מודלים לא ליניאריים בחקר ביצועים - תרגיל בית 4

19 באפריל 2021

הנחיות להגשה:

- יש להגיש PDF עם שם קובץ HW##_ID1_ID2.
- אם יש קודים - יש לצרפם ל־PDF יחד עם הפלטים. בנוסף, יש להגיש קובץ ZIP המכיל את כל הקודים.

שאלה 1

א. כיתבו פונקציית python המממשת את שיטת הגרדיאנט עבור שיטת חיפוש קווי גנרית. הפונקציה מופעלת באופן הבא:

```
x ,fs ,gs ,ts = generic_grad(f ,gf ,lsearch ,x0 ,eps)
```

כאשר הקלטים הם:

- $\texttt{f, gf}$ – הפונקציה f והגרדיאנט ∇f בהתאמה.
- $\texttt{lsearch}$ – פונקציית חיפוש קווי. הפונקציה תופעל באמצעות $\texttt{lsearch(f, xk, gk)}$, כאשר gk הגרדיאנט של f בנקודה $\mathbf{x}^k$ והיא מחזירה את גודל הצעד שיש לבצע.
- $\texttt{x0}$ – נקודת ההתחלה של השיטה.
- $\texttt{eps}$ – רמת דיוק. השיטה תעצור כאשר $\left|f\left(\mathbf{x}^k\right)-f\left(\mathbf{x}^{k+1}\right)\right|\leq\varepsilon$.

הפונקציה מחזירה את הפלטים הבאים:

- $\texttt{x}$ – הנקודה אליה התכנסה השיטה.
- $\texttt{fs, gs}$ – מערכים שגודלם ככמות האיטרציות המחזירים את הערכים של f כך ש־$\texttt{fs(k)}=f\left(\mathbf{x}^k\right)$ ו־$\texttt{gs(k)}=\left\|\nabla f\left(\mathbf{x}^k\right)\right\|$.
- $\texttt{ts}$ – מערך שגודלו ככמות האיטרציות כך ש־$\texttt{ts(k)}$ הוא הזמן בשניות שעבר מתחילת הרצת הפונקציה ועד סוף האיטרציה ה־k. השתמשו בפקודה time.time לצורך כך.

ב. ממשו שלוש פונקציות המופעלות באופן הבא:

```
lsearch = const_step(s)
lserach = exact_quad(A)
lserach = back(alpha ,beta ,s)
```

שכל אחת מהן מחזירה פונקציית חיפוש קווי כפי שהוגדרה בסעיף הקודם. הקלט של שיטת גודל צעד קבוע הוא גודל צעד $s>0$. הקלט של חיפוש קווי מדויק הוא מטריצה $\mathbf{A}\succ 0$ (שיטה זו מחזירה גודל צעד מדויק עבור פונקציות ריבועיות בלבד מהצורה $\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x}$, כפי שראינו בתרגול). הקלטים של עקיבה לאחור הם פרמטרים $\alpha,\beta\in(0,1)$ ו־$s>0$.

יש לבדוק את תקינות הקלט של הפונקציה exact_quad(A) (כלומר, שאכן $\mathbf{A} \succ 0$). השתמשו בפקודה linalg.cholesky(A) שמחזירה שגיאה אם המטריצה לא מוגדרת חיובית. כעת, נוכל להפעיל את שיטת הגרדיאנט הגנרית באחד מהאופנים הבאים:

```
x ,fs ,gs ,ts = generic_grad(f ,gf ,const_step(s) ,x0 ,eps)
x ,fs ,gs ,ts = generic_grad(f ,gf ,back(alpha,beta,s) ,x0 ,eps)
```

ואם בנוסף f פונקציה ריבועית עם מטריצה מובילה $\mathbf{A}$ אז

```
x ,fs ,gs ,ts = generic_grad(f ,gf ,exact_quad(A) ,x0 ,eps)
```

ג. תהי $f\colon \mathbb{R}^5 \to \mathbb{R}$ המוגדרת על־ידי $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T\mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{x}$ עבור

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 100 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 6 & 100 & 8 & 9 & 10 \\ 11 & 12 & 100 & 14 & 15 \\ 16 & 17 & 18 & 100 & 20 \\ 21 & 22 & 23 & 24 & 100 \end{pmatrix}.$$

הפעילו את הפונקציה generic_grad עבור:

- גודל צעד קבוע $t^k \equiv \frac{1}{2\lambda_{\max}(\mathbf{A}^T\mathbf{A})}$ לכל $k \geq 0$ (השתמשו בפונקציה eigvals).
- חיפוש קווי מדויק (התאימו את הנוסחה אותה פיתחנו בתרגול עבור בעיית ריבועים פחותים - אין צורך לכתוב הוכחה).
- עקיבה לאחור עם $(\alpha, \beta, s) = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1\right)$.

