Laboratorium 11 - Spadek wzdłuż gradientu

Dawid Żak

Szymon Hołysz

2025-06-18

Table of contents

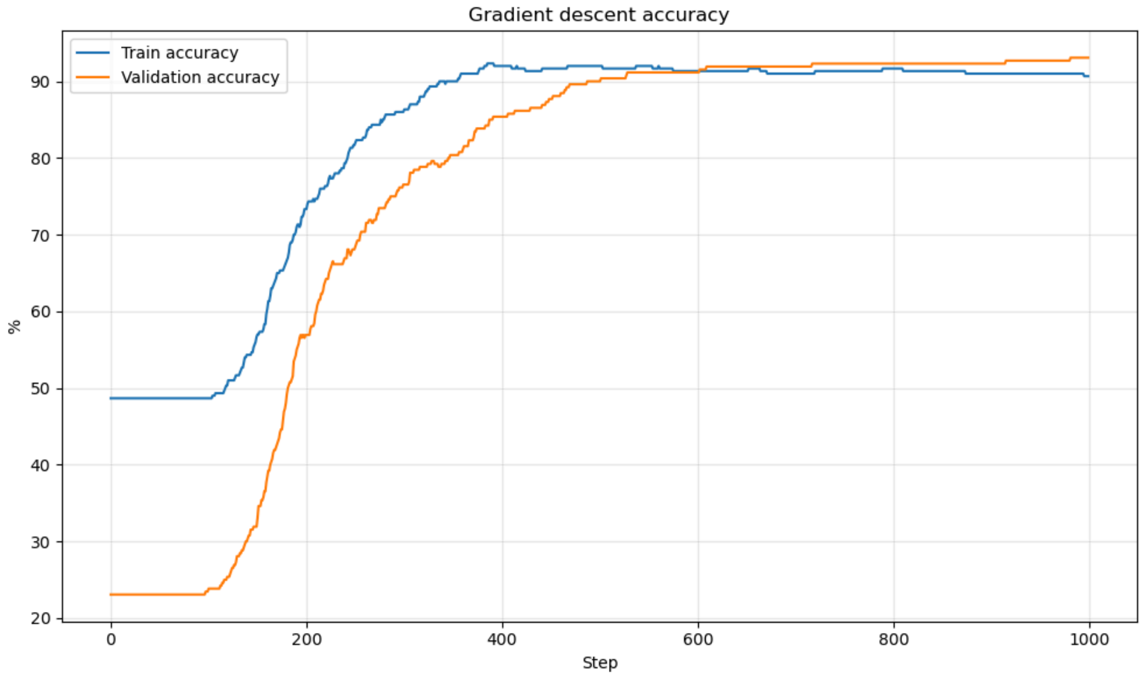
Zadanie 1.

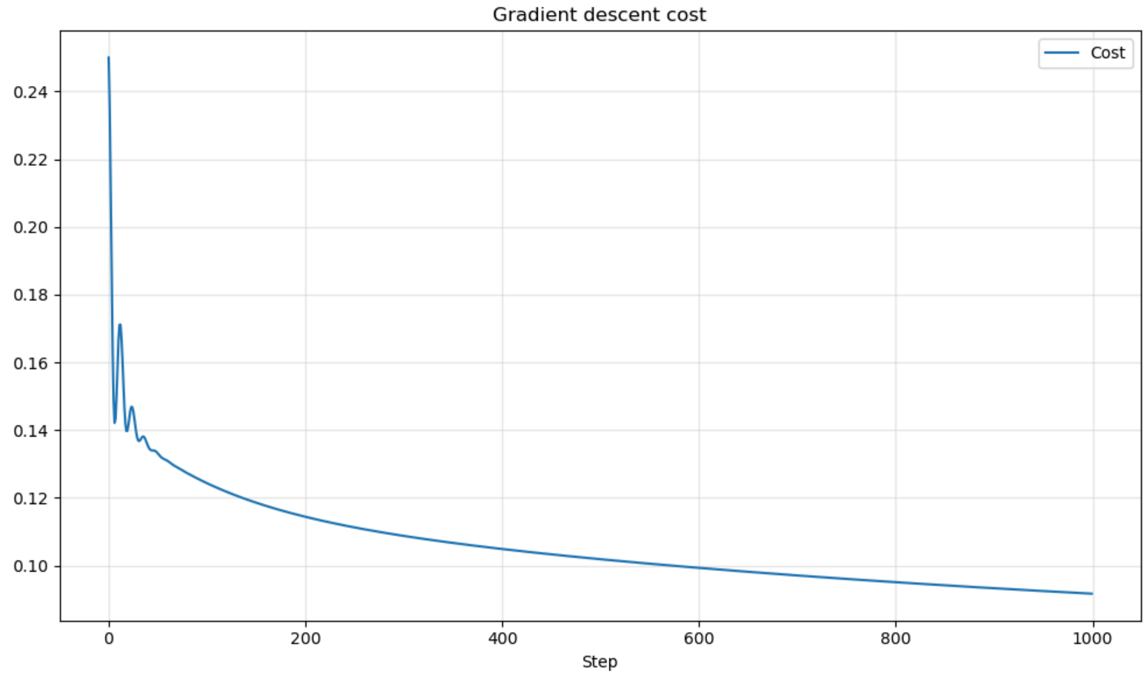
Rozwiąż ponownie problem predykcji typu nowotworu (laboratorium 2), używając metody spadku wzdłuż gradientu (ang. *gradient descent*). Stałą uczącą możesz wyznaczyć na podstawie najmniejszej i największej wartości własnej macierzy $A^T A$. Porównaj uzyskane rozwiązanie z metodą najmniejszych kwadratów, biorąc pod uwagę następujące kryteria:

