (ענקי) אזי $\operatorname{sign}(\mu_j^*)$ אומר לאיזה כיוון כדאי להפר את h כדי לשפר את הפתרון.

הוכחה. תהי x נקודה אפשרית ב-P_ε: $f_i(x) \le \varepsilon_i, h_j(x) = \delta_j$. אם אין, אז $V(\varepsilon,\delta)$ והטענה נכונה. אם לא (נזכור שאין פער דואליות):

$$V_P = V_{LD} = \inf_{y\in\mathbb{R}^n}(y,\lambda^*,\mu^*) \le L(x,\lambda^*,\mu^*) = f(x) + \sum \lambda_i^* f_i(x) + \sum \mu_j^* h_j(x)$$
$$\le f(x) + \sum \lambda_i^*\varepsilon_i + \sum \mu_j^*\delta_j$$

קיבלנו $V_P \le f(x) + \sum \lambda_i^*\varepsilon_i + \sum \mu_j^*\delta_j$ נעביר אגף ונקבל $V_P - \sum \lambda_i^*\varepsilon_i - \sum \mu_j^*\delta_j \le f(x)$. זה נכון לכל x אפשרי ב-P_ε ולכן אפשר לקחת inf:

$$V_P - \sum \lambda_i^*\varepsilon_i - \sum \mu_j^*\delta_j \le \inf_{x\in P_\varepsilon} f(x) = V(\varepsilon, P)$$

כנדרש. ■

טענה 6.11. אם $V(\varepsilon,P)$ חלקה אז $\frac{\partial V}{\partial\varepsilon_i}|_{\varepsilon,\delta=0} = -\lambda_i, \frac{\partial V}{\partial\delta_j}|_{\varepsilon,\delta=0} = -\mu_j$. משמעות: הפרה של אילוץ i ב-ε_i משמע שיפור/ הרס של $-\lambda_i\varepsilon_i$.

הוכחה. נסמן $\varepsilon_t = t\cdot e_i$. מהטענה הקודמת $V(\varepsilon_t,0) \ge V_P - \lambda_i^* t$. מכך אני מסיק 2 דברים:
1. $t > 0$: נקבל $\frac{V(0+t\cdot e_i,0)-V(0,0)}{t} \ge -\lambda_i^*$.
2. $t > 0$: נקבל $\frac{V(0+t\cdot e_i,0)-V(0,0)}{t} \le -\lambda_i^*$.

אגף שמאל בשני האי שיוויונות שואף ל-$\frac{\partial V}{\partial\varepsilon_i}|_{\varepsilon,\delta=0}$ לפי הגדרת הנגזרת הכיוונית, והוא גדול וקטן מ-$-\lambda_i^*$ בו זמנית ולכן שווה להם. עם δ_j בדומה. ■

אחד התנאים ב-KKT היה $\lambda_i f_i = 0$. קיבלנו שיפור: אם $f_i < 0$ ו-i פעיל אז $\lambda_i = 0$ כלומר אפשר להפר את הבעיה המקורית ו-x^* עדיין יהיה פתרון.

אם $f_i = 0$ אז λ_i אומר כמה נזק יקרה מהפרת אילוץ זה.

הגדרה 6.12. תהי $M \subseteq \mathbb{R}^n$ וכן $x \in M$. נגדיר את **החרוט המשיק** להיות

$$T_M(x) = \left\{ d \middle| \begin{array}{c} \exists 0 < \{t_k\}_{k=1}^\infty, \{d_k\}_{k=1}^\infty \in \mathbb{R}^n \text{s.t.} \\ d_k \to d, t_k \to 0, \forall k : x + t_k d_k \in M \end{array} \right\}$$

אינטואיטיבית $T_M(x)$ הוא כל הכיוונים מהם אפשר להגיע אל x תוך כדי תנועה מתוך M.

הערה 6.13. $0 \in T_M(x)$ תמיד כי עבור $d = 0$ בוחרים $d_k = 0$ ואז $x + t_k d_k = x \in M$.

הערה 6.14. בגלל שאמרנו $0 \in T_M(x)$ אזי כדי לראות את החרוט המשיק בנקודה x עצמה נתבונן ב-$x + T_M(x)$.

טענה 6.15. אם $d \in T_M(x)$ אז לכל $\alpha > 0$ מתקיים $\alpha d \in T_M(x)$.

הוכחה. נוכיח $\alpha d \in T_M(x)$, כלומר נוכיח:

(1) $d_k' \to \alpha d$. (2) $0 < t_k' \searrow 0$. (3) $x + t_k' d_k' \in M$.

נגדיר $d_k' = \alpha d_k$ כלומר $d_k' \to \alpha d$ כלומר (1) מתקיים. נגדיר $0 < t_k' = \frac{1}{\alpha}t_k$ ואכן $t_k' \searrow 0$ כלומר (2) מתקיים. באשר ל-(3):

$$x + t_k' d_k' = x + \frac{1}{\alpha}t_k \alpha d_k = x + t_k d_k \in M$$

כלומר גם (3) מתקיים ולכן $\alpha d \in T_M(x)$. ■

למה הדבר הזה חשוב:

טענה 6.16. אם x^* מינימום לוקאלי של f ב-M אזי $\langle \nabla f(x^*), d\rangle \ge 0$ לכל $d \in T_M(x)$.

הוכחה. יהי $d \in T_M(x^*)$ עם t_k, d_k המתאימות. נסתכל על קירוב טיילור:

$$f(x^* + t_k d_k) = f(x^*) + \langle \nabla f(x^*), t_k d_k\rangle + o(\|t_k d_k\|)$$

נזכור ש-x^* מינימום ב-M כלומר $f(x^* + t_k d_k) \ge f(x^*)$. לפיכך נקבל

$$0 \le \langle \nabla f(x^*), t_k d_k\rangle + o(\|t_k d_k\|)$$

נחלק ב-t_k ונקבל

$$0 \le \underbrace{\langle \nabla f(x^*), d_k\rangle}_{\to\langle \nabla f(x^*), d\rangle} + \underbrace{o(\|d_k\|)}_{\to 0}$$

כלומר $\langle \nabla f(x^*), d\rangle \ge 0$ כנדרש. ■

משמעות: לכל כיוון לתוך M, f לא יורדת.

מסקנה: אם x בפנים של M (ואז $T_M(x)=\mathbb{R}^n$) אז $\langle\nabla f(x^*),d\rangle\geq 0$ לכל $d\in T_M(x)$.

זה מעניין כי אז $\langle\nabla f(x^*),d\rangle\geq 0$ וגם $\langle\nabla f(x^*),-d\rangle\geq 0$ כלומר $\langle\nabla f(x^*),d\rangle=0$ לכל d אבל אז זה נכון גם עבור $d=\nabla f(x^*)$ כלומר $\|\nabla f(x^*)\|=0$ ולכן $\nabla f(x^*)=0$.

זו בעצם הכללה לתנאי נגזרת הראשונה.

הערה 6.17. הטענה ההפוכה לא נכונה. יתכן $\langle\nabla f(x^*),d\rangle\geq 0$ אבל x^* לא מינימום ב-M.

דוגמה 6.18. נתבונן ב-

$$\begin{aligned}&\min y\\ &\text{s.t.} y=-x^2\end{aligned}$$

בבירור אין מינימום גלובאלי. קצת יותר קשה לראות שאין מינימום לוקאלי. נסתכל על $\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}$. זה לא מינימום לוקאלי: $\begin{pmatrix}t\\-\frac{t^2}{2}\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}$ היא נקודה אפשרית ובה מתקיים $f(0,0)\geq f\begin{pmatrix}t\\-\frac{t^2}{2}\end{pmatrix}$. נראה כי $\langle\nabla f(x^*),d\rangle\geq 0$. נמצא את החרוט המשיק:

נטען כי $T_M=\left\{\begin{pmatrix}d^1\\d^2\end{pmatrix}|d^2\geq 0\right\}$ (זה אינדקסים למעלה, לא חזקות). נוכיח:

$\supseteq$: קל. יהי $d=\begin{pmatrix}d^1\\d^2\end{pmatrix}$ עם $d^2\geq 0$. ברור ש-$d_k=d,t_k=\frac{1}{k}$ ואז נוכיח $x+d_kt_k\in M$ אבל $-\left(t_kd^1\right)^2\leq 0\leq t_kd^2$ כלומר $y_d\geq -x_d^2$ ולכן $x+d_kt_k\in M$.

