ROZDZIAŁ 3

Elementy różniczkowania funkcji wielu zmiennych

Pojęcia i fakty podane w tym ustępie są przypomnieniem lub uzupełnieniem odpowiednich definicji i twierdzeń z analizy matematycznej, dotyczących w szczególności różniczkowania funkcji wielu zmiennych.

3.1 Podstawowe oznaczenia, definicje i fakty

- Funkcja $q : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ jest wielkością rzędu $o(t)$, gdy $\lim_{t\to 0} \frac{q(t)}{t} = 0$.
- Funkcja $q : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ jest wielkością rzędu $O(t)$, gdy $|q(t)| \le m\,|t|$ dla pewnej stałej $m > 0$.
- Funkcja $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ jest *koercytywna* (ang. *coercive*), jeśli $\lim_{\|x\|\to+\infty} f(x) = +\infty$.
- Operator $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ jest *ciągły w sensie Lipschitza* (ang. *Lipschitz continuous*) jeśli istnieje stała $L > 0$ taka, że

  $$\|F(x) - F(y)\| \le L\|x - y\|.$$

  Mówimy również, że F jest operatorem L-lipschitzowskim.
- Jeśli istnieją wszystkie pochodne cząstkowe funkcji $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, to wektor

  $$g(x) = \nabla f(x) = (\frac{\partial f}{\partial x_1}(x), ..., \frac{\partial f}{\partial x_n}(x))$$

  nazywamy *gradientem* (ang. *gradient*) funkcji f w punkcie x (dla skrócenia zapisu będziemy używać konwencji $g = g(x)$, $g^* = g(x^*)$, $g' = g(x')$, $g_k = g(x_k)$, itd.). Zgodne z przyjętą konwencją, gradient $\nabla f(x)$ identyfikujemy z wektorem kolumnowym, tzn.

  $$\nabla f(x) = [\frac{\partial f}{\partial x_1}(x), ..., \frac{\partial f}{\partial x_n}(x)]^T$$

- Jeśli istnieją wszystkie pochodne cząstkowe rzędu drugiego funkcji $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, to macierz

  $$G(x) = \nabla^2 f(x) = \nabla(\nabla f(x)^T) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(x) & ... & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n}(x) \\ ... & ... & ... \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1}(x) & ... & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2}(x) \end{bmatrix}$$

  nazywamy *macierzą Hessego* albo *hesjanem* (ang. *Hessian* or *Hesse matrix*) funkcji $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ w punkcie x (dla skrócenia zapisu będziemy używać konwencji $G = G(x)$, $G^* = G(x^*)$, $G' = G(x')$, $G_k = G(x_k)$, itd.).

- Jeśli pochodne cząstkowe rzędu drugiego funkcji f są ciągłe w punkcie x, to hesjan $\nabla^2 f(x)$ jest macierzą symetryczną (twierdzenie Sylwestra).

- Niech $h : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^m$, czyli $h = (h_1, ..., h_m)$, gdzie $h_j : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$, $j = 1, 2, ..., n$, są funkcjami posiadającymi wszystkie pochodne cząstkowe. Macierz

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial x_1}(x) & ... & \frac{\partial h_1}{\partial x_n}(x) \\ ... & ... & ... \\ \frac{\partial h_m}{\partial x_1}(x) & ... & \frac{\partial h_m}{\partial x_n}(x) \end{bmatrix}$$

nazywamy *macierzą Jacobiego* odwzorowania h w punkcie $x \in \mathbb{R}^n$. Jej transpozycję oznaczamy symbolem ∇h. Zachodzą więc równości

$$\nabla h(x) = [\nabla h_1(x), ..., \nabla h_m(x)] = \begin{bmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial x_1}(x) & ... & \frac{\partial h_m}{\partial x_1}(x) \\ ... & ... & ... \\ \frac{\partial h_1}{\partial x_n}(x) & ... & \frac{\partial h_m}{\partial x_n}(x) \end{bmatrix}.$$

Wierszami macierzy Jacobiego (kolumnami macierzy ∇h) są gradienty poszczególnych funkcji h_i, $i = 1, 2, ..., m$.

- Wektor $\nabla_x r(\bar{x}, \bar{y}) = (\frac{\partial r}{\partial x_1}(\bar{x}, \bar{y}), ..., \frac{\partial r}{\partial x_n}(\bar{x}, \bar{y}))$ oznacza gradient funkcji $r : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ w punkcie $(\bar{x}, \bar{y})$ względem $x \in \mathbb{R}^n$,

- Macierz $\nabla_x p(\bar{x}, \bar{y}) = (\nabla_x p_1(\bar{x}, \bar{y}), ..., \nabla_x p_r(\bar{x}, \bar{y}))$ oznacza transpozycję macierzy Jacobiego odwzorowania $p : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^r$, $p = (p_1, ..., p_r)$ w punkcie $(\bar{x}, \bar{y}) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$ względem $x \in \mathbb{R}^n$,

- Macierz $\nabla^2_{xx} r(\bar{x}, \bar{y}) = \nabla_x(\nabla_x r(\bar{x}, \bar{y})^T)$ oznacza hesjan funkcji $r : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ w punkcie $(\bar{x}, \bar{y})$ względem $x \in \mathbb{R}^n$.

3.2 Funkcje różniczkowalne i ich własności

Definicja 3.2.1 Niech $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ i niech $\bar{x}, s \in \mathbb{R}^n$. Granicę

$$\lim_{t \downarrow 0} \frac{f(\bar{x} + ts) - f(\bar{x})}{t}$$

nazywamy *pochodną kierunkową* (ang. *directional derivative*) funkcji f w punkcie $\bar{x}$ w kierunku wektora s i oznaczamy ją symbolem $f'(\bar{x}, s)$. Podobnie definiujemy pochodną kierunkową odwzorowania $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$.

Definicja 3.2.2 Funkcja $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ nazywa się *różniczkowalna* (*w sensie Frécheta*) (ang. *Fréchet differentiable*) w punkcie $x \in \mathbb{R}^n$, jeśli istnieje wektor $g \in \mathbb{R}^n$, taki że

$$f(x + d) = f(x) + g^T d + o(\|d\|), \tag{3.1}$$

gdzie $d \in \mathbb{R}^n$.

Uwaga 3.2.3 Z powyższej definicji wynika, że pochodna kierunkowa funkcji różniczkowalnej f ma postać $f'(x, s) = \nabla f(x)^T s$.

Twierdzenie 3.2.4 *Jeśli funkcja $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ jest różniczkowalna w punkcie x, to istnieje gradient $\nabla f(x)$ i zachodzi równość*

$$f(x+d) = f(x) + \nabla f(x)^T d + o(\|d\|),$$

gdzie $d \in \mathbb{R}^n$.

Uwaga 3.2.5 W przeciwieństwie do funkcji jednej zmiennej, z istnienia gradientu nie wynika różniczkowalność funkcji. Nawet funkcja nieciągła może posiadać wszystkie pochodne cząstkowe, np. funkcja $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ określona następująco

$$f(x,y) = \begin{cases} 0, & \text{gdy } x = 0 \text{ lub } y = 0 \\ 1, & \text{poza tym,} \end{cases}$$

posiada obie pochodne cząstkowe w punkcie $(0,0)$, a jest w tym punkcie nieciągła.

Definicja 3.2.6 Odwzorowanie $h : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^m$ nazywa się *różniczkowalne* (*w sensie Frécheta*) w punkcie $x \in \mathbb{R}^n$, jeśli istnieje macierz J typu $m \times n$ taka, że

$$h(x+d) = h(x) + Jd + o(\|d\|), \tag{3.2}$$

gdzie $d \in \mathbb{R}^n$.

