Методы оптимизации. ДЗ на сентябрь.

Прохоров Юрий, 776

Используемые обозначения (такие же, как на семинарах, выписал для себя):

- $\nabla f(x)$ — градиент функции $f: \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}$ по вектору x. По умолчанию является столбцом $(p \times 1)$.
- $H(x)$ — гессиан функции $f: \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}$. Является матрицей $(p \times p)$.
- $J(x)$ — якобиан функции $f: \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}^m$. Является матрицей $(m \times p)$.
- $f'(X)$ — производная функции $f: \mathbb{R}^{m \times n} \to \mathbb{R}$ по матрице X:

$$f'(X) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_{ij}}\right)_{\substack{i=1,\ldots,m \\ j=1,\ldots,n}} = (m \times n)$$

- $\langle x, y\rangle = x^T y$ — скалярное произведение векторов x и y.
- $\langle X, Y\rangle = \mathrm{tr}(A^T B) = \sum\limits_{i=1}^{n}\sum\limits_{j=1}^{m} a_{ij}b_{ij}$ — скалярное произведение матриц X и Y (одинакового размера).
- $X^{-T} = (X^{-1})^T = (X^T)^{-1}$ для квадратной невырожденной матрицы X.
- $I = E$ — единичная матрица.
- $\mathbb{S}^n_+$ — симметричные положительно полуопределенные матрицы порядка n.
- $\mathbb{S}^n_{++}$ — симметричные положительно определенные матрицы порядка n.
- $A \succ 0$ — матрица A положительно определена.
- $A \succ B$ — матрица $A - B$ положительно определена.
- $A \succeq 0$ — матрица A положительно полуопределена.
- $\mathbb{R}^n_+ = \{x \in \mathbb{R}^n \mid x_i \geq 0\}$ — векторы с неотрицательными компонентами.
- $\mathbb{R}^n_{++} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid x_i > 0\}$ — векторы с положительными компонентами.
- $\|\cdot\|_2$ — евклидова норма вектора.
- $\mathrm{int}A,\ \mathrm{relint}A$ — внутренность A, относительная внутренность A.
- $B_r(a)$ — открытый шар радиуса r с центром в точке a.
- $\mathrm{conv}A$ — выпуклая оболочка множества A.
- $\mathrm{aff}A$ — аффинная оболочка множества A.
- $\mathrm{cone}A$ — коническая оболочка множества A.
- $\mathrm{lin}A$ — линейная оболочка множества A.
- $A + B = \{a + b \mid a \in A,\quad b \in B\}$ — сумма Минковского множеств A и B.
- $\mathbb{E}\xi$ — матожидание случайной величины ξ (expected value).
- $\mathbb{V}\xi$ — дисперсия случайной величины ξ (variance).

1 Matrix calculus

Для нахождения первой и второй производной (градиента, якобиана, гессиана и т.п.) многомерных функций используется запись дифференциала функции, следующая из формулы Тейлора:

- $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$

$$df = \langle \nabla f, dx \rangle$$
$$d^2 f = \langle H dx_1, dx_2 \rangle,$$

  где dx_1 — дифференциал x при первом дифференцировании, а dx_2 — при втором.

- $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$

$$df = J dx,$$

  где $J = (m \times n)$ — якобиан функции f.

- $f : \mathbb{R}^{m \times n} \to \mathbb{R}$

$$df = \langle f'(X), dX \rangle$$

Производные старших порядков также можно получить таким образом, но они уже будут тензорами ранга ≥ 3, поэтому они не будут иметь матричного представления.

Некоторые свойства дифференцирования матриц:

1. $d(X^T) = (dx)^T$
2. $d(XY) = (dX)Y + X(dY)$
3. $d(\det X) = \det X \langle X^{-T}, dX \rangle$
4. $d(\mathrm{tr} X) = \langle I, dX \rangle$

Задача 1

Найти $\nabla f(x)$ и $H(x)$, если $f(x) = \|Ax\|_2, \ x \in \mathbb{R}^p \setminus \{0\}$.

Решение:

$f(x) = \|Ax\|_2 = \sqrt{\langle Ax, Ax \rangle}$.

$$df = \frac{d\langle Ax, Ax \rangle}{2\sqrt{\langle Ax, Ax \rangle}} = \frac{\langle Adx, Ax \rangle + \langle Ax, Adx \rangle}{2\|Ax\|_2} = \frac{\langle Ax, Adx \rangle}{\|Ax\|_2} = \left\langle \frac{A^T Ax}{\|Ax\|_2}, dx \right\rangle \qquad \Longrightarrow \qquad \nabla f(x) = \frac{A^T Ax}{\|Ax\|_2}.$$

Считаем также, что $Ax \neq 0$.

Задача 2

Найти $f''(X)$, если $f(X) = \ln \det X$. Для функции f справедливо приближение по формуле Тейлора:

$$f(X + \Delta X) \approx f(X) + \mathrm{tr}(f'(X)^T \Delta X) + \frac{1}{2} \mathrm{tr}(\Delta X^T f''(X) \Delta X).$$

Решение:

Сначала поймем, как искать производную матричной функции, которая зависит от матрицы. Такой функцией является, например, $h(X) = X^T$.