נקודת ההתחלה עבור שלוש השיטות היא $\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}^T$ ותנאי העצירה הוא $\varepsilon = 10^{-5}$. צרפו את שלושת התרשימים הבאים:

- ערך הפונקציה f בשלוש השיטות בכל איטרציה, בסולם לוגריתמי בשני הצירים (השתמשו בפונקציה loglog).
- נורמת הגרדיאנט בשלוש השיטות בכל איטרציה, בסולם לוגריתמי בשני הצירים.
- נורמת הגרדיאנט בשלוש השיטות כפונקציה של הזמן, בסולם לוגריתמי בציר ה־y (השתמשו בפונקציה semilogy).

שאלה 2

הדמיית נתונים (Data Visualization) הוא תחום בו מציגים נתונים באופן גרפי כך שניתן יהיה לפרש אותם טוב יותר. תחת תחום זה, ב־Multidimensional Scaling (MDS) מנסים להציג באופן גרפי את השוני בין אובייקטים מתוך בסיס נתונים. לקריאה נוספת:

https://en.wikipedia.org/wiki/Data_visualization

https://en.wikipedia.org/wiki/Multidimensional_scaling

בבעיית MDS קיים בסיס נתונים $\mathcal{O}$ שבאמצעותו ניתן למדוד את השוני בין N האובייקטים שמרכיבים את $\mathcal{O}$, וכך לבנות את המטריצה $\mathbf{D}$ שנקראת Dissimilarity Matrix. זו מטריצה ריבועית וסימטרית המקיימת $\mathbf{D}_{ij} = \mathbf{D}_{ji} = \text{distance}(\mathbf{o}_i, \mathbf{o}_j) \geq 0$ כאשר $\mathbf{o}_i, \mathbf{o}_j \in \mathcal{O}$ (כלומר, הרכיב $\mathbf{D}_{ij}$ מראה כמה האובייקטים $\mathbf{o}_i$ ו־$\mathbf{o}_j$ שונים זה מזה). המטרה היא למצוא ייצוג דו־ממדי (קונפיגורציה) עבור כל אובייקט ב־$\mathcal{O}$ כך שהמרחקים

ב־$\mathbb{R}^2$ יבטאו כמה שיותר את המרחקים (שוני) בין האובייקטים. כלומר, לכל $\mathbf{o}_i \in \mathcal{O}$ נמצא $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^2$ כך ש־$\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| \approx \mathbf{D}_{ij}$. נעשה זאת על ידי פתרון בעיית המינימיזציה

$$(MDS) \quad \min_{\mathbf{X}} \mathcal{S}(\mathbf{X}) \equiv \sum_{i<j} \left(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2 - \mathbf{D}_{ij}^2 \right)^2 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \left(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2 - \mathbf{D}_{ij}^2 \right)^2$$

א. הסבירו באופן אינטואיטיבי מדוע בעיית (MDS) אכן מוצאת קונפיגורציה.

ב. הסבירו מדוע ניתן להפעיל את שיטת הגרדיאנט לפתרון (MDS). כלומר, מדוע כל האיטרציות בהכרח מוגדרות היטב. לפי התרגול, האם מובטחת התכנסות הסדרה $\left\{ \mathcal{S}\left(\mathbf{X}^k\right) \right\}_{k \geq 0}$ תחת בחירת גודל צעד נכונה?

ג. הראו (למשל, באמצעות כלל השרשרת) כי

$$\nabla \mathcal{S}(\mathbf{X}) = 4 \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^{N} (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_j) \left(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_j\|^2 - \mathbf{D}_{1j}^2 \right) \\ \sum_{j=1}^{N} (\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_j) \left(\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_j\|^2 - \mathbf{D}_{2j}^2 \right) \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^{N} (\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_j) \left(\|\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_j\|^2 - \mathbf{D}_{Nj}^2 \right) \end{pmatrix}$$

ד. נניח כי קיימים $\tilde{i} \neq \tilde{j}$ עבורם $\mathbf{D}_{\tilde{i}\tilde{j}} > 0$. הראו שכל קונפיגורציה מהצורה $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_2 = \ldots = \mathbf{x}_N \equiv \binom{c}{c} \in \mathbb{R}^2$ עבור c קבוע, היא נקודה סטציונרית של $\mathcal{S}(\mathbf{X})$.