Twierdzenie 3.2.7 *Jeśli odwzorowanie $h : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^m$ jest różniczkowalne w punkcie $x \in \mathbb{R}^n$, to istnieje macierz Jacobiego $\nabla h(x)^T$ i zachodzi równość*

$$h(x+d) = h(x) + \nabla h(x)^T d + o(\|d\|), \tag{3.3}$$

gdzie $d \in \mathbb{R}^n$.

Twierdzenie 3.2.8 (o różniczkowalności funkcji złożonej) *Jeśli funkcja $h : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^m$ jest różniczkowalna w punkcie $x \in \mathbb{R}^n$ i funkcja $f : \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}$ jest różniczkowalna w punkcie $h(x)$, to funkcja $f \circ h$ jest różniczkowalna w punkcie x i zachodzi równość*

$$\nabla(f \circ h)(x) = \nabla h(x) \cdot \nabla f(h(x)). \tag{3.4}$$

Po prawej stronie powyższego wzoru występuje mnożenie macierzy, więc ich kolejność jest ważna. W niektórych podręcznikach gradienty zapisuje się jako wektory wierszowe, co wraz z własnością transpozycji macierzy powoduje, że we wzorze (3.4) zamienia się kolejność macierzy występujących po prawej stronie. Wzór (3.4) jest prawdziwy również w przypadku, gdy $f : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^p$. Wówczas $\nabla f(y)^T$ jest macierzą Jacobiego funkcji f w punkcie $y \in \mathbb{R}^m$.

Wzór (3.4) odgrywa ważną rolę w uczeniu maszynowym, szczególnie w sieciach neuronowych. Ponieważ sieć jest złożeniem poszczególnych warstw, jej gradient jest iloczynem gradientów/macierzy Jacobiego odpowiadających za poszczególne warstwy z uwzględnieniem gradientów tzw. funkcji aktywacyjnych.

Wniosek 3.2.9 *Jeśli $u, v : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^m$ są różniczkowalne w punkcie $x \in \mathbb{R}^n$, to funkcja $u^T v : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ jest różniczkowalna w punkcie x i zachodzi wzór:*

$$\nabla(u^T v)(x) = \nabla u(x) \cdot v(x) + \nabla v(x) \cdot u(x).$$

Jeśli ponadto u, v są dwukrotnie różniczkowalne w punkcie $x \in \mathbb{R}^n$, to $u^T v$ jest dwukrotnie różniczkowalna w punkcie x i zachodzi wzór:

$$\nabla^2(u^T v)(x) = \nabla v(x) \cdot \nabla u(x)^T + \nabla^2 u(x) \cdot v(x) + \nabla u(x) \cdot \nabla v(x)^T + \nabla^2 v(x) \cdot u(x).$$

Dowód. Wystarczy określić funkcję $h : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^{2m}$, $h(x) = (u(x), v(x))$ i funkcję $f : \mathbb{R}^{2m} \to \mathbb{R}$, $f(y) = \eta_1\eta_{m+1} + ... + \eta_m\eta_{2m}$, gdzie $y = (\eta_1, ..., \eta_{2m})$ i skorzystać z twierdzenia 3.2.8. Szczegóły pozostawiamy czytelnikowi jako ćwiczenie. ■

Definicja 3.2.10 Funkcja $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ nazywa się różniczkowalna w obszarze $D \subseteq \mathbb{R}^n$, jeśli jest ona różniczkowalna w każdym punkcie tego obszaru. Funkcja f nazywa się funkcją klasy $C_1(x)$ ($C_1(D)$), jeśli gradient ∇f jest odwzorowaniem ciągłym (lub inaczej pochodne cząstkowe są ciągłe) w punkcie x (w obszarze D). Jeśli gradient ten jest odwzorowaniem różniczkowalnym w punkcie x (w obszarze D), to mówimy, że funkcja f jest dwukrotnie różniczkowalna w punkcie x (w obszarze D). Jeśli hesjan jest odwzorowaniem ciągłym (lub inaczej pochodne cząstkowe rzędu drugiego są ciągłe) w punkcie x (w obszarze D), to mówimy, że funkcja f jest klasy $C_2(x)$ $(C_2(D))$.

Podobnie definiuje się funkcje klasy $C_k(x)$ $(C_k(D))$. W definicji 3.2.10 ograniczyliśmy się do co najwyżej dwukrotnej różniczkowalności funkcji wielu zmiennych, gdyż w dalszych rozważaniach zazwyczaj używać będziemy funkcji co najwyżej klasy C_2.

Poniżej przypominamy rozwinięcia Taylora dla funkcji jednej zmiennej. Postaci te wystarczą do przedstawienia odpowiednich rozwinięć Taylora dla funkcji wielu zmiennych.

Twierdzenie 3.2.11 *Jeśli funkcja $q : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ jest k-krotnie różniczkowalna na przedziale $[x, x+h]$, to zachodzi równość*

$$q(x+h) = q(x) + q'(x)h + \frac{1}{2}q''(x)h^2 + ... + \frac{1}{k!}q^{(k)}(x)h^k + o(h^k) \tag{3.5}$$

Twierdzenie 3.2.12 *Jeśli funkcja $q : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ jest $(k+1)$-krotnie różniczkowalna na przedziale $[x, x+h]$, to istnieje liczba $\lambda \in (0,1)$ taka, że*

$$q(x+h) = q(x) + q'(x)h + \frac{1}{2}q''(x)h^2 + ... \frac{1}{k!}q^{(k)}(x)h^k + \frac{1}{(k+1)!}q^{(k+1)}(x+\lambda h)h^{k+1} \tag{3.6}$$

Równość (3.5) nosi nazwę rozwinięcia funkcji q we *wzór Taylora z resztą Peana*, zaś równość (3.6) nosi nazwę rozwinięcia funkcji q we *wzór Taylora z resztą Lagrange'a.*

Ćwiczenie 3.2.13 Niech f będzie funkcją określoną na przestrzeni $\mathbb{R}^n$. Wyznaczyć gradient/macierz Jacobiego oraz hesjan dla podanych funkcji:

(a) $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $f(x) = a^T x$, gdzie $a \in \mathbb{R}^n$;

(b) $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$, $f(x) = Ax$, gdzie A jest macierzą typu $m \times n$;

(c) $p : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $p(x) = s^T \nabla f(x)$, gdzie $s \in \mathbb{R}^n$ i $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ jest funkcją dwukrotnie różniczkowalną;

(d) $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $f(x) = x^T Ax$, gdzie A jest macierzą typu $n \times n$;

(e) $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax + b^T x + c$, gdzie A jest macierzą symetryczną, $b \in \mathbb{R}^n$ i $c \in \mathbb{R}$ (czyli f jest funkcją kwadratową);

(f) $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $f(x) = \frac{1}{2}\|Ax - b\|^2$, gdzie A jest macierzą typu $m \times n$, zaś $b \in \mathbb{R}^m$;

(g) $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$,

$$(f(x))_i = \frac{e^{x_i}}{\sum_{j=1}^n e^{x_j}}$$

(tzw. funkcja softmax);

(h) $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $f(x) = \ln(1 + \exp(x))$ (tzw. funkcja sigmoidalna);

(i) $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$,

$$f(x) = \frac{1}{1 + \exp(-x)}$$

(tzw. logistyczna funkcja sigmoidalna).

Uwaga 3.2.14 Z postaci gradientu dla funkcji kwadratowej (ćwiczenie 3.2.13(e)) wynika, że

$$g(x) - g(y) = G(x)(x - y).$$

Innymi słowy, dla funkcji kwadratowej hesjan odwzorowuje przyrost argumentu w przyrost gradientu.