Пусть $h : \mathbb{R}^{n \times n} \to \mathbb{R}^{n \times n}$. Пусть $h_{ij}(X)$ — ее скалярные компоненты.

$$dh = \Big(dh_{ij} \Big)_{n \times n} = \Big(\langle h'_{ij}(X), dX \rangle \Big) = \Big(\mathrm{tr} h'_{ij}(X)^T dX \Big) = \Big(\mathrm{tr} B \Big),$$

где

$$B = \left(b_{ij}\right) = h'_{ij}(X)^T dX \qquad \Longrightarrow \qquad b_{ll} = \sum_{l=1}^{n} h'_{ij}(X)_{kl} dx_{kl}$$

Тогда

$$dh = \left(\sum_{l=1}^{n} b_{ll}\right) = \left(\sum_{l=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} h'_{ij}(X)_{kl} dx_{kl}\right)$$

Производная h является тензором 4 ранга, где первые два индекса соответствуют дифференцируемому выходу, а последние два — переменной, по которой ведется дифференцирование:

$$h'(X) = T_{ijkl} = \frac{\partial h_{ij}}{\partial x_{kl}}.$$

С использованием нотации Эйнштейна получаем запись

$$\boxed{dh(X) = T_{ijkl} dx_{kl} = h'(X) dX}$$

С семинара мы знаем, что

$$g(X) = \det X \qquad \Longrightarrow \qquad g'(X) = \det X \cdot X^{-T}$$

Тогда

$$df(X) = d \log \det X = \frac{\left\langle \det X \cdot X^{-T}, dX \right\rangle}{\det X} = \left\langle X^{-T}, dX \right\rangle \qquad \Longrightarrow \qquad f'(X) = X^{-T} = h(X)$$

Требуется найти $h'(X) = T_{ijkl}$. Дифференцируем тождество:

$$X^T X^{-T} = I \qquad \Longrightarrow \qquad dX^T X^{-T} + X^T d(X^{-T}) = 0$$

$$dh(X) = -X^{-T} dX^T X^{-T}$$

Зафиксируем индексы k и l, то есть найдем производную $\frac{\partial h(X)}{\partial x_{kl}}$. Обозначим через E_{kl} матрицу, в которой везде нули, кроме элемента (k, l) — там стоит единица. В таком случае

$$dX = E_{kl} dx_{kl}.$$

Тогда дифференциал $h(X)$ запишется в виде

$$dh(X) = -X^{-T} E_{kl}^T X^{-T} dx_{kl} \qquad \Longrightarrow \qquad \frac{\partial h(X)}{\partial x_{kl}} = -X^{-T} E_{lk} X^{-T}$$

Итак, при фиксированных индексах k, l:

$$f''(X)_{kl} = -X^{-T} E_{lk} X^{-T},$$

то есть это срез тензора 4 ранга по последним двум индексам.

Задача 3

Вычислить производную квадрата нормы Фробениуса матрицы X, т.е. $f'(X)$, если $f(X) = \|X\|_F^2$.

Решение:

$f(X) = \|X\|_F^2 = \mathrm{tr}(X^T X) = \langle X, X \rangle.$

$df = \langle 2X, dX \rangle \qquad \Longrightarrow \qquad f'(X) = 2X.$

Задача 4

Найти $\nabla f(x)$, если $f(x) = \ln\langle Ax, x\rangle,\ A \in \mathbb{S}^n_{++}$ — симметричная положительно определенная матрица.

Решение:

$$df = \frac{d\langle Ax, x\rangle}{\langle Ax, x\rangle} = \frac{\langle Adx, x\rangle + \langle Ax, dx\rangle}{\langle Ax, x\rangle} = \left\langle \frac{(A + A^T)x}{\langle Ax, x\rangle}, dx \right\rangle = \left\langle \frac{2Ax}{\langle Ax, x\rangle}, dx \right\rangle \quad \Longrightarrow \quad \nabla f(x) = \frac{2Ax}{\langle Ax, x\rangle},\ x \neq 0.$$

2 Convex sets

Способы проверить выпуклость множества:

- По определению:

  Множество S называется *выпуклым*, если

  $$\forall x, y \in S \ \ \forall \lambda \in [0,1] \quad \rightarrow \quad \lambda x + (1-\lambda)y \in S;$$

- Пересечение любого (даже несчетного) числа выпуклых множеств — выпуклое множество;
- Образ и прообраз выпуклого множества при аффинном отображении ($f(x) = Ax + b$) — выпуклые множества.

Задача 1

(a) Доказать, что если S выпукло, то и его внутренность $\text{int}S$ выпукла.

(b) Верно ли обратное?

Решение:

Сначала покажем, что если U открыто, то для любого множества A множество $A+U$ открыто.

Пусть $a + u \in A + U$, где $a \in A,\ u \in u + B_\varepsilon(0) \subset U$. Тогда $a + u \in a + u + B_\varepsilon(0) \subset A + U$, то есть $a + u$ — внутренняя точка.

(a) Имеем, что S выпукло, значит, $\forall \lambda \in [0,1]$ выполнено $\lambda S + (1-\lambda)S \subseteq S$. Так как $\text{int}S \subseteq S$, то верно

$$\text{int}S + (1-\lambda)\text{int}S \subseteq S$$

По доказанному выше, множество в левой части открыто, значит оно содержится в $\text{int}S$. А это и есть определение выпуклости $\text{int}S$.

