

Optimalizace

Elektronická skripta předmětu B0B33OPT,
verze ze **7. listopadu 2019.**

Tomáš Werner
werner@fel.cvut.cz



Katedra kybernetiky
Fakulta elektrotechnická
České vysoké učení technické

Obsah

1	Značení a základní pojmy	1
1.1	Značení	1
1.1.1	Množiny	1
1.1.2	Zobrazení	2
1.1.3	Funkce a zobrazení více reálných proměnných	3
1.2	Minimum a infimum	3
1.3	Extrémy funkce na množině	4
1.4	Úloha spojité optimalizace	5
1.5	Cvičení	13
I	Použití lineární algebry v optimalizaci	14
2	Maticová algebra	15
2.1	Binární operace s maticemi	15
2.2	Transpozice a symetrie	16
2.3	Hodnost	16
2.4	Inverze	17
2.5	Determinant	17
2.6	Matice s jedním sloupcem nebo jedním řádkem	18
2.7	Matice sestavené z bloků	19
2.8	Co je soustava lineárních rovnic?	20
2.9	Maticové zločiny	20
2.9.1	Výraz je nesmyslný kvůli rozměrům matic	21
2.9.2	Použití neexistujících maticových identit	21
2.9.3	Neekvivalentní úpravy (ne)rovnic	21
2.9.4	Další nápady pro práci s maticemi	22
2.10	Cvičení	22
3	Linearita	26
3.1	Lineární podprostory	26
3.2	Lineární zobrazení	27
3.2.1	Prostor obrazů	29
3.2.2	Nulový prostor	30
3.2.3	Dvě věty o dimenzích	31
3.3	Afinní podprostor a zobrazení	32
3.4	Cvičení	36

4	Ortogonalita	39
4.1	Standardní skalární součin	39
4.2	Ortogonální podprostory	39
4.3	Ortonormální množina vektorů	41
4.4	Matice s ortonormálními sloupci	42
4.5	QR rozklad	43
4.6	Ortogonální projekce	44
4.6.1	Projekce na ortogonální doplněk	45
4.6.2	Vzdálenost bodu od podprostoru	46
4.7	Cvičení	46
5	Nehomogenní lineární soustavy	50
5.1	Přibližné řešení ve smyslu nejmenších čtverců	50
5.1.1	Ortogonální projekce na podprostor daný obecnou bází	52
5.1.2	Řešení pomocí QR rozkladu	52
5.1.3	Lineární regrese	53
5.1.4	Statistické odůvodnění kritéria nejmenších čtverců	54
5.1.5	Vícekriteriální nejmenší čtverce, regularizace	55
5.2	Řešení s nejmenší normou	55
5.3	(★) Pseudoinverze obecné matice	57
5.4	Cvičení	57
6	Spektrální rozklad a kvadratické funkce	62
6.1	Vlastní čísla a vektory	62
6.1.1	Spektrální rozklad	64
6.2	Kvadratická forma	65
6.2.1	Definitnost kvadratické formy / její matice	65
6.2.2	Definitnost ze znamének hlavních minorů	66
6.2.3	Diagonalizace kvadratické formy	66
6.3	Kvadratická funkce	67
6.3.1	Kvadratika	69
6.4	Cvičení	70
7	Použití spektrálního rozkladu v optimalizaci	75
7.1	Stopa matice	75
7.2	Skalární součin a norma matic	75
7.3	Úloha na nejmenší stopu	76
7.4	Proložení bodů podprostorem	78
7.4.1	Nejbližší matice nižší hodnosti	79
7.4.2	Co když prokládáme afinním podprostorem?	80
7.5	Přeuročené homogenní lineární soustavy	81
7.6	Singulární rozklad	82
7.6.1	Nejbližší matice nižší hodnosti	83
7.7	Cvičení	83

II	Nelineární optimalizace	87
8	Nelineární funkce a zobrazení	88
8.1	Spojitosť	89
8.2	Derivace funkce jedné proměnné	90
8.3	Parciální derivace	91
8.4	Derivace zobrazení	91
8.4.1	Derivace složeného zobrazení	92
8.4.2	Derivace maticových výrazů	94
8.5	Směrová derivace	95
8.6	Gradient	96
8.7	Parciální derivace druhého řádu	97
8.8	Taylorův polynom	98
8.9	Vnitřek a hranice množiny	99
8.10	Lokální extrémů funkce na množině	100
8.11	Cvičení	101
9	Volné lokální extrémů	106
9.1	Analytické podmínky	106
9.1.1	Pro jednu proměnnou	106
9.1.2	Pro více proměnných	106
9.2	Iterační algoritmy na volná lokální minima	108
9.3	Gradientní metoda	108
9.3.1	(*) Závislost na lineární transformaci souřadnic	109
9.4	Newtonova metoda	109
9.4.1	Použití na soustavy nelineárních rovnic	110
9.4.2	Použití na minimalizaci funkce	111
9.5	Nelineární metoda nejmenších čtverců	112
9.5.1	Gauss-Newtonova metoda	112
9.5.2	Rozdíl oproti Newtonově metodě	114
9.5.3	Levenberg-Marquardtova metoda	114
9.6	Cvičení	115

Kapitola 1

Značení a základní pojmy

1.1 Značení

Pokud potkáte ve skriptech slovo vysázené **tučně**, jde o nově zavedený pojem, který máte pochopit a zapamatovat si. Ve skriptech tedy nepotkáte slovo ‘definice’, protože všechna tučná slova jsou definice. Slova vysázená *kurzívou* znamenají buď zdůraznění, nebo nový avšak všeobecně známý pojem. Odstavce, věty, důkazy, příklady a cvičení označené hvězdičkou (★) jsou rozšiřující (a často zajímavé) a není nezbytné umět je ke zkoušce. Je-li za nějakým tvrzením v závorce pokyn *odvod'te!*, *proved'te!*, *ověřte!* či otázka *proč?*, znamená to, že správnost tvrzení není patrná na první pohled, ale snadno ho dokážete, když se nad ním zamyslíte nebo si to napíšete na papír.

Zopakujme nejdříve matematické značení, které se používá v celých skriptech a které by čtenář měl bezpečně ovládat.