Niech $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ i niech $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$. Dalej niech $h : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}^n$ będzie odwzorowaniem określonym następująco $h(t) = \bar{x} + ts$ dla $s \in \mathbb{R}^n$ i $t \in \mathbb{R}$. Zdefiniujmy funkcję $q : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ wzorem

$$q(t) = (f \circ h)(t) = f(\bar{x} + ts).$$

Funkcja q określa więc zachowanie funkcji f na prostej o równaniu $x = \bar{x} + ts$. Jeśli funkcja f jest różniczkowalna w punkcie x, to na mocy twierdzenia 3.2.8 mamy

$$q'(t) = \nabla h(t) \cdot \nabla f(h(t)) = s^T \nabla f(x) = \nabla f(x)^T s.$$

Jeśli ponadto f jest dwukrotnie różniczkowalna w punkcie x, to przez powtórne zastosowanie tego twierdzenia otrzymamy

$$q''(t) = (q'(t))' = s^T \nabla(\nabla f(x)^T s) = s^T \nabla^2 f(x) s.$$

Wielkość $q'(t)$ nazywamy *nachyleniem* funkcji f w punkcie x wzdłuż prostej $h(t) = \bar{x} + ts$, zaś wielkość $q''(t)$ – *krzywizną* funkcji f w punkcie x wzdłuż prostej $h(t) = \bar{x} + ts$. Oznaczmy teraz $d = ts$. Wektor d możemy więc traktować jako przyrost argumentu: $d = x - \bar{x}$. Rozwijając funkcję q we wzór Taylora z resztą Peana (3.5) dla $k = 1$ w otoczeniu punktu 0, otrzymamy przy założeniu różniczkowalności funkcji q na odcinku $[0, t]$,

$$q(t) = q(0) + tq'(0) + o(t).$$

Jeśli więc funkcja f jest różniczkowalna w otoczeniu punktu $\bar{x}$, to otrzymamy następujące rozwinięcie Taylora z resztą Peana

$$f(\bar{x} + ts) = f(\bar{x}) + ts^T \nabla f(\bar{x}) + o(t)$$

lub inaczej

$$f(\bar{x} + d) = f(\bar{x}) + d^T \nabla f(\bar{x}) + o(\|d\|).$$

Z kolei rozwijając funkcję q we wzór Taylora z resztą Peana (3.5) dla $k = 2$ w otoczeniu punktu 0, otrzymamy, przy założeniu dwukrotnej różniczkowalności funkcji q na przedziale $[0, t]$:

$$q(t) = q(0) + tq'(0) + \frac{1}{2} t^2 q''(0) + o(t^2).$$

Jeśli więc funkcja f jest dwukrotnie różniczkowalna na odcinku $[\bar{x}, \bar{x} + ts]$, to otrzymamy następujące rozwinięcie Taylora z resztą Peana

$$f(\bar{x} + ts) = f(\bar{x}) + ts^T \nabla f(\bar{x}) + \frac{1}{2} t^2 s^T \nabla^2 f(\bar{x}) s + o(t^2)$$

lub inaczej

$$f(\bar{x} + d) = f(\bar{x}) + d^T \nabla f(\bar{x}) + \frac{1}{2} d^T \nabla^2 f(\bar{x}) d + o(\|d\|^2).$$

Podobnie, korzystając ze wzoru (3.6), otrzymuje się rozwinięcia funkcji q we wzór Taylora z resztą Lagrange'a:

$$f(x) = f(\bar{x}) + d^T \nabla f(\bar{x} + \lambda d)$$

i

$$f(\bar{x} + d) = f(\bar{x}) + d^T \nabla f(\bar{x}) + \frac{1}{2} d^T \nabla^2 f(\bar{x} + \lambda d) d$$

dla pewnego $\lambda \in (0, 1)$.

Definicja 3.2.15 Funkcję liniową $\bar{f} : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ określoną wzorem

$$\bar{f}(x) = f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^T (x - \bar{x})$$

nazywamy *linearyzacją* (ang. *linearization*) funkcji f w punkcie $\bar{x}$.

Wykresem linearyzacji jest hiperpłaszczyzna styczna do wykresu funkcji f w punkcie $\bar{x}$. Twierdzenie 3.2.4 mówi, że $f(x)$ różni się od $\bar{f}(x)$ o $o(\|x - \bar{x}\|)$.

Definicja 3.2.16 Funkcję kwadratową $\breve{f}_{\bar{x}} : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ określoną wzorem

$$\breve{f}(x) = \frac{1}{2}(x - \bar{x})^T \nabla^2 f(\bar{x})(x - \bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^T (x - \bar{x}) + f(\bar{x})$$

nazywamy *przybliżeniem kwadratowym* (ang. *quadratic approximation*) funkcji f w punkcie $\bar{x}$.

Podobnie możemy wyprowadzić rozwinięcie Taylora dla odwzorowania ∇f. Otrzymamy wówczas

$$\nabla f(\bar{x} + d) = \nabla f(\bar{x}) + \nabla^2 f(\bar{x}) d + o(\|d\|)$$

lub inaczej

$$\nabla f(x) - \nabla f(\bar{x}) = \nabla^2 f(\bar{x})(x - \bar{x}) + o(\|x - \bar{x}\|),$$

czyli hesjan odwzorowuje „w przybliżeniu” różnicę argumentów w różnicę gradientów. Jak zauważyliśmy wcześniej (patrz uwaga 3.2.14), dla funkcji kwadratowej f odwzorowanie to jest dokładne.

Definicja 3.2.17 Kierunek $s \in \mathbb{R}^n$ nazywa się *kierunkiem spadku (*ang. *descent direction*) funkcji f w punkcie $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ jeśli

$$\exists_{\tau > 0} \forall_{t \in (0, \tau)} \quad f(\bar{x} + ts) < f(\bar{x}).$$

Uwaga 3.2.18 Z definicji pochodnej kierunkowej wynika, że jeśli $f'(\bar{x}, s) < 0$, to s jest kierunkiem spadku funkcji f w punkcie $\bar{x}$. Zatem dla funkcji różniczkowalnej f zachodzi implikacja

$$s^T \nabla f(\bar{x}) < 0 \Longrightarrow s \text{ jest kierunkiem spadku funkcji } f \text{ punkcie } \bar{x}.$$

Odwrotna implikacja nie jest prawdziwa (wystarczy wziąć $f(x) = x^3$, $\bar{x} = 0$ i $s = -1$).

Definicja 3.2.19 Niech dla funkcji $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ i dla punktu $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ istnieją pochodne kierunkowe $f'(\bar{x}, s)$ dla wszystkich $s \in \mathbb{R}^n$. Kierunek $s \in \operatorname{Argmin}_{\|s\|=1} f'(\bar{x}, s)$ nazywa się *kierunkiem najszybszego spadku* zaś kierunek $s \in \operatorname{Argmax}_{\|s\|=1} f'(\bar{x}, s)$ – *kierunkiem najszybszego wzrostu* funkcji f w punkcie $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$.

Definicja 3.2.20 Niech $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ będzie funkcją różniczkowalną. Punkt $\bar{x}$, dla którego $\nabla f(\bar{x}) = 0$ nazywa się *punktem stacjonarnym* (ang. *stationary point*) funkcji f.