- Dokładność predykcji na zbiorze testowym
- Teoretyczną złożoność obliczeniową
- Czas obliczeń.

```
Learning rate:  3.667777291369401e-08
Step   1    cost value:  0.25,  train accuracy: 48.67,  validation accuracy:
23.08
Step  50    cost value:  0.13,  train accuracy: 48.67,  validation accuracy:
23.08
Step 100    cost value:  0.12,  train accuracy: 48.67,  validation accuracy:
23.46
Step 150    cost value:  0.12,  train accuracy: 56.67,  validation accuracy:
31.92
Step 200    cost value:  0.11,  train accuracy: 73.33,  validation accuracy:
56.92
Step 250    cost value:  0.11,  train accuracy: 81.67,  validation accuracy:
68.08
Step 300    cost value:  0.11,  train accuracy: 86.00,  validation accuracy:
76.54
Step 350    cost value:  0.11,  train accuracy: 90.00,  validation accuracy:
80.38
Step 400    cost value:  0.10,  train accuracy: 92.00,  validation accuracy:
85.38
Step 450    cost value:  0.10,  train accuracy: 91.67,  validation accuracy:
87.69
Step 500    cost value:  0.10,  train accuracy: 92.00,  validation accuracy:
```

```
90.00
Step 550    cost value:  0.10,  train accuracy: 92.00,  validation accuracy:
91.15
Step 600    cost value:  0.10,  train accuracy: 91.33,  validation accuracy:
91.15
Step 650    cost value:  0.10,  train accuracy: 91.33,  validation accuracy:
91.92
Step 700    cost value:  0.10,  train accuracy: 91.00,  validation accuracy:
91.92
Step 750    cost value:  0.10,  train accuracy: 91.33,  validation accuracy:
92.31
Step 800    cost value:  0.10,  train accuracy: 91.67,  validation accuracy:
92.31
Step 850    cost value:  0.09,  train accuracy: 91.33,  validation accuracy:
92.31
Step 900    cost value:  0.09,  train accuracy: 91.00,  validation accuracy:
92.31
Step 950    cost value:  0.09,  train accuracy: 91.00,  validation accuracy:
92.69
Step 1000  cost value:  0.09,  train accuracy: 90.67,  validation accuracy: 93.08
```





Metodą spadku wzdłuż gradientu udało się uzyskać dokładność predykcji na zbiorze walidacyjnym na poziomie 93%. Jest to nieco mniejszy wynik o dokładności predykcji metodą najmniejszych kwadratów, która wynosiła 97%.

Porównując czasy wykonania, należy zwrócić uwagę na znaczną przewagę metody najmniejszych kwadratów, przy której czas rozwiązywania układu równań funkcją biblioteczną numpy.linalg.-solve był krótszy niż 0.1 s, natomiast znajdywanie rozwiązania metodą gradient descent trwało 1.9 s.

Wynika to bezpośrednio ze złożoności obliczeniowej obu metod - złożoność metody najmniejszych kwadratów to $O(n^2m)$, gdzie n to liczba cech, a m to liczba próbek danych (osobników). Z kolei złożoność metody gradient descent to $O(nmk)$, gdzie n to liczba cech, m - liczba próbek danych, a k - liczba iteracji. Stąd wynika, że dla bardzo dużych zbiorów danych (dużych macierzy), gdzie $k << m$ metoda gradient descent będzie mieć przewagę.