1.1.1 Množiny

Názvy množin budeme psát velkými skloněnými písmeny, např. A nebo X . Budeme používat standardní množinové značení:

$\{a_1, \dots, a_n\}$	množina s prvky a_1, \dots, a_n
$a \in A$	prvek a patří do množiny A (neboli a je prvkem A)
$A \subseteq B$	množina A je podmnožinou množiny B , tj. každý prvek z A patří do B
$A = B$	množina A je rovna množině B , platí zároveň $A \subseteq B$ a $B \subseteq A$
$\{a \in A \mid \varphi(a)\}$	množina prvků a z množiny A , které splňují logický výrok $\varphi(a)$
$A \cup B$	sjednocení množin, množina $\{a \mid a \in A \text{ nebo } a \in B\}$
$A \cap B$	průnik množin, množina $\{a \mid a \in A, a \in B\}$
$A \setminus B$	rozdíl množin, množina $\{a \mid a \in A, a \notin B\}$
(a_1, \dots, a_n)	uspořádaná n -tice prvků a_1, \dots, a_n
$A_1 \times \dots \times A_n$	kartézský součin množin, množina $\{(a_1, \dots, a_n) \mid a_1 \in A_1, \dots, a_n \in A_n\}$
A^n	kartézský součin n stejných množin, $A^n = A \times \dots \times A$ (n -krát)
\emptyset	prázdná množina

Číselné množiny budeme značit takto:

\mathbb{N}	množina přirozených čísel
\mathbb{Z}	množina celých čísel
\mathbb{Q}	množina racionálních čísel
\mathbb{R}	množina reálných čísel
\mathbb{R}_+	množina nezáporných reálných čísel $\{x \in \mathbb{R} \mid x \geq 0\}$
\mathbb{R}_{++}	množina kladných reálných čísel $\{x \in \mathbb{R} \mid x > 0\}$
$[x_1, x_2]$	uzavřený reálný interval $\{x \in \mathbb{R} \mid x_1 \leq x \leq x_2\}$
(x_1, x_2)	otevřený reálný interval $\{x \in \mathbb{R} \mid x_1 < x < x_2\}$
$[x_1, x_2)$	polouzavřený reálný interval $\{x \in \mathbb{R} \mid x_1 \leq x < x_2\}$
\mathbb{C}	množina komplexních čísel

Desetinná čísla budeme psát jako v angličtině s desetinnou tečkou, např. 1.23 namísto 1,23.

1.1.2 Zobrazení

Zobrazení (angl. *mapping, map*) z množiny A do množiny B značíme

$$f: A \rightarrow B \quad (1.1)$$

nebo (méně často) $A \xrightarrow{f} B$. Zobrazení si můžeme představit¹ jako ‘černou skříňku’, která každému prvku $a \in A$ (vzoru) přiřadí právě jeden prvek $b = f(a) \in B$ (obraz). Slovo *funkce* (angl. *function*) znamená přesně totéž jako zobrazení, obvykle se však používá pro zobrazení do číselných množin (tedy $B = \mathbb{R}, \mathbb{Z}, \mathbb{C}$ apod.). *Transformace* je zobrazení nějaké množiny do sebe, tedy $f: A \rightarrow A$.

Obraz množiny $A' \subseteq A$ v zobrazení $f: A \rightarrow B$ značíme

$$f(A') = \{f(a) \mid a \in A'\} = \{b \in B \mid b = f(a), a \in A'\} \quad (1.2)$$

(čárka v definici pravé množiny značí konjunkci, tedy jde o množinu všech $b \in B$ které splňují $b = f(a)$ a zároveň $a \in A'$). Např. je-li $A' = \{1, 3, 4, -1\} \subseteq \mathbb{Z}$ a zobrazení $f: \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{Z}$ je definované předpisem $f(a) = a^2$, je $f(A') = \{a^2 \mid a \in A'\} = \{1, 9, 16\}$. Je-li $A' = \{a \in A \mid \varphi(a)\}$ a $f: A \rightarrow B$, používáme zkratku

$$f(A') = \{f(a) \mid a \in A, \varphi(a)\} = \{b \in B \mid b = f(a), a \in A, \varphi(a)\} \quad (1.3)$$

nebo jen $\{f(a) \mid \varphi(a)\}$, pokud je A jasné z kontextu. Např. $\{x^2 \mid x \in \mathbb{R}, -1 < x < 1\} = [0, 1)$.

Zobrazení se nazývá

- *injektivní* (neboli prosté), jestliže každý vzor má jiný obraz, tj. $f(a) = f(a') \Rightarrow a = a'$.
- *surjektivní* (neboli A na B), jestliže každý obraz má aspoň jeden vzor, tj. $f(A) = B$.
- *bijektivní* (neboli vzájemně jednoznačné), jestliže je zároveň injektivní a surjektivní.

Mějme dvě zobrazení $f: A \rightarrow B$ a $g: B \rightarrow C$, neboli $A \xrightarrow{f} B \xrightarrow{g} C$. *Složení* zobrazení f a g je zobrazení $g \circ f: A \rightarrow C$ definované jako $(g \circ f)(a) = g(f(a))$ pro každé $a \in A$.

¹Přesná definice je následující: zobrazení $f: A \rightarrow B$ je podmnožina kartézského součinu $A \times B$ (tedy *relace*) taková, že $(a, b) \in f$ a $(a, b') \in f$ implikuje $b = b'$.

1.1.3 Funkce a zobrazení více reálných proměnných

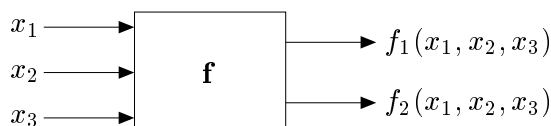
Uspořádané n -tici $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ reálných čísel říkáme (n -rozměrný) **vektor**. Zápís

$$\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m \quad (1.4)$$

označuje zobrazení, které vektoru $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ přiřadí vektor

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(x_1, \dots, x_n) = (f_1(\mathbf{x}), \dots, f_m(\mathbf{x})) = (f_1(x_1, \dots, x_n), \dots, f_m(x_1, \dots, x_n)) \in \mathbb{R}^m,$$

kde $f_1, \dots, f_m: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ jsou *složky* zobrazení. Píšeme také $\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_m)$. Obrázek ilustruje zobrazení $\mathbf{f}: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^2$:



Pro $m = 1$ jsou hodnotami zobrazení skaláry a budeme psát jeho jméno kurzívou, f . Pro $m > 1$ jsou hodnotami zobrazení vektory a proto jméno budeme psát tučně, \mathbf{f} . I když slova ‘funkce’ a ‘zobrazení’ znamenají jedno a to samé, je často zvykem pro $m = 1$ mluvit o *funkci* a pro $m > 1$ o *zobrazení*.