Ćwiczenie 3.2.21 Niech $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ będzie funkcją różniczkowalną w punkcie $\bar{x}$ i $\nabla f(\bar{x}) \neq 0$. Kierunek najszybszego spadku funkcji f w punkcie $\bar{x}$ jest rozwiązaniem zadania

$$\begin{array}{rc} \text{minimalizować} & s^T \nabla f(\bar{x}) \\ \text{względem} & s \in \mathbb{R}^n \\ \text{przy ograniczeniu} & \|s\| = 1. \end{array}$$

Korzystając z nierówności Cauchy'ego–Schwarza pokazać, że kierunkiem najszybszego spadku funkcji f w punkcie $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ jest wektor

$$s := -\frac{\nabla f(\bar{x})}{\|\nabla f(\bar{x})\|}$$

oraz kierunkiem najszybszego wzrostu funkcji f w punkcie $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ jest wektor

$$s := \frac{\nabla f(\bar{x})}{\|\nabla f(\bar{x})\|}.$$

Definicja 3.2.22 Niech $X \subseteq \mathbb{R}^n$ i niech $\bar{x} \in X$. Wektor $s \in \mathbb{R}^n$ nazywamy *kierunkiem stycznym* (ang. *tangent direction*) do zbioru X w punkcie $\bar{x}$ jeśli istnieje ciąg $x_k \in X$, $x_k \to \bar{x}$ i ciąg $t_k \in \mathbb{R}$, $t_k \downarrow 0$ takie, że

$$s = \lim_k \frac{x_k - \bar{x}}{t_k}.$$

W zadaniach minimalizacji z ograniczeniami, w przypadku, gdy X jest zbiorem rozwiązań dopuszczalnych, kierunek styczny nazywany jest również *kierunkiem dopuszczalnym* (ang. *feasible direction*). Zbiór wszystkich kierunków stycznych do zbioru X w punkcie $\bar{x}$ oznaczać będziemy symbolem $T_X(\bar{x})$.

Wyznaczenie zbioru kierunków stycznych z definicji jest zazwyczaj trudne. W dalszej części zobaczymy jak go wyznaczyć dla zbiorów X zadanych układem nierówności.

Czytelnikowi pozostawiamy dowód faktu, że zbiór kierunków stycznych jest domknięty.

Uwaga 3.2.23 Jeśli s jest kierunkiem stycznym (do zbioru X w punkcie $\bar{x}$), to jest nim również αs dla dowolnego $\alpha \geq 0$ (innymi słowy, zbiór kierunków stycznych jest stożkiem). Z tego względu można ograniczyć się do kierunków stycznych o ustalonej normie, na przykład równej 1, przyjmując w powyższej definicji $t_k = \|x_k - \bar{x}\|$. Nietrudno pokazać, że powstała w ten sposób definicja kierunku stycznego jest w pewnym sensie równoważna definicji 3.2.22.

Ćwiczenie 3.2.24 Niech $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ będzie funkcją różniczkowalną i niech $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ będzie punktem takim, że $\nabla f(\bar{x}) \neq 0$. Pokazać, że

$$T_{\{x \in \mathbb{R}^n : f(x) = f(\bar{x})\}}(\bar{x}) = \{s \in \mathbb{R}^n : s^T \nabla f(\bar{x}) = 0\}.$$

Równość powyższą można geometrycznie zinterpretować w ten sposób, że kierunkami stycznymi do poziomicy funkcji f w punkcie $\bar{x}$ są wszystkie wektory ortogonalne do gradientu $\nabla f(\bar{x})$. Stanowią one podprzestrzeń liniową – w tym przypadku hiperpłaszczyznę. Mówimy również, że gradient $\nabla f(\bar{x})$ jest ortogonalny do poziomicy $\{x \in \mathbb{R}^n : f(x) = f(\bar{x})\}$.

3.3 Zbiory wypukłe

Definicja 3.3.1 Mówimy, że zbiór $K \subseteq \mathbb{R}^n$ jest *wypukły* (ang. *convex*), jeśli dla dowolnych $x, y \in K$ i dla każdego $\lambda \in [0,1]$ zachodzi $(1-\lambda)x + \lambda y \in K$. *Otoczką wypukłą* (ang. *convex hull*) zbioru $S \subseteq \mathbb{R}^n$ nazywamy najmniejszy zbiór wypukły zawierający S. Oznaczamy ją symbolem $\operatorname{conv} S$. *Kombinacją wypukłą* (ang. *convex combination*) elementów $x_1, ..., x_m \in \mathbb{R}^n$ nazywamy element $x \in \mathbb{R}^n$ postaci

$$x = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i x_i,$$

gdzie $\lambda_i \geq 0$, $i = 1, ..., m$, $\sum_{i=1}^{m} \lambda_i = 1$, $m \geq 1$.

Ćwiczenie 3.3.2 Pokazać, że przekrój dowolnej rodziny zbiorów wypukłych jest zbiorem wypukłym.

Ćwiczenie 3.3.3 Pokazać, że poniższe zbiory są wypukłe:

(a) dowolna podprzestrzeń afiniczna, w szczególności dowolna *hiperpłaszczyzna* $\{x \in \mathbb{R}^n : a^T x = b\}$, gdzie $a \neq 0$,

(b) dowolna *półprzestrzeń* $\{x \in \mathbb{R}^n : a^T x \leq b\}$, gdzie $a \neq 0$,

(c) przekrój dowolnej rodziny podprzestrzeni afinicznych, w szczególności

$$\bigcap_{i=1}^{m} \{x \in \mathbb{R}^n : a_i^T x = b_i\},$$

(d) przekrój dowolnej rodziny półprzestrzeni

$$\bigcap_{i=1}^{m} \{x \in \mathbb{R}^n : a_i^T x \leq b_i\},$$

gdzie $a_i \neq 0 \, i = 1, 2, ..., m$.

(e) *sympleks standardowy* (ang. *standard simplex*)

$$\Delta_m := \{w = (\lambda_1, ..., \lambda_m) \in \mathbb{R}^m : \lambda_i \geq 0, \; i = 1, ..., m, \; \sum_{i=1}^{m} \lambda_i = 1\},$$

(f) zbiór rozwiązań optymalnych zadania minimalizacji wypukłej,

(g) kula $B(\bar{x}, r) := \{x \in \mathbb{R}^n : \|x - \bar{x}\| \leq r\}$, gdzie $\|\cdot\|$ oznacza dowolną normę w $\mathbb{R}^n$, $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$, $r \geq 0$,

(h) *elipsoida* (ang. *ellipsoid*) $J(D, \bar{x}, \rho) := \{x \in \mathbb{R}^n : (x - \bar{x})^\top D(x - \bar{x}) \leq \rho\}$, gdzie D jest macierzą określoną dodatnio, $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$, $\rho > 0$,

(j) *stożek wypukły* (ang. *convex cone*), czyli podzbiór $C \subseteq \mathbb{R}^n$ spełniający warunki: (i) $x \in C$ i $\alpha > 0 \Longrightarrow \alpha x \in C$, (ii) $x, y \in C \Longrightarrow x + y \in C$.

3.3.1 Rzut metryczny

Definicja 3.3.4 Niech $C \subseteq \mathbb{R}^n$ i niech $x \in \mathbb{R}^n$. Punkt $y \in C$ nazywamy *rzutem metrycznym* (ang. *metric projection*) punktu x na zbiór C, jeśli

$$\|x - y\| \leq \|x - z\| \text{ dla dowolnego } z \in C,$$

i oznaczamy go symbolem $P_C(x)$.

Wprawdzie rzut metryczny można zdefiniować dla dowolnej normy, jednak będą nas interesować własności tego rzutu dla normy indukowanej przez iloczyn skalarny. W dalszym ciągu tego ustępu zakładamy więc, że $\|x\| = \sqrt{\langle x, x\rangle}$ dla pewnego iloczynu skalarnego $\langle \cdot, \cdot \rangle$, chyba że będzie powiedziane inaczej. Z definicji 3.3.4 nie wynika istnienie rzutu metrycznego, a jeśli nawet on istnieje, nie ma gwarancji jego jednoznaczności. Zachodzi natomiast poniższe twierdzenie.