$\subseteq$: יהי $d=\begin{pmatrix}d^1\\d^2\end{pmatrix}$ כאשר $d\in T_M$ ונניח בשלילה $d^2<0$. הרעיון: $-x^2$ מתאפס מהר יותר מכל ישר. $x+t_kd_k$ "מתכנס לתנועה" על הישר d בכיוון ה-0. $\Leftarrow$ מתישהו, $x+t_kd_k$ יהיה קרוב מאוד לקרן בכיוון d, אבל הקרן הזאת תהיה מתחת ל-$-x^2$ $\Leftarrow$ $x+t_kd_k\notin M$ לא משנה מיהם t_k,d_k $\Leftarrow$ $d\notin M$. נראה את זה באופן פורמלי:

$d\in T_M\Leftarrow$ קיימות $d_k\to d$, $0\searrow t_k>0$ וכן $x+t_kd_k\in M$. מ-$d_k\to d$ הקבל שלכל $\varepsilon>0$ החל מ-k מסויים נקבל $\|d_k-d\|\leq\varepsilon\Leftarrow\|t_kd_k-t_kd\|\leq t_k\varepsilon\Leftarrow\left|t_kd_k^1-t_kd^1\right|,\left|t_kd_k^2-t_kd^2\right|<t_k\varepsilon'\Leftarrow t_kd_k^i<t_k(d^i+\varepsilon'):\forall i\in\{1,2\}$ אבל ידוע $t_kd_k\in M$ ולכן $t_kd_k^2>-\left(t_kd_k^1\right)^2$. נניח בה"כ $t_kd_k^1>0$. סה"כ נקבל

$$t_k(d^2+\varepsilon')\geq t_kd_k^2\geq-\left(t_kd_k^1\right)^2>-\left(t_k(d^1+\varepsilon')\right)^2$$

ונקבל

$$t_k(d^2+\varepsilon')>-\left(t_k(d^1+\varepsilon')\right)^2$$

כלומר החל מ-k כלשהו

$$t_k\geq\underbrace{-\frac{d^2+\varepsilon'}{(d^1+\varepsilon')^2}}_{d_2<0\text{ חיובי כי }}>0$$

וזו סתירה לכך ש-$t_k\to 0$.

מסקנה: $d^2\geq 0$.

מסקנה: לא כיף לחשב ככה $T_M(x)$. מה עושים? מנסים דרך הגדרה אחרת.

הגדרה 6.19. עבור הבעיה

$$\begin{aligned}&\min f(x)\\ &\text{s.t.} f_i\leq 0\\ &\quad h_j=0\end{aligned}$$

עם קבוצת האילוצים הפעילים

$$I(x)=\{i|f_i(x)=0\}$$

נגדיר את **קבוצת האילוצים האפשריים אחרי שעברה ליניאריזציה (קבוצת הכיוונים האפשריים)** להיות

$$F(x)=\left\{d|\begin{array}{c}\forall j:\langle\nabla h_j(x),d\rangle=0\\ \forall i\in I:\langle-\nabla f_i(x),d\rangle\geq 0\end{array}\right\}$$

כדי לבדוק $d\overset{?}{\in}F$ צריך לחשב מספר סופי של מכפלות פנימיות. הרעיון: $F(x)$ אמורה להיות קירוב מספיק טוב ל-$T_M(x)$.

הערות:

הערה 6.20. אותם סימנים מופיעים בתנאי KKT ובהגדרת F. לא צירוף מקרים.

הערה 6.21. $T_M(x)$ זה תכונה של M בלבד. $F(X)$ משתנה בהתאם ל-f_i, h_j שבחרנו כדי לתאר את M. אולי יהיה צריך לבחור את h_j, f_i בצורה נכונה כדי ש-$T_M(x) = F(x)$.

טענה 6.22. $F(x)$ חרוט.

הוכחה. נובע מליניאריות המכפלה הפנימית

$$\langle -\nabla f(x^*), d\rangle \geq 0 \Rightarrow \langle -\alpha\nabla f(x^*), d\rangle \geq 0, \alpha > 0$$

כנדרש. ■

דוגמה 6.23. נניח $M = \{(x,y)|\underbrace{x^2+y^2-2}_{h_1} = 0\}$ ונסמן $\bar{x} = \left(-\sqrt{2}, 0\right)$. מהם $T_M(\bar{x}), F(\bar{x})$?

נטען כי $T_M(\bar{x}) = \text{span}\left\{e_2\right\}$ (לא נוכיח).

נטען $F(\bar{x}) = \{d|\left\langle \nabla h_1(\bar{x}), d\right\rangle = 0\}$. אכן $\nabla h_1 = \begin{pmatrix} 2x \\ 2y \end{pmatrix}$, $\nabla h_1(\bar{x}) = \begin{pmatrix} -\sqrt{8} \\ 0 \end{pmatrix}$ וכן $\langle \nabla h_1(\bar{x}), d\rangle = 0 \iff d = \begin{pmatrix} 0 \\ s \end{pmatrix}$.

דוגמה 6.24. נניח $M = \{(x,y)|\underbrace{\left(x^2+y^2-2\right)^2}_{h_1} = 0\}$ ונסמן $\bar{x} = \left(-\sqrt{2}, 0\right)$. מהם $T_M(\bar{x}), F(\bar{x})$?

נשים ♡, $h_2(x) = 0 \iff h_1(x) = 0$ ולכן M זהה לזו בדוגמה קודמת.

מי זה $F(\bar{x})$?

$$F(\bar{x}) = \{d|\left\langle \nabla h_2(\bar{x}), d\right\rangle = 0\}$$

אך כרגע

$$\nabla h_2 = 2(x^2+y^2-2)\begin{pmatrix} 2x \\ 2y \end{pmatrix}$$

אבל $\bar{x} \in M$ ולכן $\langle \nabla h_2(\bar{x}), d\rangle = 0$ לכל $d \in \mathbb{R}^n$ כלומר $F(\bar{x}) = \mathbb{R}^n$.

טענה 6.25. $T_M(x) \subseteq F(x)$.

הוכחה. יהי $d \in T_M$ עם t_k, d_k מתאימות. ידוע:

(1) $x + t_k d_k \in M$.

(2) $M = \left\{x| \begin{array}{c} f_i(x) \leq 0 \\ h_j(x) = 0 \end{array}\right\}$.

לפיכך $h_j(x + t_k d_k) = 0$. מפיתוח טיילור נקבל

$$0 = h_j(x) + \langle \nabla h_j(x), t_k d_k\rangle + o(t_k)$$

נחלק ב-t_k ונקבל

$$0 = \langle \nabla h_j(x), t_k\rangle + \underbrace{\frac{o(t_k)}{t_k}}_{\underset{k\to\infty}{\longrightarrow} 0}$$

כלומר בגבול $k \to \infty$ נקבל $\langle \nabla h_j(x), t_k\rangle = 0$.

לכן עבור i פעיל ב-x: $f_i(x) = 0$ וכן $f_i(x + t_k d_k) \leq 0$. לפי פיתוח טיילור נקבל...

$$\langle -\nabla f_i(x), d\rangle \geq 0$$

ולכן $d \in F$ לפי הגדרת F. ■

משפט 6.26. אם x^* מינימום לוקאלי וגם $T_M(x^*) = F(x^*)$ אז x נקודת KKT.

משפט 6.27. אם $\{\nabla f_i(x)|i \in I\} \cup \{\nabla h_j\}$ בת"ל אז $F(x) = T_M(x)$.

הוכחה. צ"ל בעצם $F(x) \subseteq T_M(x)$.

ניסיון ראשון: נתון $\{\nabla f_i(x)|i \in I\} \cup \{\nabla h_j\}$ בת"ל. יהי $d \in F$. צריך למצוא $d_k \to d, t_k \searrow 0$ כך ש-$z_k = x + t_k d_k \in M$. זה מתקיים $\iff$ $\forall i,j: f_i(z_k) \leq 0, h_j(z_k) = 0$. לא משנה מה, יצא ש-$z_i \to x$. אם f_i לא פעיל ב-x נקבל $f_i(x) < 0$ ואז נקבל גם $f_i(z_k) < 0$ החל מ-k מסויים.

מסקנה: לא צריך לדאוג לגבי f_i, האילוץ יתקיים ב-z_k.

הערה: אם f_i פעיל, $f_i(x) = 0$. בהחלט יתכן $f_i(z_k) > 0$ אינסוף פעמים- כלומר צריך להשקיע מחשבה בבחירה של d_k, t_k כדי להימנע מזה.

עבור f_i פעיל: נעשה פיתוח טיילור ונקבל

$$
\begin{aligned}
f_i(z_k) &\approx \underbrace{f_i(x)}_{=0} + t_k \langle \nabla f_i(x), d_k \rangle \\
&= t_k \langle \nabla f_i(x), d_k \rangle \\
&\xrightarrow[k\to\infty]{} \underbrace{t_k}_{0\le} \underbrace{\langle \nabla f_i(x), d \rangle}_{\le 0}
\end{aligned}
$$

מסקנה: אם נבחר z_k נכון ($\approx$ לא עושה בעיות) נקבל $f_i(z_k) \le 0$.

בדומה:

$$h_j(z_k) \approx t_k \underbrace{\langle \nabla h_j(x), d_k \rangle}_{=0} = 0$$

לכן $z_k \in M$ וסיימנו.

איך נדלג על סימני ה-$\approx$? נכתוב משוואה ונקווה לטוב. נחפש z שפותר את המשוואה במדוייק:

$$\star \begin{cases} f_i(z) = t \langle \nabla f_i(x), d \rangle \\ h_j(z) = t \langle \nabla h_j(x), d \rangle \end{cases}$$

נעלמים: t, z. נניח שמצאנו פתרון עבור $t = \frac{1}{k}$ נקבל שאנחנו יודעים $\left(z_k, \frac{1}{k} = t_k\right)$ ולכן

$$\frac{1}{k} \langle \nabla f_i(x), d_k \rangle + o(\frac{1}{k}) = f_i(z_k) = \frac{1}{k} \langle \nabla f_i(x), d \rangle$$

נכפיל ב-k:

$$\langle \nabla f_i(x), d_k \rangle + \underbrace{k \cdot o(\frac{1}{k})}_{=o(1)} = \langle \nabla f_i(x), d \rangle$$

נשאיף את k לאינסוף ונקבל

$$(1)\ \langle \nabla f_i(x), d_k \rangle \to \langle \nabla f_i(x), d \rangle$$

בדומה,

$$(2)\ \langle \nabla h_j(x), d_k \rangle \to \langle \nabla h_j(x), d \rangle$$

סיכום ביניים: $z_k \in M, t_k = \frac{1}{k} \searrow 0$ כי (z_k, t_k) פתרון של $\star$. נשאר רק להראות $(3) d_k \to d$ ולהסיק ש-$d \in M$ לפי ההגדרה.