Je-li $n \in \{1, 2, 3\}$, často budeme proměnné zobrazení $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ značit x, y, z místo x_1, x_2, x_3 . Např. pro $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ je pohodlnější psát $f(x, y) = x^2 - xy$ místo $f(x_1, x_2) = x_1^2 - x_1x_2$.

1.2 Minimum a infimum

Pro množinu $Y \subseteq \mathbb{R}$ definujeme tyto pojmy (opakování z analýzy):

- **Dolní mez** množiny Y je každé číslo $a \in \mathbb{R}$, pro které $a \leq y$ pro všechna $y \in Y$.
- **Infimum** množiny Y je její největší dolní mez. Značíme jej $\inf Y$.
- **Nejmenší prvek** (neboli **minimum**) množiny Y je její dolní mez, která v ní leží. Pokud taková dolní mez existuje, je určena jednoznačně. Značíme $\min Y$.

Horní mez, největší prvek (maximum, $\max Y$) a supremum ($\sup Y$) se definují analogicky.

Minimum či maximum podmnožiny reálných čísel nemusí existovat. Je hlubokou vlastností reálných čísel, že v nich existuje infimum [supremum] každé zdola [shora] omezené podmnožiny. Tato vlastnost množiny \mathbb{R} se nazývá **úplnost**.

Zavedme dva prvky $-\infty$ a $+\infty$ (které nepatří do množiny \mathbb{R}) a definujme $-\infty < a < +\infty$ pro každé $a \in \mathbb{R}$. Pokud množina Y je zdola [shora] neomezená, definujeme $\inf Y = -\infty$ [$\sup Y = +\infty$]. Pro prázdnou množinu definujeme $\inf \emptyset = +\infty$ a $\sup \emptyset = -\infty$.

Příklad 1.1.

1. Množina všech horních mezí intervalu $[0, 1)$ je $[1, +\infty)$.
2. Množina všech horních mezí množiny \mathbb{R} je \emptyset .
3. Množina všech horních mezí množiny \emptyset je \mathbb{R} .
4. Interval $[0, 1)$ nemá největší prvek, ale má supremum 1.
5. Minimum množiny $\{1/n \mid n \in \mathbb{N}\}$ neexistuje, ale infimum je rovno 0.

6. Maximum množiny $\{x \in \mathbb{Q} \mid x^2 \leq 2\} = [-\sqrt{2}, \sqrt{2}] \cap \mathbb{Q}$ neexistuje, ale supremum je rovno $\sqrt{2}$.
7. $\max\{1, 2, 3\} = \sup\{1, 2, 3\} = 3$ (minimum a maximum každé konečné množiny existují a jsou rovny infimu a supremu)
8. Množina \mathbb{R} nemá nejmenší prvek, tedy $\min \mathbb{R}$ neexistuje.
9. Prázdná množina \emptyset nemá nejmenší prvek, tedy $\min \emptyset$ neexistuje. □

1.3 Extrémy funkce na množině

Mějme funkci $f: X' \rightarrow \mathbb{R}$ a množinu $X \subseteq X'$. Necht' $x \in X$ je takové, že $f(x) \leq f(x')$ pro všechna $x' \in X$. Pak x nazveme *minimum funkce f* na množině X , nebo také říkáme, že funkce f *nabývá minima* na množině X v prvku x . Chceme-li být přesnější, takový prvek x nazýváme *minimalizující argument* nebo *argument minima* (angl. *minimizer*) funkce na množině. Číslo $f(x)$ nazýváme *minimální hodnotou* funkce f na množině X a píšeme

$$f(x) = \min_{x' \in X} f(x'). \quad (1.5)$$

Pokud navíc je $f(x) < f(x')$ pro všechna $x' \in X \setminus \{x\}$, mluvíme o *ostrém minimu*. Množinu všech minimálních argumentů funkce f na množině X značíme

$$\operatorname{argmin}_{x \in X} f(x) = \{x \in X \mid f(x) \leq f(x') \forall x' \in X\} \subseteq X. \quad (1.6)$$

Podobně definujeme maximum funkce na množině. Minima a maxima funkce se souhrnně nazývají její *extrémy* nebo *optima*. Pokud odkaz na množinu X chybí, myslí se $X = X'$.

Je užitečné se k minimu funkce na množině postavit poněkud abstraktněji. Necht' $Y \subseteq \mathbb{R}$. Prvek $y \in Y$ nazveme *nejmenší prvek* (nebo také *minimální prvek*) množiny Y , jestliže $y \leq y'$ pro všechna $y' \in Y$. Nejmenší prvek značíme $\min Y$. Ne každá množina $Y \subseteq \mathbb{R}$ má nejmenší prvek (např. interval $(0, 1]$ ho nemá). Na druhou stranu, Y má nejvýše jeden minimální prvek.

Označme nyní

$$f(X) = \{f(x) \mid x \in X\} \subseteq \mathbb{R}$$

obraz množiny X funkcí f . Pokud množina $f(X)$ má nejmenší prvek, definujeme

$$\min_{x \in X} f(x) = \min\{f(x) \mid x \in X\} = \min f(X). \quad (1.7)$$

Funkce nemusí mít na množině minimum, což plyne z toho, že ne každá množina $Y \subseteq \mathbb{R}$ má minimální prvek. V tom případě je množina (1.6) prázdná.

Příklad 1.2.

- Necht' $X' = X = [1, \infty)$ a $f(x) = 1/x$. Máme $f(X) = (0, 1]$. Ale množina $(0, 1]$ nemá minimální prvek, proto funkce f na množině X nemá minimum.
- $\min_{x \in \mathbb{R}} |x - 1| = \min\{|x - 1| \mid x \in \mathbb{R}\} = \min \mathbb{R}_+ = 0$, $\operatorname{argmin}_{x \in \mathbb{R}} |x - 1| = \{1\}$
- Necht' $f(x) = \max\{|x|, 1\}$. Pak $\operatorname{argmin}_{x \in \mathbb{R}} f(x) = [-1, 1]$.