Twierdzenie 3.3.5 *Niech $C \subseteq \mathbb{R}^n$ będzie zbiorem niepustym, domkniętym i wypukłym. Wówczas dla dowolnego $x \in \mathbb{R}^n$ istnieje dokładnie jeden jego rzut metryczny na C.*

Dowód. Twierdzenie pokażemy najpierw dla $x = 0$. Niech $d = \inf\{\|y\| : y \in C\}$ i niech ciąg $\{y_k\}_{k=1}^{\infty} \subseteq C$ będzie wybrany tak, by $\|y_k\| \to d$. Dowód rozbijemy na trzy części.

(a) Pokażemy, że $\{y_k\}_{k=1}^{\infty}$ jest ciągiem Cauchy'ego. Niech $\varepsilon > 0$ i niech $k_0 \geq 1$ będzie takie, że $\|y_k\|^2 \leq d^2 + \varepsilon/4$ dla $k \geq k_0$. Niech $k, l \geq k_0$. Oczywiście $\frac{1}{2}y_k + \frac{1}{2}y_l \in C$ ponieważ C jest wypukły. Stąd $\frac{1}{2}\|y_k + y_l\| \geq d$. Korzystając z tożsamości równoległoboku otrzymujemy w konsekwencji:

$$\begin{aligned}\|y_k - y_l\|^2 &= 2\|y_k\|^2 + 2\|y_l\|^2 - \|y_k + y_l\|^2 \\ &\leq 2(d^2 + \varepsilon/4) + 2(d^2 + \varepsilon/4) - 4d^2 = \varepsilon,\end{aligned}$$

tzn. $\{y_k\}_{k=1}^{\infty}$ jest ciągiem Cauchy'ego.

(b) Z (a) wynika, że y_k zbiega do pewnego $y \in \mathbb{R}^n$, gdyż $\mathbb{R}^n$ jest przestrzenią zupełną. Ponadto $y \in C$, ponieważ C jest domknięty. Stąd i z ciągłości normy wynika, że $\|y\| = d$. Oznacza to, że $y = P_C(0)$.

(c) Pokażemy teraz, że rzut metryczny określony jest jednoznacznie. Niech $y' \in C$ i niech $\|y'\| = d$. Z wypukłości C otrzymujemy $\frac{1}{2}y + \frac{1}{2}y' \in C$. Ponadto

$$d \leq \|\frac{1}{2}y + \frac{1}{2}y'\| \leq \frac{1}{2}\|y\| + \frac{1}{2}\|y'\| = d,$$

a więc $\|y + y'\| = 2d$. Korzystając powtórnie z tożsamości równoległoboku mamy:

$$\|y - y'\|^2 = 2\|y\|^2 + 2\|y'\|^2 - \|y + y'\|^2 = 2d^2 + 2d^2 - 4d^2 = 0,$$

czyli $y = y'$.

Niech teraz $x \in \mathbb{R}^n$ będzie dowolny. Z definicji rzutu metrycznego wynika, że $x + P_{C-x}(0)$ jest rzutem metrycznym punktu x na C, ponadto nietrudno zauważyć, że jest on określony jednoznacznie. Zatem twierdzenie jest prawdziwe dla dowolnego $x \in \mathbb{R}^n$. ■

Uwaga 3.3.6 Istnienie rzutu metrycznego na zbiór niepusty, domknięty i wypukły $C \subseteq \mathbb{R}^n$ można pokazać prościej korzystając z ciągłości normy i z twierdzenia Weierstrassa. Natomiast przeprowadzony powyżej dowód wskazuje, że twierdzenie 3.3.5 jest prawdziwe również dla dowolnej przestrzeni Hilberta.

Poniższe twierdzenie podaje charakteryzację rzutu metrycznego i jest przydatne przy wyznaczaniu rzutu metrycznego dla konkretnych zbiorów domkniętych wypukłych.

Twierdzenie 3.3.7 *Niech $x \in \mathbb{R}^n$, $C \subseteq \mathbb{R}^n$ będzie zbiorem niepustym, domkniętym i wypukłym i niech $y \in C$. Wówczas następujące warunki są równoważne*

(i) $y = P_C(x)$,

(ii) $\langle x - y, z - y\rangle \leq 0$ *dla dowolnego* $z \in C$.

Dowód. (i)⇒(ii). Niech $y = P_C(x)$ i niech $z \in C$. Ponadto, niech

$$z_\lambda = y + \lambda(z - y)$$

dla $\lambda \in (0, 1)$. Oczywiście $z_\lambda \in C$, ponieważ C jest wypukły. Z (i) i z własności iloczynu skalarnego mamy więc

$$\begin{aligned} \|x - y\|^2 &\leq \|x - z_\lambda\|^2 = \|x - y - \lambda(z - y)\|^2 \\ &= \|x - y\|^2 - 2\lambda\langle x - y, z - y\rangle + \lambda^2\|z - y\|^2. \end{aligned}$$

Skoro $\lambda > 0$, więc

$$\langle x - y, z - y\rangle \leq \frac{\lambda}{2}\|z - y\|^2,$$

a ponieważ λ jest dowolną liczbą z przedziału $(0, 1)$, więc musi zachodzić (ii).

(ii)⇒(i). Z własności iloczynu skalarnego oraz z (ii) mamy dla dowolnego $z \in C$

$$\|z - x\|^2 = \|z - y\|^2 + \|y - x\|^2 + 2\langle z - y, y - x\rangle \geq \|y - x\|^2,$$

co na mocy definicji rzutu metrycznego daje (i). ■

Ćwiczenie 3.3.8 Korzystając z charakteryzacji rzutu metrycznego sprawdzić słuszność wzorów na rzuty metryczne punktu $x \in \mathbb{R}$ dla podanych zbiorów domkniętych wypukłych $C \subseteq \mathbb{R}^n$:

(a) Jeśli C jest hiperpłaszczyzną, tzn. $C = H(a, \beta) := \{z \in \mathbb{R}^n : \langle a, z\rangle = \beta\}$, gdzie $a \in \mathbb{R}^n$, $\beta \in \mathbb{R}$, to zachodzi wzór

$$P_C(x) = x - \frac{\langle a, x\rangle - \beta}{\|a\|^2}a.$$

(b) Jeśli C jest półprzestrzenią, tzn. $C = H_-(a, \beta) := \{z \in \mathbb{R}^n : \langle a, z\rangle \leq \beta\}$, gdzie $a \in \mathbb{R}^n$ i $\beta \in \mathbb{R}$, to zachodzi wzór

$$P_C(x) = x - \frac{(\langle a, x\rangle - \beta)_+}{\|a\|^2}a.$$

(c) Niech $C \subseteq \mathbb{R}^n$ będzie zbiorem rozwiązań układu równań liniowych, tzn. $C = \{z \in \mathbb{R}^n : Az = b\}$, gdzie A jest macierzą typu $m \times n$ pełnego rzędu wierszowego i $b \in \mathbb{R}^m$. Wówczas zachodzi wzór

$$P_C(x) = x - A^\top(AA^\top)^{-1}(Ax - b).$$

(d) Jeśli $C \subseteq \mathbb{R}^n$ jest kulą, tzn. $C = B(\bar{x}, r) := \{z \in \mathbb{R}^n : \|z - \bar{x}\| \leq r\}$, gdzie $\|\cdot\|$ jest normą euklidesową, $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ i $r > 0$, to zachodzi wzór

$$P_C(x) = \begin{cases} x & \text{gdy } \|x - \bar{x}\| \leq r \\ \bar{x} + \frac{r}{\|x - \bar{x}\|}(x - \bar{x}) & \text{gdy } \|x - \bar{x}\| > r. \end{cases}$$

Czy wzór ten jest słuszny dla norm innych niż euklidesowa? Podać odpowiednie przykłady.