שאלה: האם $(1), (2) \Rightarrow (3)$? תשובה: אם $\{\nabla f_i(x) | i \in I\} \cup \{\nabla h_j\}$ בסיס אורתונורמלי אז כן. נוכיח:

נסמן p מספר ה-h_j שיש לי. נסמן $\{\nabla f_i(x) | i \in I\} \cup \{\nabla h_j\} = \{\nabla C_i | i = \underbrace{1, ..., p}_{\text{מספר ה-}h_j}, \underbrace{p+1, ..., \overbrace{|I|+p}^{:=\ell}}_{\text{מספר } f_i \text{ פעילים}}\}$.

$\{\nabla C_i\}$ בסיס אורתונורמלי:

$$
\begin{gathered}
d_k = \sum_{i=1}^{n} \langle \nabla C_i, d_k \rangle \nabla c_i \\
(1),(2) \downarrow k \to \infty \\
d = \sum_{i=1}^{n} \langle \nabla C_i, d \rangle \nabla c_i
\end{gathered}
$$

מסקנה: $d_k \to d$ כלומר $d \in T_K$.

האם באמת אפשר לפתור את $\star$?

נסמן

$$C(z) = \begin{pmatrix} C_1(z) \\ \vdots \\ C_n(z) \end{pmatrix}, C : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^\ell$$

כי $z \in \mathbb{R}^n$ ויש לי ℓ אילוצים פעילים, $C_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$. הנחנו בסיס אורתונורמלי וזה גורר $\ell = n$, כלומר $C : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$. נחשב את היעקוביאן של C:

$$J_C(z) = \begin{pmatrix} \frac{\partial C_1}{\partial z_1} & \frac{\partial C_1}{\partial z_2} & \cdots & \frac{\partial C_1}{\partial z_n} \\ \frac{\partial C_2}{\partial z_1} & \frac{\partial C_2}{\partial z_2} & \cdots & \frac{\partial C_2}{\partial z_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial C_n}{\partial z_1} & \frac{\partial C_n}{\partial z_2} & \cdots & \frac{\partial C_n}{\partial z_n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \nabla C_1(z)^T \\ \vdots \\ \nabla C_n(z)^T \end{pmatrix}$$

ולכן

$$tJ_C(x)d = t\begin{pmatrix}\langle\nabla C_1(x),d\rangle\\ \vdots\\ \langle\nabla C_n(x),d\rangle\end{pmatrix}$$

מסקנה: $\star$ בכתיב וקטורי:

$$C(z)-tJ_C(x)d=0$$

השאלה: האם יש למשוואה זו פתרון?

נסמן

$$\underbrace{C(z)-tJ_C(x)d}_{R(z,t)}=0$$

נשים $\heartsuit$:

1. $R:\mathbb{R}^{n+1}\to\mathbb{R}^n$.
2. $\frac{\partial R}{\partial z_i}=\frac{\partial c}{\partial z_i}$ כי $tJ_C(x)d$ לא תלוי ב-z. מסקנה: $J_{R,z}=J_C$ כאשר $J_{R,z}$ מסמן רק נגזרות $\frac{\partial}{\partial z_i}$.
3. $\begin{pmatrix}\nabla C_1(x)^T\\ \vdots\\ \nabla C_n(x)^T\end{pmatrix}=J_C(x)=J_{R,z}(x,0)$. שורות $J_C(x)$ בת"ל ולכן $J_C(x)$ הפיכה כלומר $J_{R,z}$ הפיכה.
4. $R(x,0)=C(x)-0=C(x)=0$ כי שורות C הם האילוצים הפעילים ב-x.

מסקנה: לפי משפט הפונקציה הסתומהת בסביבת $\begin{pmatrix}x\\0\end{pmatrix}$ קיים פתרון יחיד למשוואה $R(z,t)=0$. בפרט עבור $t=\frac{1}{k}$ קיים z_k כך ש-$z_k\to x$ וכן $\left(z_k,\frac{1}{k}\right)$ פתרון.

בעיה: הנחנו $\{\nabla C_i\}$ אורתונורמלי אבל היה נתון רק בת"ל. אפשר רק $\{\nabla C_i\}$ בסיס? כלומר לא אורתו, אבל כן $\ell=n$ אילוצים פעילים.

להוכיח ש-$\star$ פתירה: אותו דבר בדיוק.

אבל הוכחנו גם ש-$d_k\to d\Leftarrow\langle\nabla C_i,d\rangle\to\langle\nabla C_i,d_k\rangle$ על ידי שימוש באורתונורמליות.

תיקון 1: נוכיח את הנ"ל $\langle\nabla C_i,d_k\rangle\to\langle\nabla C_i,d\rangle\Rightarrow d_k\to d$ בלי להשתמש באורתונורמליות. $\langle\nabla C_i,d_k\rangle=\nabla C_i^Td_k$ לכן

$$\begin{pmatrix}\langle\nabla C_1(x),d_k\rangle\\ \vdots\\ \langle\nabla C_n(x),d_k\rangle\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\nabla C_1(x)^Td_k\\ \vdots\\ \nabla C_n(x)^Td_k\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\nabla C_1(x)^T\\ \vdots\\ \nabla C_n(x)^T\end{pmatrix}d_k=J_C(x)d_k$$

מהנ"ל בכתיב וקטורי: $\langle\nabla C_i,d_k\rangle\to\langle\nabla C_i,d\rangle\iff J_C(x)d_k\to J_C(x)d$ והתכנסות בנורמה של וקטור שקולה להתכנסות הקואורדינטות.
השורות של $J_C(x)$ בסיס $\Leftarrow J_C(x)$ הפיכה. כפל במטריצה = פונקציה הפיכה $\Leftarrow$

$$d_k=J_C^{-1}\left(J_Cd_k\right)\to J_C^{-1}\left(J_Cd\right)=d$$

בעיה: מה קורה כאשר $\{\nabla C_i\}$ רק בת"ל ולא בסיס? $\ell<n$. יש פחות אילוצים ש-z_k צריך לקיים, הבעיה אמורה להיות קלה יותר. קיבלנו $\langle\nabla C_i,d_k\rangle\to\langle\nabla C_i,d\rangle$ מפתרון $\star$:

$$\star\begin{cases}f_i(z)=t\left\langle\nabla f_i(x),d\right\rangle\\ h_j(z)=t\left\langle\nabla h_j(x),d\right\rangle\end{cases}$$

אז: ב-$\star$ היו n משוואות. השתמשנו במשפט הפוקציה הסתומה למצוא פתרון יחיד עבור $t=\frac{1}{k}$ וקיבלנו n תוצאות ב-$\langle\nabla C_i,d_k\rangle\to\langle\nabla C_i,d\rangle$.

עכשיו: יש פחות משוואות, אמורים להיות ∞ פתרונות אבל עדיין נרצה n פעמים $\langle\nabla C_i,d_k\rangle\to\langle\nabla C_i,d\rangle$ בשביל ההמשך.

איך נפתור? נוסיף אילוצים מלאכותיים כדי ש-$\star$ יחזור להיות מערכת משוואות עם n משוואות.

בסוף צריך $\{\nabla C_i\}$ יגדל להיות בסיס.

נשלים אותו: $\{\nabla C_i\}\cup\{y_{\ell+1},...y_n\}$. צריך למצוא אילוצים $C_{\ell+1},...,C_n$ כך ש-

1. $\nabla C_i=y_i$.
2. $C_i(x)=0$.

הכי פשוט: $C_i(z)=\langle y_i,z-x\rangle$. שימו $\heartsuit$ ש-$1,2$ מתקיימים (וזה האילוץ הלינארי היחיד שמקיים את זה).

האילוץ הנוסף לבעיה: $C_i(z)=0\Leftarrow$ עכשיו נגדיר

$$C(z)=\begin{pmatrix}C_1(z)\\ \vdots\\ C_\ell(z)\\ \langle y_{\ell+1},z-x\rangle\\ \vdots\\ \langle y_n,z-x\rangle\end{pmatrix}$$

כלומר

$$J_C(x)d=\begin{pmatrix}\langle\nabla C_1(x),d_k\rangle\\ \vdots\\ \langle\nabla C_\ell(x),d_k\rangle\\ \langle y_{\ell+1},d\rangle\\ \vdots\\ \langle y_n,d\rangle\end{pmatrix}$$

נכתוב משוואה:

$\star\star$ $C(z)-tJ_C(x)d=0$. $\star$ מתקיים $\iff$ ℓ השורות הראשונות. מכאן והלאה בגלל ש-$\{\nabla C_i\}\cup\{y_{\ell+1},...y_n\}$ בסיס אפשר להשתמש בהוכחה המקורית:

ל-$\star\star$ פתרון יחיד עבור $t=\frac{1}{k}$, נסמנו (z_k,t_k), בפרט הוא פותר את ℓ הראשונות, $\star$.

$\Leftarrow$ $z_k\in M$.