(b) Обратное неверно. $S = \{0,\ 1\} \subset \mathbb{R}$, $\text{int}S = \varnothing$. Пустое множество выпукло по определению, а множество из двух точек на прямой не выпукло.

Задача 2

Доказать, что множество положительно определенных симметричных матриц $\mathbb{S}^n_{++}$ выпукло.

Решение:

Пусть $A, B \succ 0$. Это означает, что $\forall x \in \mathbb{R}^n$ $(x \neq 0)$ выполнено $x^TAx > 0,\ x^TBx > 0$.

Пусть $\lambda \in [0,1]$. Тогда для $C = \lambda A + (1-\lambda)B$:

$$x^TCx = \lambda x^TAx + (1-\lambda)x^TBx > 0$$

Значит, $C \succ 0$ и $\mathbb{S}^n_{++}$ выпукло.

Задача 3

Доказать, что множество $S = \left\{ x \in \mathbb{R}^n_+ \ \middle|\ \prod_{i=1}^n x_i \geq 1 \right\}$ выпукло.

Указание: $\forall \theta \in (0,1)\ \ \forall a, b \geq 0 \quad \rightarrow \quad \theta a + (1-\theta)b \geq a^\theta b^{1-\theta}$.

Решение:

Пусть $x, y \in S, \quad \lambda \in (0,1)$. Проверим принадлежность S произвольной выпуклой комбинации x и y:

$$\prod_{i=1}^{n} z_i = \prod_{i=1}^{n} (\lambda x_i + (1-\lambda) y_i) \geq \prod_{i=1}^{n} x_i^{\lambda} y_i^{1-\lambda} = \left(\prod_{i=1}^{n} x_i \right)^{\lambda} \left(\prod_{i=1}^{n} y_i \right)^{1-\lambda} \geq 1^{\lambda} \cdot 1^{1-\lambda} = 1$$

Значит, $z \in S$ и S выпукло.

Задача 4

Пусть $S \subseteq \mathbb{R}^n$. Доказать, что

$$S \text{ выпукло} \qquad \Longleftrightarrow \qquad \forall \alpha, \beta \geq 0 \qquad (\alpha + \beta) S = \alpha S + \beta S$$

Решение:

(a) Необходимость. Пусть S выпукло, $\alpha, \beta \geq 0$. Требуется показать два включения. Считаем $\alpha + \beta > 0$, так как случай $\alpha = \beta = 0$ тривиален.

- Пусть $x \in (\alpha + \beta) S$. Тогда $\exists y \in S : \quad x = (\alpha + \beta) y$. Тогда $\alpha y \in \alpha S, \ \beta y \in \beta S$ и выполнено:

$$x = \alpha y + \beta y \qquad \Longrightarrow \qquad x \in \alpha S + \beta S$$

- Пусть $x \in \alpha S + \beta S$. Тогда $\exists y_1, y_2 \in S : \quad x = \alpha y_1 + \beta y_2$. S выпукло, значит,

$$\frac{x}{\alpha + \beta} = \frac{\alpha}{\alpha + \beta} y_1 + \frac{\beta}{\alpha + \beta} y_2 \in S \qquad \Longrightarrow \qquad x \in (\alpha + \beta) S$$

(b) Достаточность. Пусть $x, y \in S, \quad \lambda \geq 0$. При $\alpha = \lambda, \quad \beta = 1 - \lambda$:

$$S = \lambda S + (1-\lambda) S \qquad \Longrightarrow \qquad \lambda x + (1-\lambda) y \in S$$

Значит, S выпукло.

Задача 5

Пусть x — дискретная случайная величина такая, что

$$\mathbb{P}\{x = a_i\} = p_i, \qquad a_1 < a_2 < \ldots < a_n.$$

Проверить выпуклость следующих множеств (относительно векторов $p \in \mathbb{R}^n$, задающих с.в. x):

(a) $\mathbb{P}\{x > \alpha\} \leq \beta$;

(b) $\mathbb{E}|x^{201}| \leq \alpha \mathbb{E}|x|$;

(c) $\mathbb{E}x^2 \geq \alpha$;

(d) $\mathbb{V}x \geq \alpha$

Решение:

На семинаре мы показали, что множество всех векторов p, которые вообще могут задавать случайную величину:

$$P = \left\{ p \in \mathbb{R}^n \ \middle| \ \mathbf{1}^T p = 1, \ p_i \geq 0 \right\} \quad \text{— вероятностный симплекс}$$

является выпуклым множеством. В силу того, что пересечение выпуклых множеств выпукло, во всех пунктах задачи можно не учитывать, что вектор p должен лежать в вероятностном симплексе (так как потом можно просто пересечь те множества с P).

Через S будем обозначать множество в условии задачи.

(a) Если α больше всех a_i, то $\mathbb{P}\{x > \alpha\} = 0$, и в зависимости от β множество S в условии задачи будет равно либо $\varnothing$, либо всему $\mathbb{R}^n$, то есть будет выпуклым.