3.4 Funkcje wypukłe

W kolejnych rozdziałach przekonamy się, że funkcje wypukłe odgrywają dużą rolę w optymalizacji, w szczególności w uczeniu maszynowym. Dlatego teraz przedstawimy ważne własności tych funkcji, z których będziemy dalej korzystać.

Definicja 3.4.1 Niech $X \subseteq \mathbb{R}^n$ będzie podzbiorem wypukłym. Mówimy, że funkcja $f : X \longrightarrow \mathbb{R}$ jest *wypukła* (ang. *convex function*), jeśli

$$f((1-\lambda)x + \lambda y) \leq (1-\lambda)f(x) + \lambda f(y) \tag{3.7}$$

dla dowolnych $x, y \in X$ i $\lambda \in [0,1]$. Mówimy, że f jest *wklęsła* (ang. *concave function*), jeśli funkcja $-f$ jest wypukła. Jeśli nierówność w (3.7) jest ostra dla dlowolnych $x, y \in X$, $x \neq y$ i dla dowolnego $\lambda \in (0,1)$ to mówimy, że f jest *ściśle wypukła* (ang. *strictly convex function*). Jeśli istnieje stała $c > 0$, taka że

$$f((1-\lambda)x + \lambda y) \leq (1-\lambda)f(x) + \lambda f(y) - \frac{1}{2}c\lambda(1-\lambda)\|x-y\|^2 \tag{3.8}$$

dla dowolnych $x, y \in X$ i $\lambda \in [0,1]$, to mówimy, że f jest *mocno wypukła* (ang. *strongly convex function*). Stała c nazywa się *stałą mocnej wypukłości* lub *modułem* (mocnej wypukłości).

Nierówność (3.7) mówi, że odcinek łączący dwa dowolne punkty $(x, f(x))$ i $(y, f(y))$ na wykresie funkcji leży nad tym wykresem. Z kolei nierówność (3.8) mówi, że różnica między rzędną punktu $(1-\lambda)x + \lambda y$ na tym odcinku i wartością funkcji f w tym punkcie jest co najmniej taka jak wartość pewnej funkcji kwadratowej $q : [0,1] \to \mathbb{R}_+$ znikającej na końcach tego odcinka. Funkcja q ma tutaj postać $q(\lambda) := \frac{1}{2}c\lambda(1-\lambda)\|x-y\|^2$.

Jeśli nie będzie powiedziane inaczej, w dalszej części będziemy rozważać głównie funkcje wypukłe określone na całej przestrzeni $\mathbb{R}^n$. Jednak nie wszystkie własności takich funkcji wypukłych przysługują funkcjom wypukłym zdefiniowanym na podzbiorze wypukłym $X \subseteq \mathbb{R}^n$.

3.4.1 Własności funkcji wypukłych

Poniższe cztery twierdzenia wynikają prosto z definicji funkcji wypukłej (ściśle wypukłej, mocno wypukłej) i ich dowody pozostawiamy czytelnikowi jako ćwiczenie.

Twierdzenie 3.4.2 *Jeśli $f_i : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}, i = 1, ..., m$, są funkcjami wypukłymi i $\alpha_i > 0$ dla $i = 1, ..., m$, to funkcja $f := \sum_{i=1}^m \alpha_i f_i$ jest wypukła. Jeśli ponadto przynajmniej jedna z tych funkcji, powiedzmy f_j jest ściśle wypukła (mocno wypukła z modułem c), to funkcja f jest również ściśle wypukła (mocno wypukła z modułem $\alpha_j c$).*

Twierdzenie 3.4.3 *Jeśli $f_i : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}, i \in I$, są funkcjami wypukłymi (mocno wypukłymi z modułem $c > 0$), to funkcja $f := \sup_{i \in I} f_i$ jest wypukła (mocno wypukła z modułem $c > 0$).*

Twierdzenie 3.4.4 *Jeśli $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ jest funkcją wypukłą i $A : \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}^n$ jest odwzorowaniem afinicznym, to funkcja $h : \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}$, $h = f \circ A$ jest wypukła.*

Twierdzenie 3.4.5 *Jeśli $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow Y$, gdzie $Y \subseteq \mathbb{R}$ jest zbiorem wypukłym, jest funkcją wypukłą i $g : Y \longrightarrow \mathbb{R}$ jest funkcją wypukłą niemalejącą, to funkcja $h : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$, $h = g \circ f$ jest wypukła. Jeśli ponadto g jest funkcją rosnącą i f jest funkcją ściśle wypukłą, to funkcja h jest ściśle wypukła.*

Ćwiczenie 3.4.6 Niech $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ będzie funkcją wypukłą (ściśle wypukłą), zaś $\|\cdot\|$ normą euklidesową w $\mathbb{R}^n$. Które z poniższych funkcji są wypukłe (ściśle wypukłe, mocno wypukłe)?

(a) $h(x) = \|x\|$,

(b) $h(x) = \|x\|^2$,

(c) $h(x) = \|f(x)\|$,

(d) $h(x) = \|f(x)\|^2$,

(e) $h(x) = (f(x))^2$

(f) $h(x) = f(Ax - b)$, gdzie A jest macierzą typu $n \times m$ zaś $b \in \mathbb{R}^n$, w szczególności $h(x) = \|Ax - b\|^2$

Które z tych własności zachodzą dla dowolnej normy?

Poniższe twierdzenie podajemy bez dowodu

Twierdzenie 3.4.7 *Funkcja wypukła $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ jest lokalnie lipschitzowska. W konsekwencji jest ona ciągła.*

Twierdzenie 3.4.8 *Dla dowolnej normy $\|\cdot\|$ w $\mathbb{R}^n$ i dla zbioru wypukłego $C \subseteq \mathbb{R}^n$ funkcja $d(\cdot, C) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$,*

$$d(x, C) := \inf_{y \in C} \|x - y\| \tag{3.9}$$

jest wypukła.

Dowód. Niech $x, y \in \mathbb{R}^n$, $\lambda \in [0, 1]$ i niech $z = (1 - \lambda)x + \lambda y$. Bez szkody dla ogólności rozważań możemy założyć, że zbiór C jest domknięty (w razie potrzeby rozumowanie można przeprowadzić dla zbioru $\operatorname{cl} C$ i skorzystać z prostej do pokazania równości $d(x, \operatorname{cl} C) = d(x, C)$). Z wypukłości zbioru C i z w wypukłości normy $\|\cdot\|$, wynika, że

$$\begin{aligned} d((1-\lambda)x + \lambda y, C) &= d(z, C) \\ &= \|z - P_C(z)\| \\ &\le \|(1-\lambda)x + \lambda y - (1-\lambda)P_C(x) - \lambda P_C(y)\| \\ &\le (1-\lambda)\|x - P_C(x)\| + \lambda\|y - P_C(y)\| \\ &= (1-\lambda)d(x, C) + \lambda d(y, C). \end{aligned}$$

■

Funkcja $d(\cdot, C)$ zdefiniowana równością (3.9) nazywa się *odległością punktu x od zbioru C* (nawet jeśli nie zakładamy, że C jest wypukły). Powyższe twierdzenie mówi więc, że odległość od zbioru wypukłego jest funkcją wypukłą.