בנוסף, מ-$\star\star$ נקבל

$$\langle\nabla C_i,d_k\rangle\to\langle\nabla C_i,d\rangle$$
$$\langle y_i,d_k\rangle\to\langle y_i,d\rangle$$

ומכאן ההמשך כמו בהוכחה המקורית.

אמרנו: $\ell<n$ $\Leftarrow$ אמורים להיות ל-$\star$ אינסוף פתרונות ... ,$(z_k^2,\frac{1}{k})$,$(z_k^1,\frac{1}{k})$. איפה האינסוף? באפשרויות השלמה לבסיס. ■

מסקנה: אם תנאי LICQ מתקיימים ב-x^* אז x^* מינימום מקומי $\Leftarrow$ x^* נקודת KKT.

תזכורת: דיברנו על משמעות גיאומטרית של KKT. אמרנו $-\nabla f=\sum\limits_{i\in I}\lambda_i\nabla f_i\iff\nabla_x L=0$ כאשר $\lambda_i\geq0$.

נסמן $C=\left\{\sum\limits_{i\in I}\lambda_i\nabla f_i|\lambda_i\geq0\right\}$ החרוט הנפרש ע"י C.

צ"ל: $F(x)=T_M(x)$ כאשר x מינימום מקומי. $\Leftarrow$ $-\nabla f\in C\iff\nabla_x L=0$. כעת לפי הלמה של פארקש מתקיים

(1) $-\nabla f\in C$.

או (מפריד)

(2) $-\nabla f$ ממש לא ב-C- יש על מישור מפריד בין $-\nabla f$ לבין C. באופן מתמטי: קיים $d\in\mathbb{R}^n$ כך ש:

(א) $\langle d,-\nabla f\rangle>0$.

(ב) $\langle d,-\nabla f\rangle\leq0$ לכל $i\in I$.

אם x מינימום מקומי אז (2) לא אפשרי. (ב) $\underset{\star}{\Leftarrow}$ $d\in F(x)$ $\Leftarrow$ $d\in T_M(x)$.

$\star$: הניחו שאין אילוצי h_j. זה עדיין יעבוד.

(א) $\Leftarrow$ $\langle d,-\nabla f\rangle>0$ אבל הוכחנו $d\in T_M(x)$ כאשר x מינימום מקומי של f $\Leftarrow$ $\langle d,-\nabla f\rangle\leq0$.

מסקנה: $-\nabla f\in C$ (בהכרח (1)) $\Leftarrow$ $\nabla_x L=0$.

בבית: הוכיחו שבמקרה זה, כל שאר תנאי KKT מתקיימים.

הערה 6.28. אם יש h_j אז מגדירים את C אחרת, ללוקחים h_j בחשבון ומשתמשים בלמת פארקש האחרת.

חלק IV

אלגוריתמים לפתרון בעיות עם אילוצים.

הבעיה:

$$P:\min f(x)$$
$$\text{s.t.} f_i(x)\leq0$$

נניח אין h_i כרגע.

ניקח השראה מלאגרנז': נוסיף את האילוצים לפונקציית המטרה:

$$Q:\min_{x\in\mathbb{R}^n}f(x)+\sum\beta\left(f_i(x)\right)$$

הפעם: β היא פונקציית מחסום. נדרוש $\lim\limits_{x\to0^-}\beta(x)=\infty$ וכן $\beta(x)>0$ לכל $x<0$. כלומר β מענישה על קירבה לגבול שמגדיר כל אילוץ.

חפשו מינימום של Q בעזרת למשל שיטת ניוטון.

$$\arg\min Q \neq \arg\min P$$

כי Q לוקח בחשבון קנס על קרבה לשפה בעוד שאנחנו מחפשים P.

פתרון:

אלגוריתם 6.29. שיטת המחסום:

1. נגדיר $\beta(t,x) = f(x) + t\sum\beta\left(f_i(x)\right)$.
2. מוצאים $x_t^* = \arg\min\beta(t,x)$.
3. מקטינים את t, למשל $t^* = \frac{1}{2}t$.
4. משתמשים ב-x_t^* כנקודת התחלה של שיטת ניוטון (למשל) כדי לפתור את $\min\limits_{x\in\mathbb{R}}\beta(t^+,x)$.
5. מסתכלים על $\lim\limits_{t\to 0} x_t^*$, כלומר מספר האיטרציות $\leftarrow\infty$.

בדר"כ נגדיר $\beta(x) = -\log(-x)$.

מתברר שהשיטה הזאת לא טובה.

בעיות:

1) אולי $\left\{x_{t_k}^*\right\}$ לא מתכנסת.

פתרון: ניקח בתור ה-$\arg\min$ נקודת הצטברות של הסדרה.

אם הבעיה המקורית קמורה (f_i, f פונקציות קמורות) אז $B(t,x)$ קמור $\Leftarrow$ יש לבעיה 1 פתרון יחיד. כאשר $t \to 0$ נקבל $f \to B$. אם יש רציפות במעבר מהבעיה (1) לבעיה המקורית אז נקבל כי הפתרון היחיד עבור $B(t,x)$ מתכנס עבור הפתרון האמיתי.

2) $\min B(t,x)$ קשה נומרית כאשר הפתרון של הבעיה האמיתית על שפת התחום האפשרי.

נניח ש-$x_k^* \to x^*$ על שפת התחום האפשרי, כלומר אחד האילוצים פעיל, בה"כ $f_1(x^*) = 0$. כדי למצוא $x_{t_k}^* = \arg\min B(t_k,x)$ משתמשים באלגוריתם מורד הגרדיאנט:

$$\nabla_x B(t,x) = \nabla f + \sum \beta'\left(f_i(x)\right)\nabla f_i = \nabla f + \sum -\frac{t}{f_i(x)}\nabla f_i$$

אבל $t \to 0, f_i(x_{t_k}^*) \to 0$ לכן נומרית החל ממקום מסויים יהיה לי "$\frac{0}{0}$" במחשב וזה לא בריא.

פתרון: ידוע שב-x_t^* מתקיים $\nabla_x B(t,x) = 0 \Leftarrow \nabla f(x_t^*) + \sum \underbrace{-\frac{t}{f_i}}_{\lambda_i :=}\nabla f_i$ ונשים ♡ שמתקיים $t > 0$ לפי ההגדרה וכן $f_i(x_t^*) < 0$ כלומר $\lambda_i > 0$.

מסקנה: ב-x_t^* מתקיים:

1. $\nabla f + \Sigma\lambda_i\nabla f_i = 0$.
2. $f_i < 0$.
3. $\lambda_i > 0$.
4. $\lambda_i f_i = -t$.

כלומר x_t^* כמעט נקודת KKT (זה היה בדיוק KKT אם אגף ימין ב-(4) היא 0 ולא $-t$). זה מביא אותנו לפיתוח אלגוריתם חדש שזונחא את שיטת המחסום:

אלגוריתם 6.30. אלגוריתם נקודת פנים primal-dual.

1. מצאו (בקירוב) x_t^* המקיים $\nabla f + \Sigma\lambda_i\nabla f_i = 0, f_i < 0, \lambda_i > 0, \lambda_i f_i = -t$.
2. הקטינו את t וחזרו ל-(1) גם x_t^* כנק' התחלה.

נשים ♡:

1. x_t^* תמיד נק' אפשרית בבעיה המקורית (כי (2)).
2. (x^*, λ_t^*) אפשרית ב-WD (כי (1), (2), (3)) $\Leftarrow V_{WD} \geq L(x^*, \lambda_t^*)$. אם LD שקולה ל-WD אז מפער הדואליות:

$$\begin{aligned}
0 \leq V_P - V_{LD} = V_P - V_{WD} &\leq f(x_t^*) - L(x_t^*, \lambda_t^*) \\
&= f(x_t^*) - \left(f(x_t^*) + \sum \lambda_i^* f_i(x_t^*)\right) \\
&= -\sum \lambda_i^* f_i \\
&= -\sum -t \\
&= mt
\end{aligned}$$

מהתוצאה הזאת אפשר לקבל הערכה לשגיאה: אם עוצרים כאשר $t < \varepsilon$, כמה אנחנו קרובים לפתרון?

(א) $V_P \leq f(x_t^*)$.

(ב) ראינו: $f(x_t^*)-L=mt$, לכן

$$f(x_t^*)=L+mt\leq V_{WD}+mt\leq V_P+mt$$

כלומר קיבלנו $V_P\leq f(x_t^*)\leq \underbrace{V_P+mt}_{\to V_P}$.

שאלות פתוחות (אצלנו):

1. איך מוצאים את (x_t^*,λ_t^*)? אפשר לחפש בגוגל SQP ולגלות שמקרבים את הבעיה המקורית בעזרת קירוב ריבועי ופותרים במדוייק. חובה: קמירות.
2. מה עם h_i? בגדול זה אותם אלגוריתמים אבל על משטחים. $h_i=0$ מגדיר משטח ב-$\mathbb{R}^n$, קצת גא"ד...

חלק V

מטה היוריסטיקות.

איך פותרים את

$$\begin{aligned}&\min f\\ \text{s.t.}\,&f_i\leq 0\\ &h_i=0\end{aligned}$$

בלי לחשב ∇f. למה שנרצה לעשות את זה?

1. ייתכן שהקבוצה האפשרית בדידה. אין אינפי.
2. ייתכן ש-f לא גזירה.
3. לחשב ∇f יקר מדי: אופטימיזציה של היפר פרמטרים בלמידת מכונה (גודל המימד החבוי, מספר השכבות, קצב הלמידה...)