בנוסף, הסבירו מדוע כאשר נאתחל את שיטת הגרדיאנט עם קונפיגורציה מצורה זו, אז בטוח נתכנס לקונפיגורציה מאותה הצורה. (שימו לב שזו קונפיגורציה "מנוונת" במובן שכל האובייקטים עוברים לאותה הנקודה, אפילו שידוע שיש אובייקטים עם מרחק חיובי ממש).

כעת נניח שבכנסת יש שתי מפלגות, ועל בסיס ההצבעות של חברי הכנסת אנו מעוניינים להבין באופן גרפי את השוני בין מפלגת הימין למפלגת השמאל. נתון בסיס הנתונים הבא, שבו כל שורה מייצגת הצבעות של חבר כנסת אחד, כאשר 1 משמעו בעד, -1 משמעו נגד ו־0 משמעו נמנע

$$\mathcal{O} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{8 \times 9}$$

ארבע השורות הראשונות הם חברי הכנסת מהימין, וארבע האחרונות הם חברי הכנסת מהשמאל. כמו כן, נניח שהשוני בין הצבעות חברי הכנסת נמדד באופן אוקלידי, כלומר $\mathbf{D}_{ij} = \|\mathbf{o}_i - \mathbf{o}_j\|$.

ה. השתמשו בקוד אותו כתבתם בשאלה 1 בשביל למצוא קוניפגורציה ב־$\mathbb{R}^2$ לשמונת חברי הכנסת. תנאי העצירה הוא $\left| f\left(\mathbf{x}^k\right) - f\left(\mathbf{x}^{k+1}\right) \right| \leq 10^{-5}$, וגודל הצעד נקבע לפי שיטת גודל צעד קבוע עם $t \equiv \frac{1}{1000}$. בשביל להימנע מהתכנסות לנקודות מהצורה המתוארת בסעיף ד', אתחלו את האלגוריתם עם נקודה אקראית כלשהי (השתמשו בפקודה `rand`).

שרטטו את הקונפיגורציה שהתקבלה, כך שארבעת חברי הכנסת מהימין יהיו בכחול והארבעה מהשמאל יהיו באדום (השתמשו בפקודה `scatter`). האם ניתן לומר שקיים הבדל בין מפלגת הימין למפלגת השמאל?

בנוסף, צרפו תרשים המראה את ערכי פונקציית המטרה בכל איטרציה על בסיס לוגריתמי בציר ה־y (השתמשו בפקודה `semilogy`). האם ניתן לומר שהשיטה התכנסה לאחר 1000 איטרציות?

שאלה 3

תהי $f\colon \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ המוגדרת על־ידי

$$.f(x,y) = x^2 + y^4 - y^2$$

א. מיצאו וסווגו את כל הנקודות הסטציונריות של f (מינימום/מקסימום מקומי/מקומי ממש, גלובלי/גלובלי ממש או אוכף).

ב. תהי $\left\{\left(x^k, y^k\right)\right\}_{k\geq 0}$ הסדרה הנוצרת על־ידי שיטת הגרדיאנט עבור נקודת התחלה כלשהי המקיימת $x^0 \in \mathbb{R}$ ו־$y^0 = 0$. סדרת גודלי הצעד $\left\{t^k\right\}_{k\geq 0}$ נבחרת באמצעות שיטת גודל צעד קבוע (ובמקרה זה ניתן להניח שהסדרה $f\left\{\left(x^k, y^k\right)\right\}_{k\geq 0}$ היא מונוטונית יורדת ממש), חיפוש קווי מדויק או עקיבה לאחור. הוכיחו כי $\left(x^k, y^k\right) \to (0,0)$ כאשר $k \to \infty$.

תחת ההנחה שאנו מעוניינים למצוא נקודת מינימום גלובלי של f, האם שיטת גרדיאנט עבור נקודת ההתחלה הנתונה התכנסה לנקודה כזו?

ג. לשיטת הגרדיאנט יש גרסאות רבות, מתוכן בוחרים את המתאימה ביותר לפי שיקולים שונים. אחת מהן נקראת "שיטת גרדיאנט מורעשת". צעד העדכון הכללי של השיטה הוא

$$,\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - t^k \nabla g\left(\mathbf{x}^k\right) + \beta^k$$

עבור $g\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ גזירה וכאשר $\beta^k \sim \mathrm{Noraml}\left(\mu, \sigma\right)$ לכל $k \geq 0$ (זהו וקטור עמודה מגודל n שבו כל קואורדינטה מתפלגת נורמלית עם תוחלת $\mu \in \mathbb{R}$ וסטיית תקן $\sigma \geq 0$). השתמשו בפונקציה `normrnd`.