Пусть α лежит левее k-ого значения с.в. $x: \quad \alpha < a_k$. Тогда

$$\mathbb{P}\{x > \alpha\} = \sum_{i=k}^{n} a_i p_i \geq \beta$$

Пусть $p, q \in S$. Тогда для их выпуклой комбинации выполнено:

$$\sum_{i=k}^{n} a_i \big(\lambda p_i \ + (1-\lambda) q_i\big) = \lambda \sum_{i=k}^{n} a_i p_i + (1-\lambda) \sum_{i=k}^{n} a_i q_i \geq \lambda\beta + (1-\lambda)\beta = \beta$$

Значит, S выпукло.

(b) Для краткости: $m = 201$. Пусть $p, q \in S$, то есть

$$\sum_{i=1}^{n} |a_i^m|\, p_i \leq \alpha \sum_{i=1}^{m} |a_i| p_i, \qquad \sum_{i=1}^{n} |a_i^m|\, q_i \leq \alpha \sum_{i=1}^{m} |a_i| q_i$$

Тогда для их выпуклой комбинации выполнено:

$$\sum_{i=1}^{n} |a_i^m| \left(\lambda p_i + (1-\lambda) q_i\right) \leq \lambda\alpha \sum_{i=1}^{m} |a_i| p_i + (1-\lambda)\alpha \sum_{i=1}^{m} |a_i| q_i = \alpha \sum_{i=1}^{n} |a_i| \left(\lambda p_i + (1-\lambda) q_i\right)$$

Значит, S выпукло.

(c) Аналогично пунктам (a) и (b), граница S является гиперплоскостью, значит, S — полупространство, значит, S выпукло.

(d) Распишем дисперсию:

$$\mathbb{V}x = \mathbb{E}x^2 - (\mathbb{E}x)^2 = \sum_{i=1}^{n} a_i^2 p_i - \left(\sum_{i=1}^{n} a_i p_i\right)^2 = b^T p - \left(a^T p\right)^2, \qquad b_i = a_i^2$$

Пусть $p, q \in S$. Тогда для их выпуклой комбинации (раскрываем скобки): $z = \lambda p + (1-\lambda) q$

$$\mathbb{V}x = b^T z - (a^T z)^2 = \lambda b^T p + (1-\lambda) b^T q - \lambda^2 (a^T p)^2 - 2\lambda(1-\lambda) a^T p a^T q - (1-\lambda)^2 (a^T q)^2$$

Оцениваем снизу $b^T p \geq (a^T p)^2 + \alpha$ и аналогично для q:

$$\mathbb{V}x \geq \lambda\alpha + (1-\lambda)\alpha + (\lambda - \lambda^2)(a^T p)^2 + \big((1-\lambda) - (1-\lambda^2)\big)(a^T q)^2 - 2\lambda(1-\lambda) a^T p a^T q$$

Выделяем полный квадрат:

$$\mathbb{V}x \geq \alpha + \lambda(1-\lambda)\Big((a^T p)^2 + (a^T q)^2 - 2(a^T p)(a^T q)\Big) = \alpha + \lambda(1-\lambda)\big(a^T p - a^T q\big)^2 \geq \alpha$$

Значит, S выпукло.

3 Projections

Проекцией точки $y \in \mathbb{R}^n$ *на множество* $S \subset \mathbb{R}^n$ называется точка $\pi = \pi_S(y) \in S$, если

$$\forall x \in S \quad \to \quad \|\pi - y\| \le \|\pi - x\|$$

Проекция может вообще не существовать, быть единственна, или их может быть много.

Если S открыто, а $y \notin S$, то проекции не существует.

Если S выпукло и замкнуто, то проекция существует и единственна (*теорема Рисса*) и выполнено

$$\forall x \in S: \quad \langle \pi - y,\ x - \pi \rangle \ge 0 \qquad \Longleftrightarrow \qquad \pi_S(y) = \pi$$

Если S — аффинное подпространство, то

$$\forall x \in S: \quad \langle \pi - y,\ x - \pi \rangle = 0 \qquad \Longleftrightarrow \qquad \pi_S(y) = \pi$$

Теорема о сингулярном разложении (SVD)

Пусть $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ — произвольная вещественная матрица ранга r. Тогда при $m > n$:

$$A = V \Sigma W^T,$$

- $V = (m \times m), \quad W = (n \times n)$ — ортогональные матрицы,
- $\Sigma = (m \times n)$ — матрица с r ненулевыми элементами:

$$\sigma_j = \sqrt{\lambda_j} \ \text{ — сингулярные числа матрицы } A^T A \text{ в порядке убывания}$$

- Столбцы V — собственные векторы AA^T, столбцы W — собственные векторы $A^T A$.

Также в решении задач используется следующая теорема:

3.3.16 Theorem. Let $A, B \in M_{m,n}$ be given and let $q = \min\{m,n\}$. The following inequalities hold for the decreasingly ordered singular values of A, B, and $A + B$:

(a) $\sigma_{i+j-1}(A + B) \le \sigma_i(A) + \sigma_j(B)$ (3.3.17)

(b) $\sigma_{i+j-1}(AB^*) \le \sigma_i(A)\sigma_j(B)$ (3.3.18)

for $1 \le i, j \le q$ and $i + j \le q + 1$. In particular,

(c) $|\sigma_i(A + B) - \sigma_i(A)| \le \sigma_1(B)$ for $i = 1,\dots, q$ (3.3.19)

and

(d) $\sigma_i(AB^*) \le \sigma_i(A)\sigma_1(B)$ for $i = 1,\dots, q$ (3.3.20)

Она приведена в учебнике “Topics in matrix analysis” на странице 178.