הרעיון הוא לקחת השראה מהטבע. הטבע עושה אופטימיזציה בלי פרמטרים, ניקח ממנו השראה.

למה מטה היוריסטיקות? כי אלה יהיו כלים כלליים שתופסים לגבי הרבה בעיות.

7 ריכוך מדומה- Simulated Annealing.

לוקחים השראה מפיזיקה סטטיסטית.

עובדות על מגנטים:

1. אטומי מתכת הם מגנטים קטנים.
2. כל אטום יכול להיות באחד משני מצבים בלבד: או שהוא נראה $-\circ+$ או שהוא נראה $+\circ-$, נסמן בהתאמה $\downarrow$ וכן $\uparrow$.
3. אם מסדרים אטומים בשורה וכולם באותו מצב מקבלים מגנט גדול.
4. אם האטומים בשורה לא מסכימים על המצב- זה לא מגנט.
5. מגנטים לא אוהבים לא להסכים. ☹ $=\uparrow\downarrow$, ☺ $=\uparrow\uparrow$.
6. לפעמים הדחייה לא מספיקה בשביל להפוך את הקוטביות של אחד מהם.
7. אם ניתן לאחד המגנטים במצב $\downarrow\uparrow$ דחיפה קלה הוא ישלים את העבודה לבד ויהפוך ל-$\uparrow\uparrow$ או ל-$\downarrow\downarrow$.

שאלה 7.1. איך יוצרים מגנט (בהינתן התצפיות שלי (1)-(7))?

1. מסדרים אטומים של מתכת בשורה באקראי $\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow$.
2. מחממים. כל האטומים מקבלים באקראי דחיפות קלות לכיוונים שונים. נראה מעברים כאלו: $\uparrow\downarrow\mapsto\uparrow\uparrow$ כי המגנו למטה רוצה להסתובב והדחיפה עוזרת לו.
3. מחכים שהמצב יתייצב.
4. מורידים קצת את הטמפרטורה.
5. בסוף נשאר רק $\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$ (או רק $\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow$).

מודל מתמטי:

1. האטומים יושבים על $\mathbb{Z}$ (או תת קבוצה סופית).
2. בין כל 2 שכנים נגדיר אנרגיה: $\underset{i+1}{\downarrow}\ \underset{i}{\downarrow}$ או $\underset{i+1}{\uparrow}\ \underset{i}{\uparrow}$ אומר $E_i=-1$. $\underset{i+1}{\downarrow}\ \underset{i}{\uparrow}$ או $\underset{i+1}{\downarrow}\ \underset{i}{\uparrow}$ אומר $E_i=1$. נסמן את הקונפיגורציה כולה ב-σ, לדוגמה

$$\sigma=(...,-1,1,-,1,1,...)\iff\cdots\ \underset{i}{\downarrow}\ \underset{i+1}{\uparrow}\ \underset{i+1}{\downarrow}\ \cdots$$

3. נסכום את כל האנרגיות: זו האנרגיה של הקונפיגורציה $E(\sigma)=\sum\limits_{i=-\infty}^{\infty}E_i=-\sum\limits_{i=-\infty}^{\infty}\sigma_i\sigma_{i+1}$ (זה ההמילטוניאן $\mathscr{H}$).
4. הטבע שואף למזער את האנרגיה אבל הרעש האקראי (נובע מהחום) הורס לו. איזון בין 2 הכוחות מוביל לכך שהסיכוי לראות את σ אחרי התייצבות המערכת הוא לפי התפלגות בולצמן:

$$\mathbb{P}(\sigma)\propto e^{-\frac{E(\sigma)}{T}}$$

התפלגות בולצמן היא כמו התפלגות נורמלית- צצה בכל מיני מקומות.

נשים ♡:

1. אם $E(\sigma)<<0$ אזי $\mathbb{P}(\sigma)>>0$ נמוכה גבוהה.
2. אם $T\to\infty$ אזי $\mathbb{P}(\sigma)\propto 1$. כולם שווים: הדחיפות שמקבלים כל כך חזקות שהם תמיד יתהפכו.
3. אם $T\to 0$: $\mathbb{P}(\sigma)\propto\begin{cases}1 & \sigma=\arg\min E(\sigma)\\ 0 & else\end{cases}$.

איך אפשר להשתמש בכל הידע הזה כדי לפתור את בעיית הסוכן הנוסע?

נתאר מתמטית את המודל:

מסלול: בהינתן n ערים, כל מסלול הוא פרמוטציה של S_n (על כל n האיברים).

מקבלים מטריצת מרחקים

לעיר / מעיר	1	2	$\cdots$	n
1	0	1		
2	2			
$\vdots$			etc	
n				

נגדיר d_{ij} להיות המרחק בין עיר i לעיר j. מחיר המבלול הוא $C(\pi)=\sum\limits_i d_{\pi_i\pi_{i+1}}$ ניסוח בעיית אופטימיזציה:

$$\begin{aligned}&\min C(\pi)\\ &\text{s.t.}\pi\in S_n\end{aligned}$$

קבוצה אפשרית בדידה. איך מחשבים $\nabla C(\pi)$???

מצד שני, מרחב החיפוש סופי. אפשר לבדוק את כל האפשרויות. בעיה: יש המון אפשרויות, $n!$ אפשרויות.

אלגוריתם 7.2. פתרון בעזרת Simulated Annealing:

1. בוחרים π התחלתית באקראי ומתחילים עם T גדול.
2. מגרילים באקראי פרמוטציה שכנה: $\pi^+=\pi\cdot(i,j)$. בעצם π^+ היא π רק שהעיר ה-i החליפה את המקום שלה עם העיר ה-j.
3. אם $C(\pi^+)\le C(\pi)$ שומרים את π^+ בתור האיטרציה הבאה וחוזרים איתה ל-(2).
4. אחרת $C(\pi^+)>C(\pi)$: מקבלים את π^+ בסיכוי $e^{-\frac{1}{T}\left(C(\pi^+)-C(\pi)\right)}$ וחוזרים בחזרה ל-(2) עם π המקורי.
5. אחרי מספיק זמן, מקטינים קצת את הטמפרטורה T.
6. חוזרים על זה עד ∞.

תוצאת תיאורטית: בהכרח התהליך יסתיים $\lim\limits_{k\to\infty}\pi_k=\arg\min C$.

בעיה: צריך להוריד T לאט מאוד, אין תקציב לזה.

השוואה למפעל המגנטים:

1. זהה.
2. הייתי הולך לאטומים, רואה קונפיגורציה של $\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow$, רואה את האטום של $\uparrow$ ומנסה להפוך אותו כדי לראות אם הוא משפר אותי או לא.
3. סימולציה של העדפה של הטבע של שכנים עם אנרגיה נמוכה יותר כי ב-(2) כולם שווים. שכנים עם C נמוך יותר מתקבלים אוטומטית. שכנים עם C גבוה יותר: לא תמיד.
4. זהה ל-3.
5. זהה.
6. זהה.

מאחורי הקלעים: אנחנו בעצם דוגמים תהליך סטוכסטי:

$$\pi_0,\pi_1,\ldots$$

כאשר π_0 הוא אקראי, נדגם מהתפלגות בולצמן $e^{-\frac{E(\pi)}{T}}$. כעת,

$$\mathbb{P}\left(\pi_{i+1}=k|\pi_i=j\right)=\begin{cases}0 & k,j \text{ לא שכנות}\\ \frac{1}{\#j\text{ שכנים של }} & k,j,E(k)\le E(j) \text{ שכנות}\\ \frac{1}{\#j\text{ שכנים של }}e^{-\frac{\Delta E}{T}} & k,j,E(k)>E(j) \text{ שכנות}\\ 1-\frac{1}{\#j\text{ שכנים של }}e^{-\frac{\Delta E}{T}}-\frac{1}{\#j\text{ שכנים של }} & k=j\end{cases}$$

בעצם יש לנו שרשרת מרקוב.

משפט 7.3. אם:

1. אפשר להגיע מכל מצב i לכל מצב j תוך מספר סופי של צעדים. (אי פריקות).
2. איפשהו אפשר להישאר במקום $\mathbb{P}\left(\pi^{+}=i|\pi=i\right)>0$ עבור i כלשהו. (אי מחזוריות).
3. קיימת התפלגות $\mathbb{Q}$ על כל המצבים כך ש-

$$\mathbb{P}\left(\pi_{i+1}=k|\pi_i=j\right)\mathbb{Q}\left(j\right)=\mathbb{P}\left(\pi_{i+1}=j|\pi_i=k\right)\mathbb{Q}\left(k\right)$$

(איזון מפורט).

הוכחה. אז:

$$\lim_{k\to\infty}\pi_k=\mathbb{Q}$$

נראה ש- $\mathbb{Q}\left(i\right)\alpha e^{-\frac{E(i)}{T}}$ מקיימת את תנאי (3) עם הסתברויות המעבר שבחרנו:

אם k,j לא שכנים, התנאי יתקיים אוטומטית.