ממשו פונקציית python המשתמשת בשיטת הגרדיאנט וגם בשיטת הגרדיאנט המורעשת למציאת נקודת מינימום גלובלי של f הנתונה. הפונקציה מופעלת באופן הבא:

```
[x, x_noise, fs, fs_noise] = ex3(mu, sigma, x0, epsilon)
```

כאשר `x` היא נקודת הפלט של הפונקציה של שיטת הגרדיאנט, `x_noise` היא נקודת הפלט של שיטת הגרדיאנט המורעשת, `fs` הוא מערך מגודל סך האיטרציות כך ש־$\texttt{fs(k)} = f\left(\mathbf{x}^k\right) + 0.25$ עבור $\left\{\mathbf{x}^k\right\}_{k\geq 0}$ הסדרה הנוצרת על־ידי שיטת הגרדיאנט ו־$\texttt{fs\_noise(k)} = f\left(\mathbf{x}^k\right) + 0.25$ עבור $\left\{\mathbf{x}^k\right\}_{k\geq 0}$ הסדרה הנוצרת על־ידי שיטת הגרדיאנט המורעשת. עבור שתי השיטות הניחו ש־$t^k \equiv \frac{1}{10}$ לכל $k \geq 0$. השתמשו בתנאי העצירה $\left|f\left(\mathbf{x}^k\right) - f\left(\mathbf{x}^{k+1}\right)\right| \leq \varepsilon$.

צרפו את הפלט של הקוד הבא:

```
[x, x_noise, fs, fs_noise] = ex3(0, 0.0005, [100;0], 10^-8);
```

כמו כן, צרפו תרשים אחד בעל סולם לוגריתמי בשני הצירים, המראה את ערכי `fs` ו־`fs_noise` כתלות בכמות האיטרציות של כל שיטה (השתמשו בפונקציה `loglog`).

איזו מהשיטות התכנסה לנקודת מינימום גלובלי של f? הסבירו את ההבדלים בתוצאות שבין השיטות (אין צורך לתת הוכחה מתמטית). בנוסף, ציינו לפחות חיסרון אחד של שיטת הגרדיאנט המורעשת ביחס לשיטת הגרדיאנט. האם ניתן להעריך מראש לאיזו נקודה תתכנס שיטת הגרדיאנט המורעשת?

שאלה 4

בהרצאה ראיתם כי כיוון האנטי־גרדיאנט הוא כיוון ירידה, ולכן "הולכים" בכיוון זה על־מנת למזער את ערך הפונקציה. בשאלה זו נראה נקודת מבט שונה על איטרציית הגרדיאנט.

א. תהי $f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ גזירה. הוכיחו כי איטרציית הגרדיאנט

$$\mathbf{x}^{k+1}=\mathbf{x}^k-t^k\nabla f\left(\mathbf{x}^k\right),\quad t^k>0,$$

שקולה לפתרון בעיית האופטימיזציה

$$\mathbf{x}^{k+1}=\underset{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n}{\operatorname{argmin}}\left\{g_k\left(\mathbf{x}\right)\equiv f\left(\mathbf{x}^k\right)+\nabla f\left(\mathbf{x}^k\right)^T\left(\mathbf{x}-\mathbf{x}^k\right)+\frac{1}{2t^k}\left\|\mathbf{x}-\mathbf{x}^k\right\|_2^2\right\}.$$

הערה: הפונקציה g_k היא פונקציה ריבועית ה"משיקה" ל־f בנקודה x^k וחוסמת את f מלמעלה. טענה זו אומרת שנקודת המינימום שלה היא הנקודה $\mathbf{x}^{k+1}$.

ב. הוכיחו כי אם $\nabla f\left(\mathbf{x}^k\right)\neq 0$ ואם בחרנו $t^k>0$ המקיים

$$f\left(\mathbf{x}\right)\leq g\left(\mathbf{x}\right),\quad\forall\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n,$$

אז $f\left(\mathbf{x}^{k+1}\right)<f\left(\mathbf{x}^k\right)$.

הערה: המשמעות היא שאם בחרנו t^k כך־g_k חוסמת מלמעלה את f, אז נקודת המינימום של g_k אכן תוביל לירידת ערכה של f.