Задача 1(a)

Пусть $X \in \mathbb{R}^{m \times n},\ m \ge n$. Найти проекцию матрицы X на множество

$$S = \left\{ A \in \mathbb{R}^{m \times n} \;\middle|\; \mathrm{rg} A \le k \right\}, \qquad k \le n \le m$$

по норме Фробениуса.

В условии задачи во множестве S должны лежать матрицы только ранга k. Но в такой постановке нулевая матрица не будет иметь проекции, потому что ее можно сколь угодно точно приблизить матрицей ранга k. В связи с этим будет считать, что в S лежат матрицы ранга не выше k.

Решение:

Факт, доказываемый в этой задаче, носит название *теоремы Эккарта-Янга.*

Пусть $X = U\Sigma V^T$ — сингулярное разложение матрицы X. Пусть u_i, v_i — столбцы матриц U и V соответственно. Тогда

$$X = U\Sigma V^T = \sum_{i=1}^{n} \sigma_i u_i v_i^T$$

Утверждается, что проекцией X на S будет матрица

$$X_k = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i u_i v_i^T,$$

то есть усеченное сингулярное разложение (сингулярные числа в порядке убывания). Докажем это.

Надо показать, что для любой матрицы Y_k ранга не выше k выполнено:

$$\|X - X_k\|_F \leq \|X - Y_k\|_F$$

Квадрат нормы Фробениуса любой матрицы есть сумма квадратов ее сингулярных чисел:

$$\left\|X\right\|_F^2 = \mathrm{tr}(X^T X) = \sum_{i=1}^{n} \mathrm{eig}(X^T X) = \sum_{i=1}^{n} \sigma_i^2$$

Тогда

$$\left\|X - X_k\right\|_F^2 = \left\|\sum_{i=1}^{k} \sigma_i u_i v_i^T\right\|_F^2 = \sum_{i=k+1}^{n} \sigma_i^2$$

Введем обозначение $\sigma_j(Q)$ — j-ое сингулярное число матрицы Q. $\sigma_1(Q) = \|Q\|_2$ — спектральная норма.

Для произвольных матриц P и Q выполнено при $i, j \geq 1$ (см. теорему выше):

$$\sigma_i(P) + \sigma_j(Q) \geq \sigma_{i+j-1}(P + Q)$$

Положим $P = X - Y_k, \quad Q = Y_k$, тогда при $i \geq 1, \ j = k + 1$ имеем:

$$\sigma_i(X - Y_k) + \sigma_{k+1}(Y_k) = \sigma_i(X - Y_k) + 0 \geq \sigma_{i+k}(X)$$

Отсюда имеем оценку

$$\|X - Y_k\|_F^2 = \sum_{i=1}^{n} \Big[\sigma_i(X - Y_k)\Big]^2 \geq \sum_{i=1}^{n-k} \Big[\sigma_i(X - Y_k)\Big]^2 \geq \sum_{i=1}^{n-k} \Big[\sigma_{i+k}(X)\Big]^2 = \|X - X_k\|_F^2,$$

что и требовалось доказать.

Задача 1(b)

Пусть $X \in \mathbb{R}^{m \times n}, \ m \geq n$. Найти проекцию матрицы X на множество

$$S = \left\{ A \in \mathbb{R}^{m\times n} \ \middle| \ \mathrm{rg} A \leq k \right\}, \qquad k \leq n \leq m$$

по спектральной норме.

Решение:

Будем использовать обозначения пункта (а).

Покажем, что проекция в случае спектральной нормы такая же, как и в случае нормы Фробениуса:

$$X_k = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i u_i v_i^T$$

Надо показать, что для любой матрицы Y_k ранга не выше k выполнено:

$$\|X - X_k\|_2 \leq \|X - Y_k\|_2 \qquad \Longleftrightarrow \qquad \sigma_1(X - X_k) = \sigma_{k+1}(X) \leq \sigma_1(X - Y_k)$$

Заметим, что именно последнее неравенство и следует из теоремы, выписанной перед решением задачи, при $i = 1,\ j = k + 1$.

4 Convex functions

Способы проверить (нестрогую) выпуклость функции:

- По определению:

  Функция $f: S \longrightarrow \mathbb{R}$, определенная на *выпуклом* множестве $S \subseteq \mathbb{R}^n$, называется *выпуклой на* S, если
  $$\forall x, y \in S \;\; \forall \lambda \in [0,1] \quad \to \quad f\big(\lambda x + (1-\lambda)y\big) \leq \lambda f(x) + (1-\lambda) f(y)$$

- Дифференциальный критерий 1-го порядка:

  Пусть f дифференцируема на S. Тогда f выпукла на S тогда и только тогда, когда
  $$\forall x, y \in S \quad \to \quad f(y) \geq f(x) + \big(\nabla f(x)\big)^T (y - x),$$
  то есть в каждой точке можно провести касательную гиперплоскость, являющуюся глобальной нижней оценкой.