Twierdzenie 3.4.9 *Jeśli funkcja $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ jest wypukła, to dowolna jej podpoziomica $S(f, \alpha)$, gdzie $\alpha \in \mathbb{R}$, jest zbiorem wypukłym.*

Dowód. Niech f będzie funkcją wypukłą i niech $x, y \in S(f, \alpha)$, gdzie $\alpha \in \mathbb{R}$ oraz niech $\lambda \in [0, 1]$. Mamy wówczas

$$\begin{aligned} f((1-\lambda)x + \lambda y) &\le (1-\lambda)f(x) + \lambda f(y) \\ &\le (1-\lambda)\alpha + \lambda\alpha = \alpha, \end{aligned}$$

czyli $(1 - \lambda)x + \lambda y \in S(f, \alpha)$. ■

Uwaga 3.4.10 Twierdzenie odwrotne do powyższego nie jest prawdziwe. Aby to zauważyć wystarczy rozpatrzyć funkcję $\chi_C : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$,

$$\chi_C(x) = \begin{cases} 0 & \text{dla } x \in C \\ 1 & \text{dla } x \notin C, \end{cases}$$

gdzie $C \subseteq \mathbb{R}^n$ jest zbiorem wypukłym. Nawet jeśli założymy ciągłość funkcji f, twierdzenie odwrotne do powyższego nie jest prawdziwe. Wystarczy wziąć funkcję $f(x) = e^{-x^2}$. Funkcja, której wszystkie podpoziomice są zbiorami wypukłymi nazywa się funkcją *quasi-wypukłą* (ang. *quasi-convex*).

Twierdzenie 3.4.11 *Niech $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ będzie funkcją wypukłą. Wówczas dla dowolnego punktu $x \in \mathbb{R}^n$ i dla dowolnego kierunku $s \in \mathbb{R}^n$ istnieje pochodna kierunkowa $f'(x,s)$ oraz zachodzi równość*

$$f'(x,s) = \inf_{t>0} \frac{f(x+ts) - f(x)}{t}.$$

Dowód. Pokażemy najpierw, że dla wypukłej funkcji f funkcja $h : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$, $h(t) = [f(x + ts) - f(x)]/t$ jest niemalejąca. Niech $0 < t_1 \le t_2$. Wówczas $t_1/t_2 \in (0,1]$ i

$$\begin{aligned} f(x+t_1 s) - f(x) &= f((1 - \frac{t_1}{t_2})x + \frac{t_1}{t_2}(x + t_2 s)) - f(x) \\ &\le (1 - \frac{t_1}{t_2})f(x) + \frac{t_1}{t_2} f(x + t_2 s) - f(x) \\ &= \frac{t_1}{t_2}(f(x + t_2 s) - f(x)), \end{aligned}$$

tzn. h jest funkcją niemalejącą. Ponieważ każda funkcja niemalejąca posiada granice jednostronne, więc zachodzą równości

$$\inf_{t>0} h(t) = \lim_{t\downarrow 0} h(t) = f'(x,s).$$

■

Uwaga 3.4.12 Przypomnijmy, że dla funkcji różniczkowalnej f pochodna kierunkowa ma postać $f'(x,s) = \nabla f(x)^T s$, czyli jest funkcją liniową zmiennej s. Dla funkcji wypukłej nie musi to zachodzić. Wystarczy wziąć funkcję $f(x) =\mid x \mid$. Dla tej funkcji wypukłej jej pochodna kierunkowa nie jest funkcją liniową wektora s. Dla $s = 1$ i dla $s = -1$ mamy bowiem $f'(0,s) = 1$.

3.4.2 Funkcja wypukła różniczkowalna

Twierdzenie 3.4.13 *Niech $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ będzie funkcją różniczkowalną. Wówczas:*

(i) *f jest wypukła wtedy i tylko wtedy, gdy*

$$\nabla f(x)^T (y - x) \le f(y) - f(x), \tag{3.10}$$

dla dowolnych $x, y \in \mathbb{R}^n$;

(ii) *f jest ściśle wypukła wtedy i tylko wtedy, gdy*

$$\nabla f(x)^T (y - x) < f(y) - f(x), \tag{3.11}$$

dla dowolnych $x, y \in \mathbb{R}^n, x \neq y$;

(iii) *f jest mocno wypukła z modułem $c > 0$ wtedy i tylko wtedy, gdy*

$$\nabla f(x)^T(y-x) + \frac{1}{2}c\|x-y\|^2 \leq f(y) - f(x) \tag{3.12}$$

dla dowolnych $x, y \in \mathbb{R}^n$.

Dowód. Przeprowadzimy najpierw dowód części (iii). Przypuśćmy, że funkcja f jest mocno wypukła z modułem $c > 0$. Dla $x, y \in \mathbb{R}^n$ i dla $\lambda \in (0,1)$ otrzymujemy wówczas, na mocy różniczkowalności funkcji f,

$$\begin{aligned} f(y) - f(x) &= \frac{(1-\lambda)f(x) + \lambda f(y) - f(x)}{\lambda} \\ &\geq \frac{f((1-\lambda)x + \lambda y) - f(x) + \frac{1}{2}c(1-\lambda)\lambda\|y-x\|^2}{\lambda} \\ &= \frac{f(x + \lambda(y-x)) - f(x) + \frac{1}{2}c(1-\lambda)\lambda\|y-x\|^2}{\lambda} = \\ &= (y-x)^T\nabla f(x) + \frac{1}{2}c(1-\lambda)\|y-x\|^2 + \frac{o(\lambda\|y-x\|)}{\lambda} \end{aligned}$$

W granicy przy $\lambda \downarrow 0$ otrzymamy nierówność (3.12). Przypuśćmy teraz, że dla dowolnych $x, y \in \mathbb{R}^n$ spełniona jest nierówność (3.12) dla pewnego $c > 0$. Niech $\lambda \in (0,1)$ i niech $z = (1-\lambda)x + \lambda y$. Wówczas oczywiście $z - x = \lambda(y-x)$ i $y - z = (1-\lambda)(y-x)$. W konsekwencji otrzymujemy

$$\begin{aligned} \frac{f(x) - f(z)}{\lambda} &\geq \frac{(x-z)^T\nabla f(z) + \frac{1}{2}c\|x-z\|^2}{\lambda} \\ &= -(y-x)^T\nabla f(z) + \frac{1}{2}c\lambda\|y-x\|^2 \end{aligned}$$

i

$$\begin{aligned} \frac{f(y) - f(z)}{1-\lambda} &\geq \frac{(y-z)^T\nabla f(z) + \frac{1}{2}c\|y-z\|^2}{1-\lambda} \\ &= (y-x)^T\nabla f(z) + \frac{1}{2}c(1-\lambda)\|y-x\|^2. \end{aligned}$$

Dodając powyższe nierówności stronami otrzymamy po prostych przekształceniach

$$f(z) \leq (1-\lambda)f(x) + \lambda f(y) - \frac{1}{2}c\lambda(1-\lambda)\|y-x\|^2.$$

Zatem f jest funkcją mocno wypukłą ze stała mocnej wypukłości c.

Przyjmując w powyższym dowodzie $c = 0$ otrzymamy część (i), natomiast zastępując dodatkowo nierówności słabe ostrymi i zakładając, że $x \neq y$ otrzymamy część (ii). ■

Uwaga 3.4.14 Część (i) twierdzenia 3.4.13 można również sformułować w następujący sposób: funkcja różniczkowalna f jest wypukła wtedy i tylko wtedy gdy jest ona niemniejsza od dowolnej swojej linearyzacji. Czytelnikowi pozostawiamy sformułowanie w języku linearyzacji pozostałych części tego twierdzenia.

Definicja 3.4.15 Odwzorowanie $F : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$ nazywamy *monotonicznym* (ang. *monotone mapping*) jeśli

$$(F(y) - F(x))^T(y-x) \geq 0$$

dla dowolnych $x, y \in \mathbb{R}^n$. Jeśli nierówność powyższa jest ostra dla dowolnych $x, y \in \mathbb{R}^n$, $x \neq y$, to odwzorowanie F nazywa się *ściśle monotoniczne* (ang. *strictly monotone mapping*). Jeśli natomiast

$$(F(y) - F(x))^T (y - x) \geq c\|y - x\|^2,$$

dla pewnej stałej $c > 0$, to F nazywa się odwzorowaniem *mocno monotonicznym* (ang. *strongly monotone mapping*), zaś stała c nazywa się *modułem* mocnej monotoniczności.