נניח שכנים וכן $E(k)\le E(j)$ אזי

$$\begin{aligned}\mathbb{P}\left(\pi_{i+1}=k|\pi_i=j\right)\mathbb{Q}\left(j\right)&=\frac{1}{\#j\text{ שכנים של }}\frac{e^{-\frac{E(j)}{T}}}{\sum_j e^{-\frac{E(j)}{T}}}\\ \mathbb{P}\left(\pi_{i+1}=j|\pi_i=k\right)\mathbb{Q}\left(k\right)&=\frac{1}{\#j\text{ שכנים של }}e^{-\frac{\Delta E}{T}}\frac{e^{-\frac{E(k)}{T}}}{\sum_j e^{-\frac{E(j)}{T}}}\\ &=\frac{1}{\#j\text{ שכנים של }}\frac{e^{-\frac{E(k)}{T}-\frac{\Delta E}{T}}}{\sum_j e^{-\frac{E(j)}{T}}}\\ &=\frac{1}{\#j\text{ שכנים של }}\frac{e^{-\frac{E(k)}{T}-\frac{(E(j)-E(k))}{T}}}{\sum_j e^{-\frac{E(j)}{T}}}\\ &=\frac{1}{\#j\text{ שכנים של }}\frac{e^{-\frac{E(j)}{T}}}{\sum_j e^{-\frac{E(j)}{T}}}\\ &=\mathbb{P}\left(\pi_{i+1}=k|\pi_i=j\right)\mathbb{Q}\left(j\right)\end{aligned}$$

כנדרש. ■

מה צריך בשביל לכתוב אלגוריתם כללי שאפשר ליישם בכל בעיה, לא רק TSP? (היוריסטיקה ← מטה היוריסטיקה).

1. פונקציית המטרה ← אנרגיה.
2. איך מגדירים שכן?
   (א) שינוי מינימלי אפשרי.
   (ב) במעבר שכן ← שכן ← שכן ← שכן ← ... אפשר להגיע מכל מצב לכל מצב.
3. את שאר האלגוריתם אפשר להעציק מ-TSP.

צריך לקיים 3 דרישות של המשפט בדבר התכנסות שרשראות מרקוב:

1. אי פריקות: באמת (b) הנ"ל.
2. אי מחזוריות: אפשר להישאר במקום. בנוי אוטומטית באלגוריתם (המטבע יכול ליפול על 0).
3. איזון מפורט: בנוי בתוך ההסתברות שהמטבע יפול על 1.

בעיות אפשריות:

1) איך בוחרים $T >> 0$ התחלתי? צריך לקחת בחשבון את הסקאלה של E.

כלל אצבע: לפני ריצת האלגוריתסת אחרי שדגמנו x_0 אקראי: מסתכלים על הסביבה של x_0 ואוספים סטטיסטיקה על האנרגיה בסביבה ובוחרים T_0 כך ש- $\mathbb{P}(i \to j) = e^{-\frac{\Delta E}{T}}$ לא תהיה קטנה מדי.

$$0.5 = e^{-\frac{E(\Delta E)}{T_0}}$$

פותרים עבור T_0.

2) מתי מורידים את T? צריך בעדינות כדי לא להרוס את התכנסות השרשרת.

כלל אצבע: אחרי מספיק פעמים שקיבלנו את π^+ (למשל כל 1000 פעמים).

3) בכמה להוריד את T? תלוי ב-(2): אם מחכים הרבה זמן אפשר להוריד בהרבה.

כלל אצבע: $T^+ = 0.9T$.

8 אלגוריתמים גנטיים.

8.1 מבוא לאבולוציה.

1. לפרטים (אנשים/ חיות) באבולוציה יש גנוטיפ: סדרה של אותיות $ACGTTTA....$
2. הגנוטיפ קובע את הפנוטיפ (תכונות שנראות לעין): גובה, צבע עיניים, מסת שריר,...

$$AATT \to \text{ילד קטן}$$
$$ATAT \to \text{איש שמן}$$

3. פרטים באוכלוסיה עוברים סלקציה טבעית: פנוטיפ מתאים יותר לסביבה $\Leftarrow$ סיכוי הישרדות והתרבות גבוהים יותר "החזק שורד".
4. פרטים מורישים לצאצאים שלהם את הגנוטיפ שלהם עם שינויים:
   (א) מוטציה: שינוי קטן מקומי בגנוטיפ. למשל:

$$...ACGT \xrightarrow{SNP} AGGT...$$

או

$$...A\cancel{C}GT \xrightarrow{del} AGT...$$

או

$$...ACGT \xrightarrow{inv} TGGA...$$

   (ב) רקומבינציה (שחלוף):

$$\begin{array}{l} AACGG \searrow \\ \qquad\qquad AAAAC \\ TTACC \nearrow \end{array}$$

הטבע עושה אופטימיזציה בלי לחשב ∇f, ניקח השראה.

דוגמה 8.1. בעיית התרמיל:

יש n פריטים עם מחיר C_i ושווי V_i. צריך לבחור מספר פריטים מהאוסף (יכול להיות 1, יכול להיות n) כך ש:

1. $\sum_{i \text{ נבחר}} C_i < C$ כאשר C זה תקציב נתון.
2. $\sum_{i \text{ נבחר}} V_i$ מקסימלי.

ניסוח כבעיית אופטימיזציה:

נגדיר

$$Z_i = \begin{cases} 1 & i \text{ נבחר} \\ 0 & else \end{cases}$$

והבעיה תהיה

$$\begin{aligned} \max & \sum_{i=1}^{n} V_i Z_i \\ \text{s.t.} & \sum_{i=1}^{n} C_i Z_i < C \\ & Z_i \in \{0,1\} \end{aligned}$$

אני יכול לנסות לפתור את זה בכוח ולמצוא את התרמיל עם הערך מבין המקסימלי, 2^n אפשרויות.

פתרון עם אלגוריתם גנטי:

צריך למצוא קידוד: פתרון לבעיה $\Longleftrightarrow$ גנוטיפ

גנוטיפ: $z_1 z_2 ... z_n$.

אלגוריתם 8.2. אלגוריתם גנטי לפתרון בעיית התרמיל:

0. מצאו יצוג של פתרון הבעיה: קידוד לגנוטיפ, למשל סדרה של משתנים בינאריים. חשבו: האם כל גנוטיפ מייצג פתרון חוקי? לא! אז צריך לחשוב איך מתקנים ייצוגים לא חוקיים בהמשך. מצאו פונקציית קשירות מתאימה. בבעיית max זו יכולה להיות פונקציית המטרה.
1. הגרילו אוכלוסייה אקראית של N גנוטיפים. גודל האוכלוסיה- היפר פרמטר.
2. חשבו את הכשירות של כל פרט (כשירות גבוהה $\Leftarrow$ יותר סיכוי להתרבות). שווי התרמיל = $\sum_{i=1}^{n} V_i Z_i =$ (תרמיל)f.
3. חזרו N פעמים:
   (א) הגרילו זוג פריטים להרבות. הסיכוי להתרבות מונוטוני עולה בכשירות: $\mathbb{P}(i) = \frac{f(i)}{\sum_{j=1}^{n} f(j)}$.
   (ב) צרו צאצא:
      i. מוטציות: עושים $bit - flip$ לדוגמה $1011 \to 1001$.
      ii. רקומבינציה: מגרילים אתר רקומבינציה, משמאל אבא ומימין אמא.
4. חוזרים ל-(2) עם האוכלוסיה החדשה.

מה בעצם אנחנו מקבלים בסוף? רק גנוטיפים של $111...111$ כי לא לקחנו בחשבון את האילוץ.

בעיה: הקידוד יותר ייצוגים לא חוקיים.

פתרון 1: לשמור על חוקיות הפתרון לכל אורך הדרך.

1. מגרילים אוכלוסיה התחלתית חוקית.
2. דואגים שהאופרטורים הגנטיים (מוטציה/ שחלוף) לא יצרו ייצוגים לא חוקיים.

למשל: לכבות ביטים באקראי בצאצא עד שמתקיים $\sum_{i=1}^{n} C_i Z_i < C$.

בעיה אפשרית בפתרון: לפעמי האופרטורים הגנטיים ייצרו ייצוג לא חוקי בסיכוי גבוה ואחרי התיקון (אולי יקר) הקשר בין ההורים לצאצא חלש.

פתרון 2: להעניש ייצוגים לא חוקיים עם כשירות נמוכה יותר למשל: $\sum_{i=1}^{n} V_i Z_i - t \sum_{i=1}^{n} C_i Z_i$ = שווי התרמיל.

בעיה: צריך לבחור t כדי שהעונש יהיה בדיוק בעוצמה הנכונה- לייצר באוכלוסיה הסופית הרבה חיידקים.

בעיה אפשרית:

כשירות שלילית $\Leftarrow$ אי אפשר להגריל הורים להתרבות לפי $\frac{f(i)}{\sum_{j=1}^{n} f(j)}$ (זה כבר לא התפלגות).

פתרון 1: נגדיר $f^{+}(i) = f(i) + M$, נוסיף לכשירות קבוע מספיק גדול כדי שכולם יהיו חיוביים.

בעיה 1: לא תמיד יהיה קל למצוא M מספיק גדול.

בעיה 2: אם M גדול מדי לכולם סיכוי דומה להיבחר. רוצים סלקציה.

פתרון 2: נשנה את מנגנון הסלקציה:

אפשרות 1: לבחור באקראי 2 מתוך k הכשירים ביותר כאשר $k << N$.

אפשרות 2: סלקציית טורניר:

1) מגרילים k מתוך N.

2) המנצח: זה בעל הכשירות הגבוהה ביותר (בסיכוי גבוה). שני האחרונים יתרבו.

