1. *Měkké maximum* je funkce $f(\mathbf{x}) = \ln(e^{x_1} + \cdots + e^{x_n})$, kde $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$.
   (a) Spočtěte derivaci a Hessovu matici funkce f.
   (b) Pro $n = 2$ rozhodněte, zda je funkce f konvexní.

Řešení:

Derivaci spočítáme pomocí řetízkového pravidla. Pišme $f(\mathbf{x}) = g(h(\mathbf{x}))$, kde

$$h(\mathbf{x}) = e^{x_1} + \cdots + e^{x_n}$$

a $g(y) = \ln y$. Platí

$$f'(\mathbf{x}) = g'(h(\mathbf{x}))h'(\mathbf{x}).$$

Dostaneme $g'(y) = \frac{1}{y}$ a $\frac{\partial h}{\partial x_i} = e^{x_i}$, tedy $h'(\mathbf{x}) = [e^{x_1} \dots e^{x_n}] \in \mathbb{R}^{1\times n}$. Tak dostaneme

$$f'(\mathbf{x}) = \frac{1}{e^{x_1} + \cdots + e^{x_n}}[e^{x_1} \dots e^{x_n}].$$

Označme si pro jednoduchost

$$f_i := \frac{\partial f}{\partial x_i} = \frac{e^{x_i}}{e^{x_1} + \cdots + e^{x_n}}.$$

Druhé parciální derivace jsou

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j} = \begin{cases} -\frac{e^{x_i}e^{x_j}}{(e^{x_1}+\cdots+e^{x_n})^2} & i \neq j, \\ \frac{e^{x_i}}{e^{x_1}+\cdots+e^{x_n}} - \frac{e^{2x_i}}{(e^{x_1}+\cdots+e^{x_n})^2} & i = j. \end{cases}$$

To lze dále zjednodušit, pokud zavedeme značení

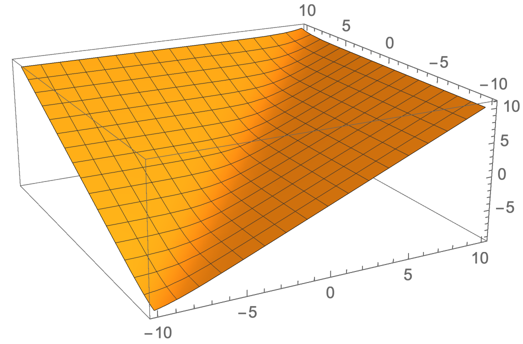
$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j. \end{cases}$$

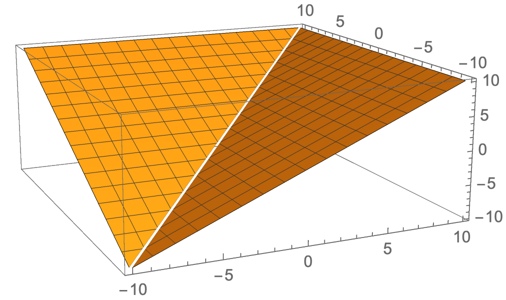
Potom totiž platí

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i} = f_i \delta_{ij} - f_i f_j, \qquad i, j = 1, \dots, n,$$

což jsou právě složky Hessovy matice $f''(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^{n\times n}$.

Předpokládejme, že $n = 2$. Na obrázku jsou funkce f a funkce $\max(x_1, x_2)$:





Ukážeme, že $f''(\mathbf{x})$ je pozitivně semidefinitní matice, což implikuje, že funkce f je konvexní. Chceme tedy ověřit, že platí $\mathbf{x}^\mathsf{T} f''(\mathbf{x})\mathbf{x} \geq 0$ pro každé $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$. Platí

$$\mathbf{x}^\mathsf{T} f''(\mathbf{x})\mathbf{x} = [x_1\ x_2] \begin{bmatrix} f_1 - f_1^2 & -f_1 f_2 \\ -f_1 f_2 & f_2 - f_2^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = f_1 x_1^2 + f_2 x_2^2 - (f_1 x_1 + f_2 x_2)^2.$$

Protože platí $f_1 + f_2 = 1$, $f_1, f_2 > 0$ a funkce $\varphi(z) = z^2$ je konvexní, dostaneme

$$f_1 x_1^2 + f_2 x_2^2 \geq (f_1 x_1 + f_2 x_2)^2.$$

Tudíž $\mathbf{x}^\mathsf{T} f''(\mathbf{x})\mathbf{x} \geq 0$.