Wniosek 3.4.16 *Niech $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ będzie funkcją różniczkowalną. Wówczas*

(i) *Jeśli f jest wypukła, to jej gradient $\nabla f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$ jest odwzorowaniem monotonicznym, tzn.*

$$(\nabla f(y) - \nabla f(x))^T (y - x) \geq 0 \tag{3.13}$$

dla dowolnych $x, y \in \mathbb{R}^n$.

(ii) *Jeśli f jest ściśle wypukła, to jej gradient $\nabla f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$ jest odwzorowaniem ściśle monotonicznym, tzn.*

$$(\nabla f(y) - \nabla f(x))^T (y - x) > 0 \tag{3.14}$$

dla dowolnych $x, y \in \mathbb{R}^n$, $x \neq y$.

(iii) *Jeśli f jest mocno wypukła (z modułem c), to jej gradient $\nabla f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$ jest odwzorowaniem mocno monotonicznym (z modułem c), tzn.*

$$(\nabla f(y) - \nabla f(x))^T (y - x) \geq c\|y - x\|^2 \tag{3.15}$$

dla dowolnych $x, y \in \mathbb{R}^n$.

Dowód. Pokażemy tylko własność (iii). Pozostałe własności pokazuje się w podobny sposób. Przypuśćmy, że f jest funkcją mocno wypukłą. Wówczas na mocy twierdzenia 3.4.13(iii) dla dowolnych $x, y \in \mathbb{R}^n$ zachodzą nierówności

$$-\nabla f(x)^T (y - x) \geq f(x) - f(y) + \frac{1}{2} c\|x - y\|^2.$$

Zamieniając rolami x i y we wzorze (3.12) otrzymamy również

$$\nabla f(y)^T (y - x) \geq f(y) - f(x) + \frac{1}{2} c\|y - x\|^2.$$

Dodając te nierówności stronami otrzymamy tezę. ■

Uwaga 3.4.17 Można pokazać, że zachodzą również implikacje odwrotne do przedstawionych we wniosku 3.4.16. Szczegóły można znaleźć w podręczniku [HL93].

Twierdzenie 3.4.18 *Niech $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ będzie funkcją dwukrotnie różniczkowalną i niech $c > 0$. Wówczas:*

(i) *f jest wypukła wtedy i tylko wtedy, gdy dla dowolnego $x \in \mathbb{R}^n$ hesjan $\nabla^2 f(x)$ jest macierzą nieujemnie określoną.*

(ii) *f jest ściśle wypukła jeśli dla dowolnego $x \in \mathbb{R}^n$ hesjan $\nabla^2 f(x)$ jest macierzą dodatnio określoną.*

(iii) *f jest mocno wypukła ze stałą mocnej wypukłości c wtedy i tylko wtedy, gdy dla dowolnych $x, s \in \mathbb{R}^n$ zachodzi nierówność $s^T \nabla^2 f(x) s \geq c\|s\|^2$.*

Dowód. (i) Ponieważ f jest dwukrotnie różniczkowalna, więc dla dowolnych $x, s \in \mathbb{R}^n$ i dla $t > 0$ mamy

$$\nabla f(x + ts) - \nabla f(x) = t\nabla^2 f(x)s + \mathbf{o}(t),$$

gdzie $\mathbf{o}(t)$ jest odwzorowaniem, którego współrzędne są wielkościami typu $o(t)$. Przypuśćmy, że f jest funkcją wypukłą. Wówczas na mocy wniosku 3.4.16(i) mamy

$$0 \leq s^T(\nabla f(x + ts) - \nabla f(x)) = ts^T\nabla^2 f(x)s + s^T\mathbf{o}(t).$$

Dzieląc powyższą nierówność obustronnie przez $t > 0$ i przechodząc do granicy przy $t \downarrow 0$ otrzymamy $s^T\nabla^2 f(x)s \geq 0$. Zatem hesjan $\nabla^2 f(x)$ jest macierzą nieujemnie określoną. Przypuśćmy teraz, że dla dowolnego $z \in \mathbb{R}^n$ hesjan $\nabla^2 f(z)$ jest macierzą nieujemnie określoną. Niech $y \in \mathbb{R}^n$ będzie dowolny i niech $d = y - x$. Rozwijając funkcję f we wzór Taylora w otoczeniu punktu x, z resztą Lagrange'a otrzymujemy

$$f(x + d) = f(x) + d^T\nabla f(x) + \frac{1}{2}d^T\nabla^2 f(x + \lambda d)d$$

dla pewnego $\lambda \in (0, 1)$. Na mocy założenia, $d^T\nabla^2 f(x + \lambda d)d \geq 0$ i w konsekwencji

$$f(y) \geq f(x) + (y - x)^T\nabla f(x).$$

Nierówność ta zgodnie z twierdzeniem 3.4.13(i) oznacza, że funkcja f jest wypukła.

Części (ii) oraz (iii) dowodzi się podobnie. ■

Uwaga 3.4.19 Implikacja odwrotna do (ii) w powyższym twierdzeniu nie jest prawdziwa. Aby to zauważyć wystarczy rozpatrzyć funkcję $f : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$, $f(x) = x^4$.

Ćwiczenie 3.4.20 Pokazać wypukłość względnie wklęsłość następujących funkcji $f : X \to \mathbb{R}$:

(a) funkcja potęgowa, $f(x) = |x|^\alpha$, gdzie $\alpha \geq 1$, $X = \mathbb{R}$;

(b) funkcja wykładnicza $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $f(x) = a^x$, gdzie $a \geq 0$, $X = \mathbb{R}$;

(c) funkcja logarytmiczna, $f(x) = \ln x$, $X = \mathbb{R}_{++}$;

(d) entropia, $f(x) = \sum_{i=1}^n x_i \ln x_i$, $X = \mathbb{R}^n_{++}$;

(e) średnia geometryczna, $f(x) = (x_1 \cdot ... \cdot x_n)^{\frac{1}{n}}$, $X = \mathbb{R}^n_{++}$;

Wskazówka: wyznaczyć hesjan funkcji $-f$ i pokazać jego nieujemną określoność ($s^\top\nabla^2 f(x)s \geq 0$ dla dowolnego $s = (\sigma_1, ..., \sigma_n)$) korzystając z nierówności

$$\left(\sum_{j=1}^n \frac{\sigma_j}{x_j}\right)^2 \leq n\sum_{j=1}^n \left(\frac{\sigma_j}{x_j}\right)^2$$

będącej szczególnym przypadkiem nierówności Cauchy'ego–Schwarza dla standardowego iloczynu skalarnego i indukowanej przez niego normy euklidesowej.

(f) $f(x) = \max\{|x_j| : j = 1, ..., n\}$, $X = \mathbb{R}^n$ (norma w przestrzeni l^∞);

(g) norma w przestrzeni l^p, $f(x) = (\sum_{j=1}^n |x_i|^p)^{\frac{1}{p}}$, $p \geq 1$, $X = \mathbb{R}^n$;

Wskazówka: skorzystać z nierówności Minkowskiego.

(h) $f(x) = \|Ax - b\|^2$, gdzie A jest macierzą typu $m \times n$, $b \in \mathbb{R}^m$ i $X = \mathbb{R}^n$ (funkcja ta jest często wykorzystywana w uczeniu maszynowym – przedstawia ona błąd średniokwadratowy dla modelu liniowego).