מתי עוצרים? בעבר: $\|\nabla f\| < \varepsilon$, אבל עכשיו אין ∇f.

פתרונות:

1. נגמר התקציב- נניח מסיבה מסוימת יש לי רק שעה על המחשב להריץ את האלגוריתם- מה שיצא אני מרוצה.
2. אם חשוב להגיע לערך פונקציית מטרה C ומצליחים, לעצור.
3. כשהתהליך "התייצב", "מיצה את עצמו" וכו.

איך מזהים את זה?

מודדים לאורך הדרך את המגוון הגנטי. הרעיון: השחלוף יוצר פתרונות חדשים, משלב חלקים טובים מההורים ליצירת פתרונות טובים יותר. זה קורה כאשר שני ההורים מספיק שונים זה מזה. אם שני ההורים זהים, אין משמעות לשחלוף: הורים שהם 1110 ו-1110 יביאו לי ילד שהוא 1110. כשהמגוון נמוך- אפשר לעצור.

איך מודדים את המגוון הגנטי?

1. נמדוד $\mathbb{V}\left[f(x)\right]$ על האוכלוסייה הנוכחית.

2. נמדוד $\mathbb{V}\left[x\right]$ לכל x פרט באוכלוסיה. בעיה: מוגדר רק עבור $x\in\mathbb{R}$, אי אפשר עבור ייצוגים "מתוחכמים".

בעיה: צריך לחשב בכל איטרציה, וזה יקר: $O\left(n^{2}\right)$.

פתרון: אפשר להשתמש במדדי שונות זולים יותר.

הבעיה הכי גדולה באלגוריתמים אלו: התכנסות מוקדמת: פרט אחד משתלט תוך מספר קצר של דורות. ברגע שזה קרה- האלגוריתם עוצר אפילו אם הפרט הוא לא הפתרון הכי טוב.

איך מזהים? מסתכלים על השונות של האוכלוסיה. אם השונות יורדת מהר מדי- בעיה. גם אם פונקציית המטרה עולה לאט מדי- בעיה.

איך פותרים? 1) מריצים כמה אוכלוסיות קטנות בנפרד זו מזו ופעם בכמה דורות מערבבים.

2) א) להתאים היפר פרמטרים: להוריד את לחץ הסלקציה: לעלות את הסיכוי להתרבות על פרטים פחות כשירים.

ב) להגדיר את המגוון הנוצר בהתרבות: למשל לעלות את הסיכוי למוטציות.

דוגמה 8.3. דוגמאות בסיסיות:

1. אופטימיזציה קלאסית: $\min\limits_{x\in\mathbb{R}^{n}}f(x)$. ייצוג: $x\in\mathbb{R}^{n}$- הווקטור הוא הייצוג. אופרטורים: מוטציה: $y=x+\varepsilon$ כאשר $\varepsilon\sim\mathcal{N}\left(0,\sigma^{2}I\right)$.
שחלוף: מקבלים x,y, נחזיר z שמשלב ביניהם: למשל $z=\frac{x+y}{2}$. אם דטרמיניסטי מדי: מגרילים $\lambda\sim U\left[0,1\right]$ ואז עושים $z=\lambda x+(1-\lambda)y$.
שאלה למחשבה: מה עושים אם יש אילוצים בבעיה? כשירות: צריך להפוך בעיית min לבעיית max כי כשירות גבוהה $\Leftarrow$ סיכוי גבוה להתרבות
2. בעיית הסוכן הנוסע. ייצוג: 1,3,5,6,7,2,4 כלומר תמורות על הערים שלי. מוטציה: החלפה של שני ערים במסלול. שחלוף: לקחת חצי מהערים מההתחלה של האבא וחצי מהסוף של האמה. בעיה: נוצרים בשחלוף ייצוגים לא חוקיים. פתרון: כל עיר שלא מופיעה/ מופיעה פעמיים אני אעניש- אולי אוריד נקודה.
3. רגרסיה סימבולית: נתונים דגימות x ותוויות y לכל x, מחפשים פונקציה $f(x)$ שתתאים $f(x_{i})=y_{i}$ הכי טוב. $f=\arg\min\limits_{f\in A}\sum\limits_{i=1}^{n}\left\Vert f(x_{i})-y_{i}\right\Vert ^{2}$ כאשר A היא קבוצת כל הפונקציות שאפשר למצוא על ידי הרכבה של $+,-,\cdot,:,\sin,\cos,\exp,\ln$ וכו. צריך לבדוק, האם $f(x)=\sin(e^{x})+\ln(x)$? האם זה $f(x)=\sin(x)\cos(x)+10$. הסביבה A גדולה- כל כך גדולה שאני לא יודע להגדיר טופולוגיה על A, ולכן אין גרדיאנטים וכל מה שאנחנו רגילים אליו. פתרון: אלגוריתם גנטי. ייצוג: עץ חישוב:

$$\sin(e^{x})+\ln(x)=\begin{array}{ccccc}
\sin & \to+ & \leftarrow & \ln\\
\uparrow & & & \uparrow\\
\exp & & & x\\
\uparrow\\
x
\end{array}$$

או לדוגמה

$$\cos(x)\sin(x)+10=\begin{array}{ccccc}
 & \cdot & \to & + & \leftarrow & 10\\
\nearrow & & \nwarrow\\
\cos & & \sin\\
\uparrow & & \uparrow\\
x & & x
\end{array}$$

מוטציה: רעיון 1: להחליף את אחד הצמתים בעץ בפונקציה אקראית אחרת. יכול לייצר ייצודים לא חוקיים $\cos(+)$. רעיון 2: ללכת לצומת יחסית נמוך בעץ ומגרילים את תת העץ מחדש. שחלוף: לחתוך תת עץ מכל הורה ולחבר אותם.

8.2 משפט הסכמה של הולנד (החוקר, לא המדינה).

הנחות:

1. מריצים אלגוריתם גנטי עם ייצוג בינארי: יש ℓ ביטים $z_{1}z_{2}\cdots z_{\ell}$.
2. כל ביט עובר מוטציה בסיכוי p_{m} באופן בלתי תלוי בביטים האחרים.
3. מבצעים שחלוף חד נקודתי בסיכוי p_{c}. אתר החיתוך נבחר באקראי: בסיכוי $1-p_{c}$ אין רקומבינציה ובסיכוי p_{c} נבחר באקראי איפה לעשות רקומבינציה.
4. הורים נבחרים לפי $\frac{f_{i}}{\Sigma f_{j}}$.

סכמה: תת קבוצה של מרחב החיפוש המסכימה על ביטים נתונים.

למשל: סכמה $1**1$, נציגים: $1001,1011,1101,1111$.

משפט 8.4. משפט הסכמה: סכמות לא ארוכות מדי ושלו קובעות יותר מדי ביטים יגדלו במספר הנציגים באוכלוסיה אם הכשירות של הסכמה מספיק גבוהה.

נדייק: הגדרות:

- $O\left(H\right)$ סדר הסכמה = מספר הביטים שהסכמה קובעת. לדוגמה:

$$O\left(1**1\right)=2,O\left(***1\right)=1$$

- $d(H)$ אורך הסכמה = המרחק בין הביט הראשון ש-H קובעת לאחרון (=מספר הרווחים שבה יכולה להתבצע רקומבינציה שתהרוס את הסכמה). לדוגמה:

$$d(1**1)=3, d(11**)=1$$

- $u(H)$ כשירות הסכמה: $u(H)=\mathbb{E}[f(\text{נציג של } H)]$, התוחלת מחושבת על כל הנציגים האפשריים (גם כאלו שאין כרגע באוכלוסיה).
- $\bar{f}(t)$: הכשירות הממוצעת בדור t.
- $m(H,t)$: מספר הנציגים של הסכמה H שנמצאים באוכלוסיה שנמצאים באוכלוסיה בדור t.
- $u(H,t)$: ממוצע הכשירות של הנציגים של H בדור t, הוא שווה ל-$\sum_{x_i^t\in H}\frac{f_i}{m}$.

משפט 8.5. משפט הסכמה, מדוייק יותר:

$$\mathbb{E}[m(H,t+1)]\geq\frac{u(H,t)}{\bar{f}(t)}\cdot m(H,t)\cdot\left(1-p_c\frac{d(H)}{\ell-1}\right)\cdot(1-p_m)^{O(H)}$$

כלומר בעברית:

$$\underbrace{\mathbb{E}[m(H,t+1)]}_{\text{תוחלת מספר הנציגים של } H \text{ בדור הבא}}\geq\underbrace{\underbrace{\frac{u(H,t)}{\bar{f}(t)}}_{\text{כשירות } H \text{ ביחס לאוכלוסיה}}}_{:=(1)}\cdot m(H,t)\cdot\underbrace{\underbrace{\left(1-p_c\frac{d(H)}{\ell-1}\right)}_{\text{סיכוי שרקומבינציה תחתוך בתור } H}}_{:=(2)}\cdot\underbrace{\underbrace{(1-p_m)^{O(H)}}_{\text{הסיכוי שלא תהיה מוטציה שתהרוס את } H}}_{:=(3)}$$

ואם ניקח את משפט הסכמה המקורי נוכל לתרגם אותו כך: סכמות (2) (3) יגדלו במספר הנציגים באוכלוסיה (1).

מסקנה: אם המקדם של $m(H,t)$ גדול מ-1 בא"ש הנ"ל, בממוצע, $m(H,t+1)$ יהיה גדול עוד יותר.