- Necht' $(a_1, a_2, \dots, a_5) = (1, 2, 3, 2, 3)$. Pak² $\max_{i=1}^5 a_i = 3$, $\operatorname{argmax}_{i=1}^5 a_i = \{3, 5\}$. □

1.4 Úloha spojité optimalizace

Matematickou optimalizací rozumíme hledání minima nějaké funkce $f: X' \rightarrow \mathbb{R}$ na nějaké množině $X \subseteq X'$. Tato formulace je velmi obecná, neboť množina X může být zcela libovolná. Tento kurs se zabývá *spojitou optimalizací*, ve které $X' = \mathbb{R}^n$ a množina X má nespočetný počet prvků a je popsána jako množina řešení soustavy rovnic a nerovnic. Tedy X je množina všech vektorů $(x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ splňujících

$$g_i(x_1, \dots, x_n) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m \quad (1.8a)$$

$$h_i(x_1, \dots, x_n) = 0, \quad i = 1, \dots, l \quad (1.8b)$$

pro dané funkce $g_1, \dots, g_m, h_1, \dots, h_l: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Funkce f, g_i, h_i jsou obvykle spojité a často i diferencovatelné a množina X je obvykle nespočetná a souvislá (nebo je aspoň sjednocením máleho počtu souvislých množin). Říkáme také, že minimalizujeme funkci $f(\mathbf{x})$ za podmínek (1.8) příp. (1.10). To lze psát také jako

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x_1, \dots, x_n) \\ \text{za podmíněk} \quad & g_i(x_1, \dots, x_n) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m \\ & h_i(x_1, \dots, x_n) = 0, \quad i = 1, \dots, l \\ & x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R} \end{aligned} \quad (1.9)$$

Podmínka $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}$ není vlastně omezením, často se ale píše, aby bylo jasné, co jsou proměnné úlohy. Toto je tedy *úloha spojité optimalizace v obecném tvaru*.

Soustavu (1.8) lze napsat kratěji ve vektorovém značení jako

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}, \quad (1.10a)$$

$$\mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}, \quad (1.10b)$$

kde $\mathbf{g}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, $\mathbf{h}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^l$ a $\mathbf{0}$ značí nulové vektory příslušné dimenze. Tedy

$$X = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}, \mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \}.$$

Ve shodě se značením (1.3) se pak úloha (1.9) může zapsat jako

$$\min \{ f(\mathbf{x}) \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}, \mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \}. \quad (1.11)$$

V matematické analýze se řešením úlohy (1.9) říká *extrémy funkce f vázané podmínkami (1.8)*. Pokud omezení chybí, mluví se o *volných extrémech* funkce f . V matematické optimalizaci se vžilo poněkud odlišné názvosloví:

- Funkce f se nazývá *účelová* (také pokutová, cenová, kritériální) funkce.

²Místo $\max_{i=1}^5 a_i$ se obvykle píše $\max_{i=1, \dots, 5} a_i$. Používáme zde první způsob v analogii se značením $\sum_{i=1}^5 a_i$.

- Prvky množiny X se nazývají *přípustná řešení*, což je vlastně protimluv, protože nemusí být řešeními úlohy (1.9). Prvkům množiny $\operatorname{argmin}_{\mathbf{x} \in X} f(\mathbf{x})$ se pak říká *optimální řešení* nebo *optimální argumenty* úlohy. Číslu $\min_{\mathbf{x} \in X} f(\mathbf{x})$ se říká *optimální hodnota* úlohy.
- Rovnice a nerovnice (1.8) se nazývají *omezující podmínky*, krátce *omezení*.
- Omezení (1.8a) příp. (1.8b) se nazývají omezení *typu nerovnosti* příp. *typu rovnosti*. Pokud omezení chybí ($m = l = 0$), jedná se o optimalizaci *bez omezení*.
- Pokud je omezení typu nerovnosti $g_i(\mathbf{x}) \leq 0$ splněno s rovností, tedy $g_i(\mathbf{x}) = 0$, říkáme, že je v bodě \mathbf{x} *aktivní*.
- Pokud $X \neq \emptyset$, úloha se nazývá *přípustná*, v opačném případě ($X = \emptyset$) je *nepřípustná*.

Dále uvedeme několik příkladů formulace (a často i řešení) úloh ve tvaru (1.9). Některé z nich byste měli být schopni řešit znalostmi a dovednostmi ze střední školy příp. z analýzy, jde tedy o opakování. Jiné předesílají, co přijde v pozdějších kapitolách.

Příklad 1.3. Pasterec vlastní 100 metrů pletiva a chce z něj udělat ohradu pro ovce o co největším obsahu. Ohrada bude mít tvar obdélníka, z něhož tři strany budou tvořeny plotem a zbylá strana řekou (ovce neplavou, řeka tedy slouží jako plot).

Označme strany obdélníka jako x, y . Obsah obdélníka je xy a jeho obvod (bez strany tvořené řekou) $2x + y$. Řešíme úlohu

$$\begin{aligned} \max \quad & xy \\ \text{za podmíněk} \quad & 2x + y = 100 \\ & x, y \geq 0 \end{aligned}$$

neboli

$$\max\{xy \mid x \geq 0, y \geq 0, 2x + y = 100\}.$$

To je úloha s $n = 2$ proměnnými, $m = 2$ omezeními typu nerovnosti a $l = 1$ omezením typu rovnosti.

I když jde o úlohu s omezeními, bylo by extrémně nešikovné snažit se ji řešit formalismem Lagrangeových multiplikátorů či KKT podmínek (pokud je někdo zná). Místo toho z podmínky $2x + y = 100$ vyjádříme y (přesněji: rovnice $2x + y = 100$ je ekvivalentní rovnici $y = 100 - 2x$) a dosadíme do původní úlohy. Tím dostaneme úlohu s jednou proměnnou

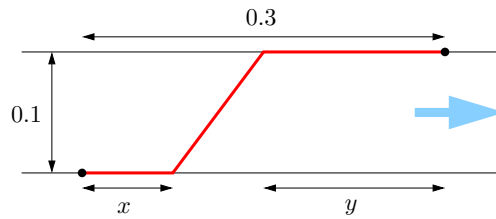
$$\max\{x(100 - 2x) \mid 0 \leq x \leq 50\},$$

což někdo raději píše jako $\max_{0 \leq x \leq 50} x(100 - 2x)$ nebo $\max_{x \in [0, 50]} x(100 - 2x)$.