- Дифференциальный критерий 2-го порядка:

  Пусть f дважды дифференцируема на S. Тогда f выпукла тогда и только тогда, когда
  $$\forall x \in \mathrm{relint} S \quad \to \quad H(x) = \nabla^2 f(x) \succeq 0,$$
  то есть гессиан f является положительно полуопределенной матрицей.

- Ограничение на прямую:

  Пусть $f: S \longrightarrow \mathbb{R}$, $S \subseteq \mathbb{R}^n$ — выпукло. Пусть $x \in S$, $v \in \mathbb{R}^n$. Определим на выпуклом множестве $T = \{t \mid x + tv \in S\} \subseteq \mathbb{R}$ функцию числового аргумента g:
  $$g: T \longrightarrow \mathbb{R}, \qquad g(t) = f(x + tv)$$
  Тогда функция f выпукла на S тогда и только тогда, когда
  $$\forall x \in S, \; v \in \mathbb{R}^n \;\; \text{функция } g \text{ выпукла на } T.$$

Чтобы проверить *строгую выпуклость* нужно во всех критериях поменять знаки неравенств на строгие.

Способы проверить μ-сильную выпуклость:

- По определению:

  Функция $f: S \longrightarrow \mathbb{R}$, определенная на *выпуклом* множестве $S \subseteq \mathbb{R}^n$, называется *μ-сильно выпуклой на* S или просто *сильно выпуклой*, если
  $$\exists \mu > 0 \;\; \forall x, y \in S \;\; \forall \lambda \in [0,1] \quad \to \quad f\big(\lambda x + (1-\lambda)y\big) \leq \lambda f(x) + (1-\lambda) f(y) - \mu\lambda(1-\lambda)\|x - y\|$$

- Дифференциальный критерий 1-го порядка:

  Пусть f дифференцируема на S. Тогда f сильно выпукла на S тогда и только тогда, когда
  $$\exists \mu > 0 \;\; \forall x, y \in S \quad \to \quad f(y) \geq f(x) + \big(\nabla f(x)\big)^T (y - x) + \frac{\mu}{2}\|y - x\|^2,$$
  то есть в каждой точке можно провести касательную параболу, являющуюся глобальной нижней оценкой.

- Дифференциальный критерий 2-го порядка:

  Пусть f дважды дифференцируема на S. Тогда f сильно выпукла тогда и только тогда, когда
  $$\exists \mu > 0 \;\; \forall x \in \mathrm{relint} S \quad \to \quad H(x) = \nabla^2 f(x) \succeq \mu I,$$
  то есть матрица $\big(\nabla^2 f(x) - \mu I\big)$ является положительно полуопределенной матрицей.

Функция f называется *вогнутой*, если функция $(-f)$ выпукла.

Задача 1

Пусть $X \in \mathbb{S}^n_{++}$. Доказать, что

(a) функция $f(X) = \mathrm{tr} X^{-1}$ выпукла;

(b) функция $g(X) = (\det X)^{\frac{1}{n}}$ вогнута.

Решение:

(a) Воспользуемся способом ограничения на прямую. Пусть $X \in \mathbb{S}^n_{++},\ Y \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Требуется показать, что функция

$$h(t) = f(X + tY) = \mathrm{tr}\big(X + tY\big)^{-1}$$

выпукла на множестве $T = \big\{t \mid X + tY \in \mathbb{S}^n_{++}\big\}$. Чтобы $T \neq \varnothing$, необходимо, чтобы матрица Y была симметричной.

Преобразуем $h(t)$:

$$h(t) = \mathrm{tr}\big(X + tY\big)^{-1} = \mathrm{tr}\big(I + tX^{-1}Y\big)^{-1}X^{-1} = \mathrm{tr}X^{-1}\big(I + tP\Lambda P^T\big)^{-1},$$

где $X^{-1}Y = P\Lambda P^T$ — диагонализация симметричной матрицы $X^{-1}Y$. Здесь также используется, что след произведения симметричных матриц не зависит от порядка их перемножения.

Во втором равенстве ниже домножим слева на $I = PP^T$ и учтем, что ортогональные преобразования не меняют след.

$$h(t) = \mathrm{tr}\Big(X^{-1}P\big(I + t\Lambda\big)^{-1}P^T\Big) = \mathrm{tr}\Big(P^TX^{-1}P\big(I + t\Lambda\big)^{-1}\Big) = \sum_{k=1}^{n}\big(P^TX^{-1}P\big)_{kk}\cdot\frac{1}{1 + t\lambda_k} = \sum_{k=1}^{n}\frac{c_k}{1 + \lambda_k t}$$

Известно, что если $A, B \succeq 0$ и AB — симметричная матрица, то $AB \succeq 0$.

Данный факт доказан в учебнике A.R. Meenakshi, C. Rajian, “Linear Algebra and its Applications”, Volume 295, Issues 1–3, 1 July 1999, Pages 3–6.