מתי המקדם גדל?

1. $\bar{f}(t)<<u(H,t)$ (H תורמת לכשירות הפרטים)
2. $d(H)$ קטן.
3. $O(H)$ קטן.

הוכחה. נסמן את הפרט ה-i באוכלוסיה בדור t ב-x_i^t.

אם אין מוטציה/ רקומבינציה (מגרילים באקראי עם החזרה N פריטים מהדור הקודם: הסיכוי של x_i^t להיבחר בהגרלה נתונה הוא $\frac{f(x_i^t)}{\sum_{i=1}^{n}f(x_i^t)}$) אז

$$\begin{aligned}\mathbb{P}\left(x_i^{t+1}\in H\right)&=\mathbb{P}\left(x_i^{t+1}\text{ ההורה של }\in H\right)\\&=\mathbb{P}\left(\text{נציג של } H \text{ נחבר להתרבות בהגרלה ה-} i\right)\\&=\frac{1}{\sum_{i=1}^{n}f(x_i^t)}\cdot\left(\sum_{x_i^t\in H}f(x_i^t)\right)\\&=\frac{1}{\bar{f}(t)\cdot N}\left(u(H,t)\cdot m(H,t)\right)\end{aligned}$$

כעת,

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[m(H,t+1)]&=\mathbb{E}\left[\sum_{i=1}^{N}1\left(x_i^{t+1}\in H\right)\right]\\&=\sum_{i=1}^{N}\mathbb{E}\left[1\left(x_i^{t+1}\in H\right)\right]\\&=\sum_{i=1}^{N}\mathbb{P}\left(x_i^{t+1}\in H\right)\\&=N\cdot\frac{1}{\bar{f}(t)\cdot N}\left(u(H,t)\cdot m(H,t)\right)\\&=\frac{u(H,t)}{\bar{f}(t)}m(H,t)\end{aligned}$$

כלומר הוכחנו למקרה ש-$p_c, p_m = 0$ וקיבלנו שיוויון.

נניח שיש רק מוטציה: $p_m > 0, p_c = 0$. שוב,

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}\left(x_i^{t+1} \in H\right) &= \underbrace{\mathbb{P}\left(\text{ההורה של } x_i^{t+1} \text{ ב-}H \text{ וגם המוטציה לא הרסה את } H\right)}_{:=A} + \underbrace{\mathbb{P}\left(\text{ההורה של } x_i^{t+1} \text{ לא ב-}H\text{, מוטציה הכניסה ל-}H\right)}_{\times} \\
&\geq \mathbb{P}(A) \\
&= \underbrace{\frac{u(H,t)\cdot m(H,t)}{\bar{f}(t)\cdot N}}_{\substack{\text{כמו מקודם, ההסתברות} \\ \text{שההורה ב-}H}} \cdot \underbrace{(1-p_m)}_{\substack{\text{אין מוטציה} \\ \text{בביט הראשון} \\ \text{שהסכמה קובעת}}} \cdot \underbrace{(1-p_m)}_{\substack{\text{אין מוטציה} \\ \text{בביט השני} \\ \text{שהסכמה קובעת}}} \cdots \underbrace{(1-p_m)}_{\substack{\text{אין מוטציה} \\ \text{בביט האחרון} \\ \text{שהסכמה קובעת}}} \\
&= \frac{u(H,t)\cdot m(H,t)}{\bar{f}(t)\cdot N}(1-p_m)^{O(H)}
\end{aligned}$$

ומכאן קל להוכיח.

אם $p_c, p_m > 0$:

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}\left(x_i^{t+1} \in H\right) &= \underbrace{\mathbb{P}\begin{pmatrix} \text{אם היה השחלוף התרחש מחוץ לביטים ש-}H \\ \text{קובעת הצאצא קיבל את החלק הזה בגנום מהורה} \\ \text{שהיה נציג של } H \text{ והמוטציה לא הרסה} \end{pmatrix}}_{:=A} + \underbrace{\mathbb{P}\begin{pmatrix} \text{רקומבינציה בתוך הסכמה} \\ \text{שיוצרת נציג של } H \end{pmatrix}}_{\times} \\
&\geq \mathbb{P}(A) \\
&= \underbrace{\frac{u(H,t)\cdot m(H,t)}{\bar{f}(t)\cdot N}(1-p_m)^{O(H)}}_{\text{כמו מקודם}} \cdot \underbrace{\mathbb{P}\begin{pmatrix} \text{רקומבינציה שלא חותכת בתוך הסכמה} \\ + \\ \text{אין רקומבינציה} \end{pmatrix}}_{:=B}
\end{aligned}$$

וכן

$$\mathbb{P}(B) = 1 - \mathbb{P}\left(\text{רקומבינצהי חותכת } H\right) = 1 - p_c \cdot \frac{d(H)}{\ell - 1}$$

ולכן

$$\mathbb{P}\left(x_i^{t+1} \in H\right) = \frac{u(H,t)\cdot m(H,t)}{\bar{f}(t)\cdot N}(1-p_m)^{O(H)}\left(1 - p_c \cdot \frac{d(H)}{\ell - 1}\right)$$

ואז ממשיכים עם האינדיקטורים כמו שעשינו. ■

מסקנה שהיינו רוצים: ידוע כי

$$\mathbb{E}\left[m(H,t+1)\right] \geq C \cdot m(H,t)$$

והיינו רוצים להכליל את זה ולומר

$$\mathbb{E}\left[m(H,t+1)\right] \geq C \cdot m(H,t) \geq C^2 \cdot m(H,t-1) \geq \cdots C^t \cdot m(H,1)$$

וזה יתן לנו שסכמות טובות גדלות באוכלוסיה באופן מעריכי.

זה לא נכון: C משתנה מדור לדור ותלוי באוכלוסיה הנוכחית. בעיות נוספות:

1. ההוכחה היא למרות האופרטורים הגנטיים. הטענה הרווחת היא שהאופרטורים תורמים להצלחת האלגוריתם.
2. התוצאה נכונה רק בתוחלת. כהחלט ייתכנו ריצות של האלגוריתם בהן $m(H,t+1) < C \cdot m(H,t)$. המשפט נכון כאשר מריצים ∞ פעמים את יצירת הדור ה-$t+1$ או שהאוכלוסיה אינסופית.
3. עובד רק על ייצוג בינארי.

9 אסטרטגיות אבולוציה.

ההבדל העיקרי: אסטרטגיות אבולוציה פועלות לפי כללים דטרמיניסטים.

9.1 אלגוריתם $CMA-ES$.

הבעיה:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} f(x)$$

כאשר x רציף ואין אילוצים. אפשר להוסיף אילוצים בדומה למה שעשינו עם ריכוך מדומה.

תיאור השיטה: שומרים בזיכרון התפלגות נורמלית n מימדית $\mathcal{N}(M,C) \sim \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$ כאשר M הוא הקירוב הנוכחי לפתרון $M \approx \arg\min f$ וכן $C_{ij} = \text{cov}(x_i, x_j)$.

אלגוריתם 9.1. אלגוריתם $CMA-ES$.

1. דוגמים $x^1, x^2, ..., x^N \sim \mathcal{N}(M,C)$ באופן בלתי תלוי (יצירת האוכלוסייה).
2. ממיינים: $f(x^1) \le f(x^2) \le \cdots \le f(x^N)$.
3. משתמשים ב-$k << N$ הכי טובים כדי לעדכן את M, C:

$$M = \sum_{i=1}^{k} \frac{x^i}{k}$$

או

$$M = \frac{\sum\limits_{i=1}^{k} \frac{x^i}{i}}{\sum\limits_{i=1}^{k} i}$$

וכן

$$C_{ij} = \text{cov}(x_i, x_j) \approx \frac{1}{k-1} \sum_{\ell=1}^{k} \left(x_i^\ell - M_i\right)\left(x_l^\ell - M_j\right)$$

4. חוזרים ל-(1).

מתי עוצרים? למשל כאשר כל הדגימות $x^1, ..., x^N$ קרובים מאוד זה לזה.

בעיות ופתרונות: במציאות האלגוריתם קצת יותר מורכב:

1. משתמשים בממוצע רץ כדי לשמור על יציבות:

$$M^+ = \lambda M + (1-\lambda) \sum_{i=1}^{k} \frac{x^i}{k}$$

(דומה למומנטום) עבור $0 < \lambda < 1$ קבוע.

2. כדי לאמוד את C צריך בו זמנית את כל המשולש העליון (היא סימטרית): $\frac{n^2+n}{2}$ פרמטרים. במקום לחשב C מחדש, עושים עדכון ממימד נמוך של C הקודמת (דומה ל-$BFGS$). כדי לאמוד את רכיב העדכון צריך רק k פרמטרים (או פחות) וזה כבר זול.
3. רוצים שהאלגוריתם ישלוט בקצב התנועה שלו. פתרון: ρ הקורולציה של כיוון התנועה. מודדים ρ ומקטינים את רכיבי המטריצה C כדי להביא את ρ ל-0 (מטריצה C עם ע"ע גדולים $\Longleftrightarrow$ גודל צעד גדול).

תוצאות תיאורטיות:

1. אם f ריבועית אז C קשורה באופן הדוק ל-H_f.
2. גיאומטריה של אינפורמציה: בעולם חדש זה בעצם מורד הגראדיאנט על משהו.