Tu snadno vyřešíme metodami analýzy funkcí jedné proměnné. Optimální řešení může být buď ve vnitřním bodě nebo v jednom z krajních bodů intervalu $[0, 50]$. Maximum výrazu $x(100 - 2x)$ na množině \mathbb{R} snadno najdeme pomocí derivace, nabývá se v bodě $x = 25$. Ten zároveň splňuje podmínku $0 \leq x \leq 50$. Body na krajích intervalu mají menší hodnotu kritéria, tedy nejsou optimální. Dosazením dostaneme $y = 100 - 2x = 50$. \square

Příklad 1.4. Jste na pravém břehu řeky široké 0.1 km a chcete se dostat ke stanu na levém břehu, který je 0.3 km po proudu od bodu, který je na levém břehu nejbližší vám. Řeka teče pomalu, zanedbatelnou rychlostí. Plavete rychlostí 1 km/h a chodíte rychlostí 3 km/h (běhat odmítáte, protože je vedro). Jaký je nejkratší čas, za který se dokážete dostat ke stanu?

Optimální dráha bude mít tvar jako na obrázku:



Tedy nejdřív jdeme kus x po pravém břehu, pak přeplaveme šikmo do bodu na levém břehu vzdáleném y od stanu, nakonec dojdeme kus y po levém břehu.

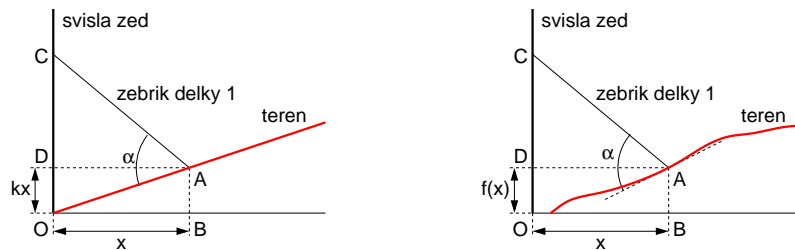
Může mít dráha jiný tvar? Těžko, pokud přijmeme, že dráha, kterou se dostaneme nejrychleji z bodu do bodu za předpokladu, že v každém místě prostoru se pohybujeme stejně rychle, je úsečka spojující tyto dva body.

Celkový čas je $t = \frac{1}{3}x + \sqrt{0.1^2 + (0.3 - x - y)^2} + \frac{1}{3}y$ (hodin). Ten chceme minimalizovat pro proměnné $x, y \in \mathbb{R}$. Všimněte si, že nepotřebujeme omezení $x, y \geq 0$ ani $x + y \leq 0.3$, neboť i bez nich dostaneme přípustné dráhy. Ovšem tyto dráhy očividně nejsou optimální, protože pro $x < 0$ bychom na začátku hloupě kráčeli pryč od stanu, pro $y < 0$ bychom doplávali až za stan, a pro $x + y > 0.3$ bychom zase plavali pryč od stanu. Takže kdybychom tato omezení přidali, úloha by se nezměnila (tj. omezení jsou redundantní).

Máme tedy úlohu se dvěma proměnnými bez omezení. Ovšem proměnné se vyskytují jen v součtu, tedy označíme-li $z = x + y$, je $t = \frac{1}{3}z + \sqrt{0.1^2 + (0.3 - z)^2}$ (samozřejmě vidíme i z obrázku, že x nebo y můžeme uvažovat nulové bez újmy na obecnosti). Pomocí derivace získáme stacionární bod $z = 0.3 - \sqrt{2}/40$ km ≈ 264.6 m. Minimální čas je $t \approx 0.19428$ hodin, tedy asi 11.7 minut. \square

Příklad 1.5. Zloděj má žebřík délky 1 a potřebuje se dostat přes svislou zeď ze strany, kde terén (v obrázku červeně) stoupá s konstantní (kladnou) směrnici k . Jak daleko od zdi musí zloděj žebřík zapíchnout do země, aby jeho druhý konec dosáhl co nejvýše na zeď? Jaký bude v tom případě úhel mezi žebříkem a terénem?

Nakreslíme situaci (levý obrázek):



Hledáme hodnotu x , která maximalizuje výšku vršku žebříku na zdi $|OC| = kx + \sqrt{1 - x^2}$, za podmínky $x \geq 0$ (protože žebřík nemůžeme zapíchnout za zeď). Tuto podmínku ale můžeme ignorovat, protože zjevně žádná poloha s $x < 0$ nebude optimální (vršek bude níž než pro jakékoli $x \geq 0$). Tedy opět analýza jedné proměnné: podmínka stacionarity je $k = x/\sqrt{1 - x^2}$, z toho $x = 1/\sqrt{1 + 1/k^2}$. Jedná se o maximum, což můžeme ověřit pomocí druhé derivace (musí být záporná), ale je to i vidět.

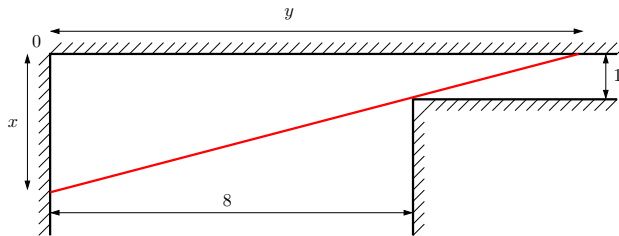
Ukážeme, že pro optimální x bude žebřík kolmý k terénu (tj. $\alpha = \pi/2$). Z podmínky $k = x/\sqrt{1 - x^2}$ vidíme, že $|AD|/|CD| = k$, protože $|AD| = x$ a $|CD| = \sqrt{1 - x^2}$. Ale z definice směrnice je také $kx/x = |DO|/|AD| = |AB|/|BO| = k$. Tedy pravoúhlé trojúhelníky DCA , BOA a DAO jsou si podobné. Protože součet úhlů v trojúhelníku je π , úhel CAO (tj. α) musí být pravý.

Tento výsledek jsme mohli uhodnout následující úvahou: pokud $\alpha < \frac{\pi}{2}$, pak zmenšením x vršek žebříku C povyleze vzhůru. Podobně pro $\alpha > \frac{\pi}{2}$ a zvětšení x . Když ale $\alpha = \frac{\pi}{2}$, pak zmenšení i zvětšení x způsobí pokles bodu C . Jinými slovy, z obrázku vidíme, že $\alpha = \frac{\pi}{2}$ je lokální maximum.