2. Hledáme neznámé parametry $\mathbf{x} = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2$ nelineárního regresního modelu

$$p(t) = \frac{x_1 t}{x_2 + t}, \qquad t \in \mathbb{R},$$

na základě dat $(t_1, y_1), \ldots, (t_7, y_7) \in \mathbb{R}^2$.

(a) Formulujte odpovídající úlohu nelineárních nejmenších čtverců.

(b) Jak vypadá krok Gauss-Newtonovy (GN) metody?

(c) Jak vypadá krok Levenberg-Marquardtovy (LM) metody?

(d) Jak vypadá krok Newtonovy metody?

Řešení:

Definujeme nejprve jednotlivá rezidua modelu pro $i = 1, \ldots, 7$,

$$g_i(\mathbf{x}) = y_i - p(t_i) = y_i - \frac{x_1 t}{x_2 + t}$$

a dále klademe $\mathbf{g} = (g_1, \ldots, g_7)\colon \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^7$. Úloha nelineárních nejmenších čtverců je

$$\text{Minimalizuj} \qquad f(\mathbf{x}) \coloneqq \|\mathbf{g}(\mathbf{x})\|^2 = \sum_{i=1}^{7} g_i(\mathbf{x})^2, \qquad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2.$$

Jacobiho matice (derivace) zobrazení $\mathbf{g}$ v bodě $\mathbf{x}$ je matice $\mathbf{g}'(x) \in \mathbb{R}^{7\times 2}$, která má v i-tém řádku parciální derivace

$$\frac{\partial g_i}{\partial x_1} = -\frac{t_i}{x_2 + t_i}, \qquad \frac{\partial g_i}{\partial x_2} = \frac{x_1 t_i}{(x_2 + t_i)^2}.$$

Předpokládejme dále, že má matice $\mathbf{g}'(x)$ plnou sloupcovou hodnost, neboli rank $\mathbf{g}'(\mathbf{x}) = 2$. Potom je iterace GN metody tvaru

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \left[\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^\mathsf{T} \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)\right]^{-1} \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^\mathsf{T} \mathbf{g}(\mathbf{x}_k).$$

Krok LM metody je

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \left[\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^\mathsf{T}\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k) + \mu_k \mathbf{I}\right]^{-1} \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^\mathsf{T}\mathbf{g}(\mathbf{x}_k),$$

kde $\mu_k > 0$ je regularizační parametr. Pro malá μ_k tak dostaneme přibližně GN iteraci, což může pomoci urychlit konvergenci v blízkém okolí hledaného optima. Pro velká μ_k je naopak krok LM iterace přibližně iterací gradientní metody, neboť derivace funkce f je $f'(\mathbf{x}) = 2\mathbf{g}(\mathbf{x})^\mathsf{T}\mathbf{g}'(\mathbf{x})$ a platí,

$$\mathbf{x}_{k+1} \approx \mathbf{x}_k - \mu_k \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^\mathsf{T}\mathbf{g}(\mathbf{x}_k) = \mathbf{x}_k - \frac{1}{2}\mu_k f'(\mathbf{x}_k)^\mathsf{T}.$$

To nám umožnuje docílit robustnosti (spolehlivosti pro počáteční odhady daleko od optima). Newtonova metoda použitá na minimalizaci funkce f vyžaduje Hessovu matici funkce f, kterou lze vyjádřit jako

$$f''(\mathbf{x}) = 2\mathbf{g}'(\mathbf{x})^\mathsf{T}\mathbf{g}'(\mathbf{x}) + 2\sum_{i=1}^{7} g_i(\mathbf{x}) g_i''(\mathbf{x}).$$

Iterace Newtonovy metody je

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - f''(\mathbf{x}_k)^{-1} f'(\mathbf{x}_k)^\mathsf{T}.$$

Newtonova metoda konverguje kvadraticky k lokálnímu minimu v jeho blízkém okolí, ovšem vyžaduje navíc výpočet Hessovy matice a není typicky robustní vůči počátečním iteracím daleko od hledaného optima.

3. Spočtěte vzdálenost bodu $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^n$ od nadroviny popsané rovnicí $\mathbf{a}^\mathsf{T}\mathbf{x} = b$ v $\mathbb{R}^n$. Využijte výsledku k výpočtu šířky pásu mezi nadrovinami $\mathbf{a}^\mathsf{T}\mathbf{x} - b = -1$ a $\mathbf{a}^\mathsf{T}\mathbf{x} - b = 1$.