Zadanie 2.

Należy wyznaczyć najkrótszą ścieżkę robota pomiędzy dwoma punktami $x^{(0)}$ i $x^{(n)}$. Problemem są przeszkody usytuowane na trasie robota, których należy unikać. Zadanie polega na minimalizacji funkcji kosztu, która sprowadza problem nieliniowej optymalizacji z ograniczeniami do problemu nieograniczonego optymalizacji.

Macierz $X \in \mathbb{R}^{(n+1)\times 2}$ opisuje ścieżkę złożoną z $n+1$ punktów $x^{(0)}, x^{(1)}, x^{(2)}, ..., x^{(n)}$. Każdy punkt $x^{(i)} \in \mathbb{R}^2$. Punkty początkowy i końcowy ścieżki, $x^{(0)}$ i $x^{(n)}$, są ustalone.

Punkty z przeszkodami (punkty o 2 współrzędnych), $r^{(j)}$ dane są w macierzy przeszkód $R \in \mathbb{R}^{k\times 2}$.

W celu optymalizacji ścieżki robota należy użyć metody największego spadku. Funkcja celu użyta do optymalizacji $F\left(x^{(0)}, x^{(1)}, ..., x^{(n)}\right)$ zdefiniowana jest jako:

$$F\left(x^{(0)}, x^{(1)}, ..., x^{(n)}\right) = \lambda_1 \sum_{i=0}^{n} \sum_{j=1}^{k} \frac{1}{\epsilon + \| x^{(i)} - r^{(j)} \|^2} + \lambda_2 \sum_{i=0}^{n-1} \| x^{(i+1)} - x^{(i)} \|^2$$

Symbole użyte we wzorze mają następujące znaczenie:

- Stałe λ_1 i λ_2 określają wpływ każdego członu wyrażenia na wartość $F(X)$.
  - λ_1 określa wagę składnika zapobiegającego zbytniemu zbliżaniu się do przeszkody
  - λ_2 określa wagę składnika zapobiegającego tworzeniu bardzo długich ścieżek
- n jest liczbą odcinków, a $n + 1$ liczbą punktów na trasie robota.
- k jest liczbą przeszkód, których robot musi unikać.
- Dodanie ϵ w mianowniku zapobiega dzieleniu przez zero.

1. Wyprowadź wyrażenie na gradient ∇F funkcji celu F względem $x^{(i)}$: $\nabla F = \left[\frac{\partial F}{\partial x^{(0)}}, ..., \frac{\partial F}{\partial x^{(n)}}\right]$. Wzór wyraź poprzez wektory $x^{(i)}$ i ich składowe, wektory $r^{(j)}$ i ich składowe, $\epsilon, \lambda_1, \lambda_2, n$ i k (niekoniecznie wszystkie). Wskazówka. $\frac{\partial \|z\|^2}{\partial z} = 2z$.
2. Opisz matematycznie i zaimplementuj kroki algorytmu największego spadku z przeszukiwaniem liniowym, który służy do minimalizacji funkcji celu F. Do przeszukiwania liniowego (ang. *line search*) użyj metody złotego podziału (ang. *golden section search*). W tym celu załóż, że F jest unimodalna (w rzeczywistości tak nie jest) i że można ustalić początkowy przedział, w którym znajduje się minimum.
3. Znajdź najkrótszą ścieżkę robota przy użyciu algorytmu zaimplementowanego w w poprzednim punkcie. Przyjmij następujące wartości parametrów:

   - $n = 20, k = 50$
   - $x^{(0)} = [0, 0], x^{(n)} = [20, 20]$
   - $r^{(j)} \sim \mathcal{U}(0, 20) \times \mathcal{U}(0, 20)$
   - $\lambda_1 = \lambda_2 = 1$
   - $\epsilon = 10^{-13}$
   - liczba iteracji = 400

Ponieważ nie chcemy zmieniać położenia punktu początkowego i końcowego, $x^{(0)}, x^{(n)}$, wyzeruj gradient funkcji F względem tych punktów.

Obliczenia przeprowadź dla 5 różnych losowych inicjalizacji punktów wewnątrz ścieżki $x^{(1)}, ..., x^{(n-1)}$.

Narysuj przykładowy wykres wartości funkcji F w zależności od iteracji.