Úlohu nyní zobecníme tak, že terén nemá tvar přímky $f(x) = kx$, ale obecné neklesající diferencovatelné funkce $f(x)$ (viz obrázek nahoře vpravo). Dosahuje-li žebřík na zdi (bod C) nejvýše, jaký bude úhel (opět označený α) mezi žebříkem a terénem? Minimalizujeme výraz $f(x) + \sqrt{1-x^2}$. Stacionární podmínka je $f'(x) = x/\sqrt{1-x^2}$. To opět znamená, že je žebřík kolmý k terénu (odvození podobné jako minule). \square

Příklad 1.6. Jdete chodbou o šířce 8 m, která zatáčí do pravého úhlu a zároveň se zužuje na šířku 1 m (viz obrázek). Jaká je největší možná délka rovné tuhé tyče, se kterou lze zatáčkou projít? Požaduje se, abyste tyč drželi stále vodorovně.

Nejdelsí tyč, se kterou projedeme, se určitě bude dotýkat vnitřního rohu chodby (viz obrázek):



Uvažujme pravoúhlý trojúhelník, jehož přepona je tyč (na obrázku červeně) dotýkající se tohoto rohu a odvěsny jsou označeny x a y . Potřebujeme najít délky x a y , pro které bude délka odvěsny minimální (to bude chvíle, kdy bychom už delší tyč neprošli). Trojúhelník má vrcholy $(0, 0)$, $(x, 0)$ a $(0, y)$. Z podobnosti trojúhelníků máme $(x-1)/1 = 8/(y-8)$. Za této podmínky minimalizujeme čtverec délky odvěsny $x^2 + y^2$. Měli bychom přidat ještě podmínky $x, y \geq 0$, ale opět se snadno ukáže, že v optimálním řešení budou splněny.

Z podmínky vyjádříme $y = (8x)/(x-1) = 8/(1-1/x)$ a dosadíme do kritéria, takže minimalizujeme $x^2 + 64/(1-1/x)^2$. Stacionární podmínka je $2x(x^3 - 3x^2 + 3x - 65)/(x-1)^3 = 0$, což je ekvivalentní $2x(x^3 - 3x^2 + 3x - 65) = 0$ za předpokladu $x \neq 1$. Bohužel, to je rovnice 4. stupně. Její jediné reálné řešení je $x = 5$, což se dá uhodnout nebo použít vhodný numerický algoritmus. Z toho $y = 10$. Tedy největší možná délka tyče je $\sqrt{x^2 + y^2} = \sqrt{5^2 + 10^2} = 5\sqrt{5} \approx 11.18034$.

Existuje jiný, jednodušší způsob řešení, kterým se navíc vyhneme rovnici 4. stupně. Délku tyče lze napsat jako $8/\cos \alpha + 1/\sin \alpha$ kde α je úhel mezi tyčí a osou x . Hledáme α , pro které je tato délka minimální. Stacionární podmínka je $2 \sin \alpha = \cos \alpha$, tedy $\tan \alpha = \frac{1}{2}$. Lze ověřit, že jde o minimum. \square

Příklad 1.7. Na zahradě vám rostou melouny. Dnes je jich tam 200 kg. Každý den melouny narostou o 5 kg, ale cena 1 kg melounů na trhu klesne o 10 haléřů. Pokud dnešní cena 1 kg melounů na trhu je 9 Kč, jak dlouho máte čekat se sklizní, abyste dosáhli co největšího zisku? Předpokládejte, že melouny sklídíte a prodáte tentýž den.

Cena na trhu za t dnů je $(200 + 5t)(9 - t/10) = -t^2/2 + 25t + 1800$. Chceme najít takové t , pro které tato funkce bude maximální. Porovnáním derivace s nulou dostaneme stacionární bod $t = 25$, který je maximem.

Ovšem pozor: správně jsme měli požadovat, aby t bylo nezáporné a celočíselné, tedy $t \geq 0$ a $t \in \mathbb{Z}$. V našem případě jsme měli štěstí a optimální řešení t tyto podmínky splňuje. I kdyby je nesplňovalo, snadno bychom z něj spočetli optimální řešení, které by je splňovalo (jak?).

Prakticky zaměřený čtenář namítne, že žádný zelinář by to takto nedělal. Hmotnost melounů ani jejich výkupní cena nejsou lineární funkce času a skutečné funkce není snadné odhadnout. I kdyby je zelinář znal, jeho kritériem není jen velikost zisku z melounů, protože např. pěstuje i spoustu jiných věcí a v den optimální sklizně melounů zrovna musí okopávat okurky.

Většina slovních úloh v těchto skriptech bude takto nerealisticky zjednodušená (půjde o tzv. *toy problems*). Skutečné úlohy z optimalizační praxe jsou obvykle příliš složité na to, abychom je v tomto kursu dokázali uvést a vysvětlit. Tato složitost je ovšem často jen kvantitativního rázu (více proměnných a více omezení), *typ* úlohy je stejný jako u našich zjednodušených úloh. \square

Příklad 1.8. Najděte nejmenší kruh, který obsahuje dané body $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m \in \mathbb{R}^2$.

Kruh je množina $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 \mid \|\mathbf{x} - \mathbf{c}\| \leq r\}$, kde

$$\|\mathbf{x}\| = (x_1^2 + \dots + x_n^2)^{1/2}$$

označuje eukleidovskou normu vektoru $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$. Úlohu lze napsat jako

$$\begin{aligned} \min \quad & r \\ \text{za podmíněk} \quad & \|\mathbf{a}_i - \mathbf{c}\| \leq r, \quad i = 1, \dots, m \\ & \mathbf{c} \in \mathbb{R}^2 \\ & r \in \mathbb{R} \end{aligned} \tag{1.12}$$

Mohla by tam být ještě podmínka $r \geq 0$, ta je ale zbytečná, protože norma je nezáporná.

Tato úloha je konvexní a patří do třídy programování na kuželu druhého řádu (SOCP), což si ovšem řekneme až mnohem později. Na řešení SOCP existují numerické metody, které bychom mohli mechanicky použít. Algoritmus řešící naši úlohu lze ale vymyslet i se znalostmi, které máte nyní, a to následující úvahou.

Nejmenší kruh bude mít vždy na své hranici (tj. kružnici) aspoň jeden bod, protože jinak by ho bylo možno zmenšit a tedy by nebyl optimální. Optimální kruh může mít na hranici libovolný počet bodů (třeba všechny, když budou dané body ležet na kružnici; nebo jen jeden když bude $m = 1$, pak bude $r = 0$). Zároveň víme, že kružnice je jednoznačně určena třemi (nekolinárními) body. Úlohu tedy řeší tento algoritmus: Projdi všechny jedno-, dvou- a tří-prvkové podmnožiny daných bodů. Pro každou podmnožinu najdi nejmenší kružnici, která jí prochází a zjisti, jestli ostatní body leží v tomto kruhu (jehož hranicí je ta kružnice). Nejmenší z těch kruhů je optimální.