Řešení:

Označme nadrovinu $A = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{a}^\mathsf{T}\mathbf{x} = b\}$. Hledaná vzdálenost je podle definice kladnou odmocninou z optimální hodnoty úlohy

$$\min \{\|\mathbf{z} - \mathbf{x}\|^2 \mid x \in A\}.$$

Volme libovolný vektor $\mathbf{x}_0 \in A$. Potom je množina $A - \mathbf{x}_0$ lineární prostor, neboť obsahuje počátek. Původní úloha je tak ekvivalentní úloze

$$\min \{\|(\mathbf{z} - \mathbf{x}_0) - \mathbf{x}\|^2 \mid x \in A - \mathbf{x}_0\}.$$

Z lineární algebry víme, že hledaná vzdálenost je délkou ortogonální projekce vektoru $\mathbf{z} - \mathbf{x}_0$ na ortogonální doplněk $(A - \mathbf{x}_0)^\perp$ prostoru $A - \mathbf{x}_0$. Ovšem $(A - \mathbf{x}_0)^\perp$ je přímka se směrovým vektorem $\mathbf{a}$. Proto je hledaná projekce rovna

$$\mathbf{x}^* = \frac{\mathbf{a}^\mathsf{T}(\mathbf{z} - \mathbf{x}_0)}{\|\mathbf{a}\|}\frac{\mathbf{a}}{\|\mathbf{a}\|} = \frac{(\mathbf{a}^\mathsf{T}\mathbf{z} - b)\mathbf{a}}{\|\mathbf{a}\|^2}$$

a její délka

$$\|\mathbf{x}^*\| = \frac{|\mathbf{a}^\mathsf{T}\mathbf{z} - b|}{\|\mathbf{a}\|^2}\|\mathbf{a}\| = \frac{|\mathbf{a}^\mathsf{T}\mathbf{z} - b|}{\|\mathbf{a}\|}.$$

Šířka hledaného pásu odpovídá vzdálenosti libovolného bodu $\mathbf{z}$ splňujícího $\mathbf{a}^\mathsf{T}\mathbf{z} - b = -1$ od nadroviny $\mathbf{a}^\mathsf{T}\mathbf{x} - b = 1$. Víme, že to je číslo

$$\frac{|\mathbf{a}^\mathsf{T}\mathbf{z} - (b+1)|}{\|\mathbf{a}\|} = \frac{|b-1-(b+1)|}{\|\mathbf{a}\|} = \frac{2}{\|\mathbf{a}\|}.$$

4. Hledáme tři jednotkové vektory $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3 \in \mathbb{R}^3$ tak, aby byla společná hodnota skalárního součinu $\mathbf{x}_1^\mathsf{T}\mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1^\mathsf{T}\mathbf{x}_3 = \mathbf{x}_2^\mathsf{T}\mathbf{x}_3$ minimální možná.

Řešení:

Řešíme tuto úlohu: minimalizuj α za podmínek $\alpha = \mathbf{x}_1^\mathsf{T}\mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1^\mathsf{T}\mathbf{x}_3 = \mathbf{x}_2^\mathsf{T}\mathbf{x}_3$, kde $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3 \in \mathbb{R}^3$ a $\alpha \in \mathbb{R}$. Definujme matici $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{3\times 3}$ se složkami

$$\mathbf{x}_i^\mathsf{T}\mathbf{x}_j = \begin{cases} 1 & i = j, \\ \alpha & i \neq j. \end{cases}$$

Ovšem matice

$$\begin{pmatrix} \mathbf{x}_1^\mathsf{T} \\ \mathbf{x}_2^\mathsf{T} \\ \mathbf{x}_3^\mathsf{T} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \mathbf{x}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \alpha & \alpha \\ \alpha & 1 & \alpha \\ \alpha & \alpha & 1 \end{pmatrix}$$

je pozitivně semidefinitní. Podle kritéria hlavních minorů je to ekvivalentní s podmínkami

$$1 - \alpha^2 \geq 0 \qquad \text{a} \qquad 2\alpha^3 - 3\alpha^2 + 1 \geq 0.$$

Druhou nerovnost můžeme psát jako $(\alpha - 1)^2(2\alpha + 1) \geq 0$. To je ale splněno jen pro $-0.5 \leq \alpha \leq 1$, tedy optimální hodnota je $\alpha^* = -0.5$. Protože platí

$$-0.5 = \mathbf{x}_1^\mathsf{T}\mathbf{x}_2 = \cos\varphi,$$

tak stejný úhel mezi všemi dvojicemi vektorů je $\varphi = \frac{2}{3}\pi$. Z toho plyne, že optimálním řešení úlohy jsou např. takové konfigurace tří jednotkových vektorů, které mají poslední souřadnici nulovou a dělí jednotkovou kružnici v rovině $x_3 = 0$ na třetiny.