В нашем случае $A = X^{-1} \succ 0,\ B = X + tY \succ 0$. Значит, $AB = I + tX^{-1}Y \succeq 0$, то есть выполнено

$$1 + \lambda_k t \geq 0 \quad \forall k \quad \forall t \in T \qquad \Longrightarrow \qquad \text{функции } \frac{c_k}{1 + \lambda_k t} \text{ выпуклы на } T$$

Тогда и $h(t)$ выпукла как сумма выпуклых функций.

(b) Воспользуемся способом ограничения на прямую. Пусть $X \in \mathbb{S}^n_{++},\ Y \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Требуется показать, что функция

$$h(t) = -g(X + tY) = -\big(\det(X + tY)\big)^{\frac{1}{n}}$$

выпукла. Снова считаем Y симметричной матрицей. Преобразуем $h(t)$:

$$h(t) = -(\det X)^{\frac{1}{n}}\big(\det(I + tX^{-1}Y)\big)^{\frac{1}{n}} = -C\left(\prod_{k=1}^{n}(1 + \lambda_k t)\right)^{\frac{1}{n}}$$

Аналогично пункту (a), все $1 + \lambda_k t > 0$. В задаче 4 будет доказано, что геометрическое среднее

$$F(x) = \left(\prod_{k=1}^{n} x_k\right)^{\frac{1}{n}}$$

является вогнутой функцией на $\mathbb{R}^n_{++}$.

Пусть $F(x),\ x \in \mathbb{R}^n$ — вогнута, т.е. $\nabla^2 F \preceq 0$. Пусть также все $f_k(t)$ выпуклы, то есть $f'' \geq 0$, а функция F убывает по каждому аргументу: $\nabla F \preceq 0$. Тогда

$$h(t) = F(f_1, \ldots, f_n) \qquad \Longrightarrow \qquad h'' = \langle f',\ \nabla^2 F f'\rangle + \langle \nabla F,\ f''\rangle \leq 0$$

Это означает, что функция h тоже вогнута.

Тогда функция $h(t)$ является выпуклой.

Задача 2

Пусть $p, q \in \mathbb{R}^n_{++}$. Доказать, что для дивергенции Кульбака-Лейблера:

$$D(p,q) = \sum_{k=1}^{n} \left(p_k \log \frac{p_k}{q_k} - p_k + q_k \right)$$

выполнено:

$$D(p,q) \geq 0, \qquad D(p,q) = 0 \iff p = q$$

Указание: функция $D(p,q)$ представима в виде

$$D(p,q) = f(p) - f(q) - \nabla f(q)^T (p-q), \qquad \text{где } f(p) = \sum_{k=1}^{n} p_k \log p_k$$

Решение:

Сначала отметим, что функция f строго выпукла на $\mathbb{R}^n_{++}$:

$$\nabla^2 f(p) = \mathrm{diag}\left(\frac{1}{p_1}, \ldots, \frac{1}{p_n}\right) \succ 0$$

По дифференциальному критерию первого порядка, при $p \neq q$

$$f(p) > f(q) + \nabla f(q)^T (p-q) \qquad \iff \qquad D(p,q) > 0$$

Равенство достигается при $p = q$.

Задача 3

Пусть x — дискретная случайная величина такая, что

$$\mathbb{P}\{x = a_i\} = p_i, \qquad a_1 < a_2 < \ldots < a_n.$$

Проверить выпуклость или вогнутость следующих функций на множестве $P = \left\{p \in \mathbb{R}^n \;\middle|\; \mathbf{1}^T p = 1,\ p_i \geq 0\right\}$:

(a) $\mathbb{E}x$;

(b) $\mathbb{P}\{x \geq \alpha\}$;

(c) $\mathbb{P}\{\alpha \leq x \leq \beta\}$;

(d) $\sum\limits_{i=1}^{n} p_i \log p_i$;

(e) $\mathbb{V}x$;

(f) $\mathrm{quartile}(x) = \inf\left\{\beta \;\middle|\; \mathbb{P}\{x \leq \beta\} \geq \frac{1}{4}\right\}$.

Решение:

(a), (b), (c) В этих случаях функции являются линейными:

$$\mathbb{E}x = \sum_{i=1}^{n} a_i p_i, \qquad \mathbb{P}\{x \geq \alpha\} = \sum_{i=k}^{n} p_i, \qquad \mathbb{P}\{\alpha \leq x \leq \beta\} = \sum_{i=k}^{m} p_i$$

Их гессиан равен 0, значит, эти функции и выпуклы, и вогнуты.

(d) Функция строго выпукла, так как ее гессиан является положительно определенной матрицей:

$$\nabla^2 f(p) = \mathrm{diag}\left(\frac{1}{p_1}, \ldots, \frac{1}{p_n}\right) \succ 0$$

(e) Распишем дисперсию:

$$\mathbb{V}x = \sum_{i=1}^{n} a_i^2 p_i - \left(\sum_{i=1}^{n} a_i p_i\right)^2 = b^T p - p^T a a^T p, \qquad \text{где } b_i = a_i^2$$

Гессианом этой функции является матрица $H = -2aa^T$. Легко видеть, что она отрицательно полуопределена:

$$x^T(-2aa^T)x = -2\langle x, a\rangle^2 \leq 0, \qquad \forall x \in \mathbb{R}^n$$

Поэтому дисперсия случайной величины — вогнутая функция.