Vidíme, že pro tuto úvahu jsme matematický zápis úlohy (1.12) vlastně vůbec nepotřebovali.

Zobecněme nyní úlohu z roviny \mathbb{R}^2 do n -rozměrného prostoru \mathbb{R}^n . Tedy hledáme nejmenší n -rozměrnou kouli, která obsahuje dané body $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m \in \mathbb{R}^n$. Protože n -rozměrná koule je určena $n + 1$ body v obecné poloze, museli bychom procházet všechny jedno-, dvou- až $(n + 1)$ -prvkové podmnožiny. Pro velké n by tento algoritmus už nebyl vhodný, protože množství podmnožin by bylo příliš velké. \square

Příklad 1.9. Řešme tuto lineární soustavu třech rovnic o dvou neznámých:

$$\begin{aligned} x + 2y &= 6 \\ -x + y &= 3 \\ x + y &= 4 \end{aligned}$$

Tato soustava nemá řešení (je přeurčená). Chceme najít alespoň přibližné řešení.

Termín ‘přibližné řešení’ není jednoznačný, různí lidé jím mohou myslet různé věci. Nejčastěji užívaná formulace je minimalizovat součet čtverců³ zbytků (residuí) jednotlivých rovnic. Tedy minimalizujeme funkci

$$f(x, y) = (x + 2y - 6)^2 + (-x + y - 3)^2 + (x + y - 4)^2$$

na množině \mathbb{R}^2 . Je jasné, že $f(x, y) > 0$ pro všechna $x, y \in \mathbb{R}$, kdyby totiž $f(x, y) = 0$ pak by x, y bylo řešení soustavy. Minimum funkce f najdeme snadno, protože f je kvadratická funkce dvou proměnných. Nutná (a zde i postačující) podmínka na minimum je nulovost parciálních derivací.

Jiný způsob, jak formalizovat termín ‘přibližné řešení’, je minimalizovat funkci

$$f(x, y) = |x + 2y - 6| + |-x + y - 3| + |x + y - 4|.$$

Zde už nám derivace nepomohou. Uvidíme, že úloha je konvexní a dá se převést na lineární programování. \square

Příklad 1.10. Víme, že reálná veličina y závisí na reálné veličině x kvadraticky, tj. $y = ax^2 + bx + c$. Neznáme ovšem koeficienty a, b, c . Naměřili jsme hodnoty veličiny y pro m hodnot veličiny x , tj. máme dvojice $(x_i, y_i)_{i=1}^m$. Jak najdeme koeficienty a, b, c ?

To je úloha na lineární regresi. Lze ji formulovat ve smyslu nejmenších čtverců jako minimalizaci funkce

$$f(a, b, c) = \sum_{i=1}^m (ax_i^2 + bx_i + c - y_i)^2$$

přes proměnné $a, b, c \in \mathbb{R}$. Tato formulace má statistické odůvodnění (z principu maximální věrohodnosti) za předpokladu, že čísla x_1, \dots, x_n měříme přesně a nepřesnosti měření čísel y_1, \dots, y_m jsou i.i.d. normální s nulovou střední hodnotou a stejnou variancí. Minimum kvadratické funkce f opět najdeme porovnáním parciálních derivací s nulou. \square

Příklad 1.11. Jsou dány body $\mathbf{a}_1 \neq \mathbf{b}_1$ a $\mathbf{a}_2 \neq \mathbf{b}_2$ v prostoru \mathbb{R}^n . Najděte vzdálenost přímky procházející body $\mathbf{a}_1, \mathbf{b}_1$ od přímky procházející body $\mathbf{a}_2, \mathbf{b}_2$ (tj. vzdálenost mimoběžek, neboli délka příčky mimoběžek).

Víme, že i -tá (kde $i = 1, 2$) přímka je množina $\{\mathbf{a}_i + \alpha(\mathbf{b}_i - \mathbf{a}_i) \mid \alpha \in \mathbb{R}\}$. Hledáme bod na první přímce a bod na druhé přímce tak, aby jejich vzdálenost byla co nejmenší. Tedy minimalizujeme funkci

$$f(\alpha_1, \alpha_2) = \|\mathbf{a}_1 + \alpha_1(\mathbf{b}_1 - \mathbf{a}_1) - \mathbf{a}_2 - \alpha_2(\mathbf{b}_2 - \mathbf{a}_2)\|^2. \quad (1.13)$$

Opět je to kvadratická funkce dvou proměnných. \square

Příklad 1.12. Pán u stánku prodává lupínky za 120 Kč/kg a hranolky za 76 Kč/kg. Na výrobu 1 kg lupínků se spotřebuje 2 kg brambor a 0.4 kg oleje. Na výrobu 1 kg hranolků se spotřebuje 1.5 kg brambor a 0.2 kg oleje. Je nakoupeno 100 kg brambor a 16 kg oleje. Kolik má pán vyrobit lupínků a kolik hranolků, aby co nejvíce utržil? Přitom nepočítáme cenu surovin a předpokládáme, že všechny výrobky se prodají a nevyužité suroviny se po pracovní době vyhodí.

³‘Čtverec’ čísla znamená jeho druhou mocninu. Tento historický termín je jednak hezký a jednak se používá tak často, že ho budeme používat i my.

Tuto úlohu lze formalizovat takto:

$$\begin{aligned} \max \quad & 120l + 76h \\ \text{za podmíněk} \quad & 2l + 1.5h \leq 100 \\ & 0.4l + 0.2h \leq 16 \\ & l, h \geq 0 \end{aligned}$$

Optimální řešení je $l = 20$ kg lupínků a $h = 40$ kg hranolků. V tomto případě omezení $x, y \geq 0$ nejsou zbytečná. Kdybychom je vynechali, úloha by byla neomezená. \square

Příklad 1.13. Jsou dána čísla $c_1, \dots, c_n \in \mathbb{R}$. Najdi čísla $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}$, která maximalizují výraz $\sum_{i=1}^n c_i x_i$ za podmíněk $0 \leq x_i \leq 1$ ($i = 1, \dots, n$).