Zapewnij powtarzalność wyników, ustawiając wartość odpowiedniego ziarna.

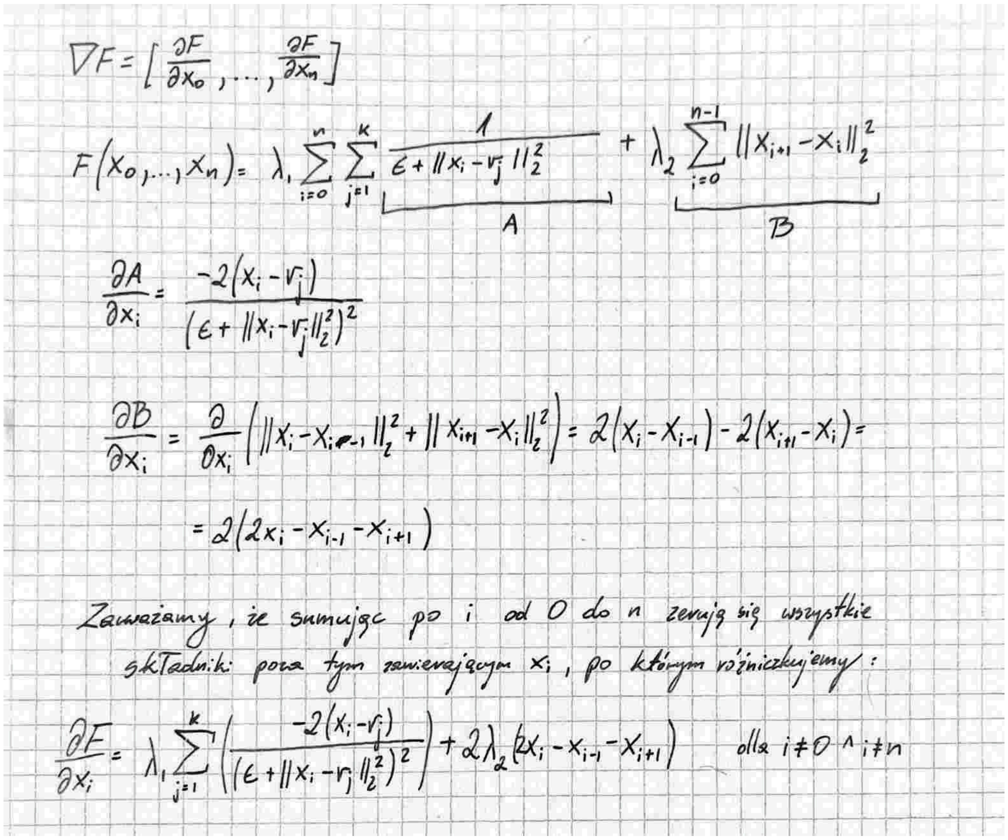


Figure 1: wyprowadzenie gradientu

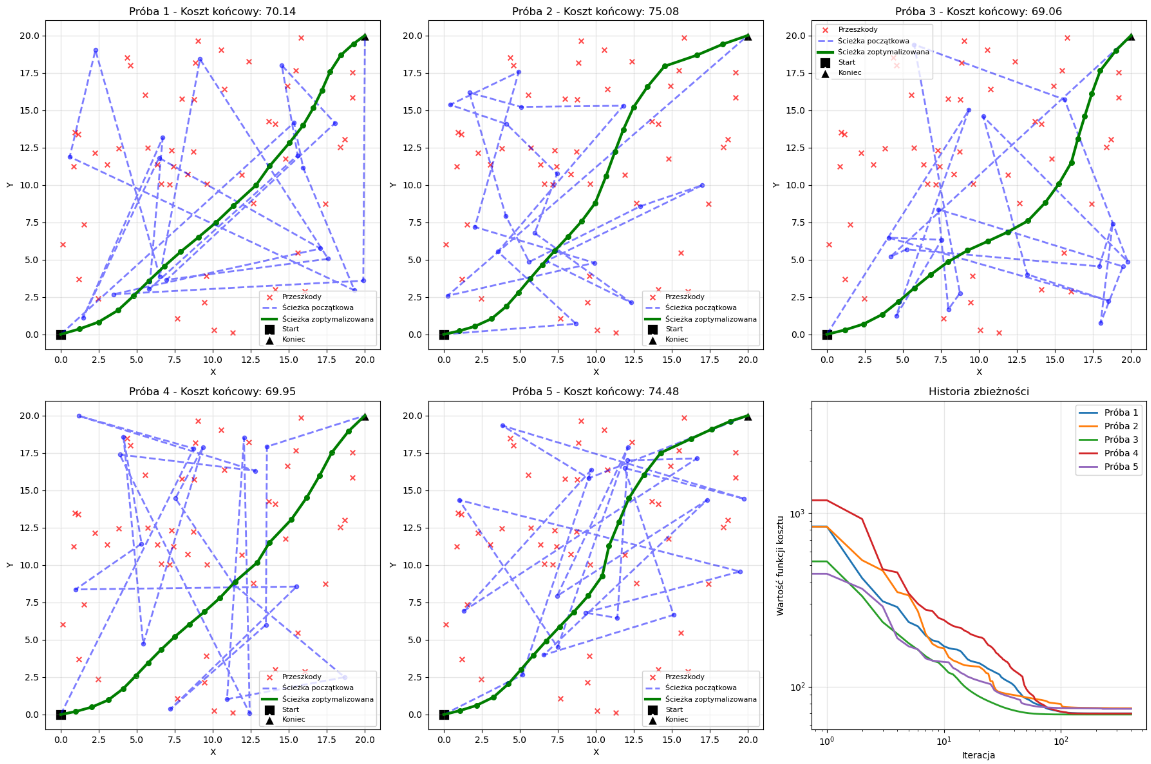
Po znalezieniu gradientu funkcji kosztu zaimplementujemy algorytm największego spadku: - inicjalizujemy punkty ścieżki i przeszkody - Powatarzamy poniższe kroki ustaloną liczbę razy (w naszym wypadku 400): - Obliczamy gradient ∇F w punkcie - Wyznaczamy optymalną wartość kroku za pomocą metody złotego podziału - Aktualizujemy punkty ścieżki

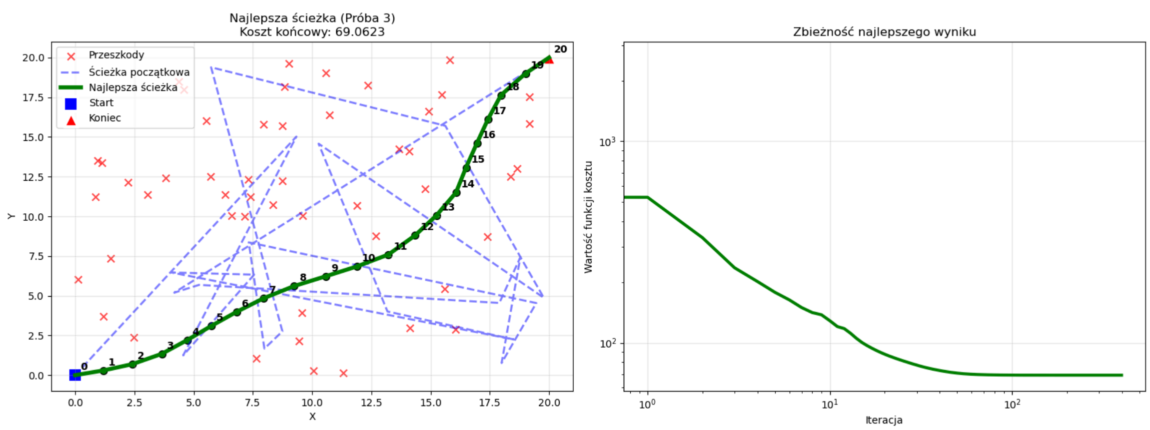
Metoda złotego podziału opiera się na wykorzystaniu szczególnych własności funkcji unimodalnej, to jest takiej, która na danym przedziale posiada dokładnie jedno minimum.

Ustalamy współczynnik t, $0 < t < 1$, a następnie powtarzamy poniższe operacje aż do uzyskania żądanej zbieżności: - Obliczamy długość przedziałów $d = t(b - a)$, - Przyjmujemy punkty $l = b - d$, $r = a + d$, - Porównujemy wartości funkcji i decydujemy, czy minimum znajduje się w przedziale lewym, czy prawym i ustawiamy odpowiednio a i b.

```
Koszty końcowe dla każdej próby:
Próba 1: 70.139501
Próba 2: 75.080737
Próba 3: 69.062293
Próba 4: 69.951910
Próba 5: 74.477471
```

Znalezione przez algorytm optymalne ścieżki ilustrują poniższe wykresy:






```
Najlepszy wynik z próby 3
Koszt końcowy: 69.062293
Liczba iteracji: 400
```