5. Najděte extrémy funkce

$$f(x,y) = x^2 + 2\,y^2$$

za podmínky $g(x,y) = 0$, kde

$$g(x,y) = x^2 - 2\,x\,y + y^2 - 6\,x + 6\,y + 9\,.$$

Řešení:

Lagrangeova funkce je

$$L(x,y,\lambda) = f(x,y) + \lambda\, g(x,y) = x^2 + 2\,y^2 + \lambda\,(x^2 - 2\,x\,y + y^2 - 6\,x + 6\,y + 9)\,,$$

gradienty

$$\begin{aligned} f'(x.y) &= (2\,x, 4\,y)\,,\\ g'(x.y) &= (2\,x - 2\,y - 6, -2\,x + 2\,y + 6)\,. \end{aligned}$$

Podmínky pro stacionární body Lagrangeovy funkce jsou

$$\begin{aligned} 0 = \mathrm{D}_1 L(x,y,\lambda) &= \frac{\partial}{\partial x} L(x,y,\lambda) = 2\,(1+\lambda)\,x - 2\,\lambda\,y - 6\,\lambda\,,\\ 0 = \mathrm{D}_2 L(x,y,\lambda) &= \frac{\partial}{\partial y} L(x,y,\lambda) = -2\,\lambda\,x + (4 + 2\,\lambda)\,y + 6\,\lambda\,. \end{aligned}$$

Můžeme si všimnout, že součet těchto rovnic je

$$0 = 2\,x + 4\,y\,,$$

tedy $x = -2\,y$; dosazením např. do první rovnice dostaneme

$$\begin{aligned} 0 &= 2\,(1+\lambda)\,x + \lambda\,x - 6\,\lambda\,,\\ x &= \frac{6\,\lambda}{3\,\lambda + 2}\,,\\ y &= \frac{-3\,\lambda}{3\,\lambda + 2}\,, \end{aligned}$$

pokud jmenovatel je nenulový. Dosazením do podmínky $g(x,y) = 0$ vyjde

$$0 = x - y - 3 = \frac{6\,\lambda + 3\,\lambda - 9\,\lambda - 6}{3\,\lambda + 2} = \frac{-6}{3\,\lambda + 2}\,,$$

což nemá řešení. Důvodem je, že nulové body funkce g nejsou regulární.

Povšimneme si, že

$$x^2 - 2\,x\,y + y^2 - 6\,x + 6\,y + 9 = (x - y - 3)^2\,,$$

takže ekvivalentní je omezující podmínka (zde označená stejně $g(x,y) = 0$) pro

$$g(x,y) = x - y - 3\,.$$

Lagrangeova funkce je

$$L(x,y,\lambda) = f(x,y) + \lambda\, g(x,y) = x^2 + 2\,y^2 + \lambda\,(x - y - 3)\,,$$

nový gradient

$$g'(x.y) = (1, -1)\,.$$

Podmínky pro stacionární body Lagrangeovy funkce jsou

$$0 = \mathrm{D}_1 L(x,y,\lambda) = \frac{\partial}{\partial x} L(x,y,\lambda) = 2\,x + \lambda\,,$$
$$0 = \mathrm{D}_2 L(x,y,\lambda) = \frac{\partial}{\partial y} L(x,y,\lambda) = 4\,y - \lambda\,.$$

Řešením této soustavy a podmínky $g(x,y) = 0$ dostaneme

$$x = \frac{-\lambda}{2}\,, \qquad y = \frac{\lambda}{4} = \frac{-x}{2}\,,$$
$$0 = x - y - 3 = \frac{3}{2}\,x - 3\,,$$
$$x = 2\,, \qquad y = -1\,.$$

Jedná se o extrém pozitivně definitní kvadratické formy na přímce, tedy globální minimum. Můžeme to ověřit i Hessovou maticí Lagrangeovy funkce

$$L''(x,y,\lambda) = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & -1 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix}\,,$$

z níž nás ale zajímá jen blok odpovídající argumentům x, y, což je pozitivně definitní matice

$$\begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}\,.$$