(f) Заметим, что в случае дискретной случайной величины квартилем является:

$$f(p) = \text{quartile}(x) = \min\left\{a_k \;\middle|\; \sum_{i=1}^{k} p_i \geq \frac{1}{4}\right\}$$

Нестрогое рассуждение: квартиль, в случае дискретной случайной величины, является ступенчатой функцией. Ступенчатая функция не может быть ни выпуклой, ни вогнутой, так как ее надграфик и подграфик не являются выпуклыми множествами.

Покажем, что f не является выпуклой:

$$p = \left(\frac{1}{4},\ \frac{3}{4}\right), \qquad q = (0,\ 1)\,, \qquad a = (0, 1000), \qquad \lambda = \frac{1}{2}$$

Тогда при $z = \lambda p + (1-\lambda)q = \left(\frac{1}{8},\ \frac{7}{8}\right)$:

$$f(z) = 1000, \qquad \lambda f(p) + (1-\lambda)f(q) = 500 \qquad \Longrightarrow \qquad \text{нарушается определение выпуклости}$$

Покажем, что f не является вогнутой:

$$p = (1,\ 0)\,, \qquad q = (0,\ 1)\,, \qquad a = (0, 1000), \qquad \lambda = \frac{1}{2}$$

Тогда при $z = \lambda p + (1-\lambda)q = \left(\frac{1}{2},\ \frac{1}{2}\right)$:

$$f(z) = 0, \qquad \lambda f(p) + (1-\lambda)f(q) = 500 \qquad \Longrightarrow \qquad \text{нарушается определение вогнутости}$$

Задача 4

Проверить выпуклость или вогнутость функций:

(a) $a(x) = \dfrac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} x_k$ — арифметическое среднее в $\mathbb{R}^n$;

(b) $g(x) = \left(\prod_{k=1}^{n} x_k\right)^{\frac{1}{n}}$ — геометрическое среднее в $\mathbb{R}^n_{++}$.

Решение:

(a) Это линейная функция, ее гессиан равен 0, значит, $a(x)$ как выпукла, так и вогнута.

(b) $g(x)$ — вогнутая функция. Покажем это.

$$\nabla g(x) = \frac{g(x)}{n}\begin{pmatrix} \vdots \\ x_k^{-1} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

По дифференциальному критерию первого порядка, достаточно показать, что $\forall x, y \in \mathbb{R}^n_{++}$:

$$g(y) \leq g(x) + \nabla g(x)^T (y - x)$$

Преобразуем это выражение: сначала поделим все на $g(x) \neq 0$:

$$\left(\prod_{k=1}^{n} \frac{y_k}{x_k} \right)^{\frac{1}{n}} \leq 1 + \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \frac{y_k - x_k}{x_k}$$

$$\left(\prod_{k=1}^{n} \frac{y_k}{x_k} \right)^{\frac{1}{n}} \leq \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \frac{y_k}{x_k}$$

Последнее неравенство выполнено, будучи *неравенством Коши о средних*: среднее геометрическое не превосходит среднего арифметического.

Задача 5

Доказать, что следующая функция выпукла на множестве всех положительных знаменателей:

$$f(x) = \cfrac{1}{x_1 - \cfrac{1}{x_2 - \cfrac{1}{x_3 - \cfrac{1}{\ldots}}}}, \qquad x \in \mathbb{R}^n$$

Решение:

Будем предполагать, что множество, на котором задана f, действительно является выпуклым.

Определим функции:

$$f_1(x) = \frac{1}{x_1 - f_2(x)} = f(x)$$

$$f_2(x) = \frac{1}{x_2 - f_3(x)}$$

$$\ldots$$

$$f_n(x) = \frac{1}{x_n}$$

Покажем по индукции, что f_k выпукла для любого k. База: f_n выпукла при $x_n > 0$. Пусть f_{k+1} выпукла. Покажем, что и f_k выпукла.

Функции $(-f_{k+1})$ и x_k вогнуты, значит, их сумма $(x_k - f_{k+1})$ — вогнутая функция. Функция $\phi(\xi) = \frac{1}{\xi}$ убывает и выпукла. Тогда функция $\phi(x_k - f_{k+1}) = f_k$ есть выпуклая функция.

Докажем последнее утверждение. Пусть

- $\phi : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ — убывающая выпуклая функция,
- $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ — вогнутая функция;

Тогда их композиция $h(x) = \phi(f(x))$ есть выпуклая функция. Гессиан h имеет вид:

$$\nabla^2 h = \phi'' \nabla f \nabla f^T + \phi' \nabla^2 f$$

Из условий $\phi' \leq 0, \quad \phi'' \geq 0, \quad \nabla^2 f \preceq 0$ следует отрицательная полуопределенность этой матрицы.

Таким образом, $f_1(x) = f(x)$ есть выпуклая функция.

Задача 6

Проверить выпуклость или вогнутость функции

$$f(x) = -x \ln x - (1-x)\ln(1-x).$$

Решение:

$$f''(x) = -\frac{1}{x(1-x)} < 0 \qquad \text{на } (0,1),$$

значит, f строго вогнута на $(0,1)$.