Tato úloha patří do třídy lineárního programování. Ovšem dokážeme ji vyřešit jednoduchou úvahou. Tvrdíme, že optimum se nabývá tehdy, když $x_i = 0$ pro $c_i < 0$ a $x_i = 1$ pro $c_i > 0$ (pro $c_i = 0$ je x_i libovolné v intervalu $[0, 1]$). Kdyby to tak totiž nebylo, mohli bychom účelovou funkci zvětšit zmenšením nějakého x_i pro $c_i < 0$ nebo zvětšením pro $c_i > 0$. Optimální hodnota je tedy $\sum_{i=1}^n \max\{0, c_i\}$, tj. součet kladných čísel c_i . \square

Příklad 1.14. Jsou dány body $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m \in \mathbb{R}^n$ a hledáme vektor $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$, který minimalizuje (bez omezujících podmínek) funkci

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m \|\mathbf{x} - \mathbf{a}_i\|^2. \quad (1.14)$$

Označíme-li $\mathbf{a}_i = (a_{i1}, \dots, a_{in})$, je $\sum_{i=1}^m \|\mathbf{x} - \mathbf{a}_i\|^2 = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n (x_j - a_{ij})^2$, tedy účelová funkce je součtem n funkcí, z nichž každá závisí jen na jedné souřadnici x_j . Minimum funkce f lze tedy najít tak, že najdeme minimum každé funkce zvlášť (úloha se nám tak ‘rozpadla’ na m nezávislých optimalizačních úloh). Jak snadno spočtete (a jistě jste dávno uhodli), minimum se nabývá v *těžišti* $(\mathbf{a}_1 + \dots + \mathbf{a}_m)/m$ daných bodů. \square

Příklad 1.15. Jsou dána čísla $a_1, \dots, a_m \in \mathbb{R}$. Najděte minimum funkce

$$f(x) = \sum_{i=1}^m |x - a_i|. \quad (1.15)$$

Seřadíme čísla a_1, \dots, a_m vzestupně, tedy předpokládáme $a_1 \leq a_2 \leq \dots \leq a_{m-1} \leq a_m$. Funkce f je po částech lineární (přesněji: je afinní), je diferencovatelná všude kromě bodů a_i . Derivace je konstantní pro každý interval (a_{i-1}, a_i) . Najděte hodnotu těchto derivací (nejpozději teď je nutno si nakreslit obrázek!). Z toho usoudíme, kde je funkce klesající, kde rostoucí a kde konstantní. Nyní je jasné, kde f nabývá minima: pro m liché je to v bodě $a_{(m+1)/2}$, pro m sudé na intervalu $[a_{m/2}, a_{m/2+1}]$. Argument minima se označuje jako *medián* čísel a_1, \dots, a_m (pro sudé m se konvencí bere číslo $\frac{1}{2}(a_{m/2}, a_{m/2+1})$). \square

Příklad 1.16. Jsou dány body $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m \in \mathbb{R}^n$. Najděte minimum funkce

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m \|\mathbf{x} - \mathbf{a}_i\|. \quad (1.16)$$

Pro $n = 1$ se funkce (1.16) redukuje na (1.15). Pro $n \geq 2$ je řešení úlohy známo jako *geometrický medián*. Ovšem na rozdíl od obyčejného mediánu se minimum obecně nenabývá v žádném z bodů $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m$. Neexistuje algoritmus, který by pro $n \geq 2$ našel minimum funkce (1.16) v konečném počtu kroků. Dobrá zpráva ale je, že úloha je konvexní (patří do třídy SOCP, o které jsme se už zmínili).

Pro případ $n = 2$ má úloha jednoduchý mechanický model⁴. Do vodorovného prkna vyvrátíme díry o souřadnicích \mathbf{a}_i . Každou dírou provlečeme provázek. Provázky jsou nahoře svázané uzlem do jednoho bodu a dole mají závaží o stejné hmotnosti. Poloha uzlu je \mathbf{x} . Hodnota $f(\mathbf{x})$ je potenciální energie soustavy a ustálený stav odpovídá minimu $f(\mathbf{x})$. \square

Příklad 1.17. Mějme m bodů $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m \in \mathbb{R}^n$ v n -rozměrném prostoru. Úkolem je rozmístit dalších k bodů $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$ tak, aby průměrná vzdálenost bodu \mathbf{a}_i k nejbližšímu bodu \mathbf{x}_j byla co nejmenší. Tedy minimalizujeme účelovou funkci

$$f(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k) = \sum_{i=1}^m \min_{j=1}^k \|\mathbf{a}_i - \mathbf{x}_j\| \quad (1.17)$$

po neznámé vektory $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$. Úloha je známá jako *shlukování*. Jako motivaci si představme optimální rozmístění cisteren ve vesnici, kde občas neteče voda. Zde máme $n = 2$, \mathbf{a}_i jsou souřadnice domů a \mathbf{x}_j jsou souřadnice cisteren. Chceme, aby průměrná vzdálenost obyvatele k nejbližší cisterně byla co nejmenší.

Není znám (a pravděpodobně nikdy nebude) algoritmus, který by pro libovolný vstup (tedy libovolné $n, m, k \in \mathbb{N}$ a $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m \in \mathbb{R}^n$) našel globální minimum funkce (1.17) za prakticky přijatelný čas. Lze totiž dokázat, že úloha je tzv. NP-těžká⁵. V praktické situaci často použijeme algoritmus, který najde pouze přibližné (typicky lokální) optimum, např. *k-means*. \square

Příklad 1.18. Necht' (V, E) je ohodnocený neorientovaný graf, tj. V je konečná množina, $E \subseteq \binom{V}{2}$ je množina dvouprvkových podmnožin V , a je dáno zobrazení $c: E \rightarrow \mathbb{R}$ (tedy každá hrana $\{i, j\} \in E$ má přiřazené číslo c_{ij}). Úloha na *maximální řez* (*maximum cut*)⁶ v grafu zní

$$\begin{aligned} \max \quad & \sum_{\{i,j\} \in E} c_{ij} x_i x_j \\ \text{za podmíněk} \quad & x_i^2 = 1, \quad i \in V \\ & x_i \in \mathbb{R}, \quad i \in V \end{aligned} \quad (1.18)$$

Účelová funkce je kvadratická (dokonce bilineární) a máme $|V|$ kvadratických omezení typu rovnosti. Každé omezení $x_i^2 = 1$ je ekvivalentní $x_i \in \{-1, 1\}$, tedy množina přípustných řešení má konečný počet ($2^{|V|}$) prvků a jedná se tedy o kombinatorickou úlohu. Všimněte si že, přísně vzato, omezení nemůžeme psát jako $x_i \in \{-1, 1\}$, protože to není ve tvaru (1.9). Jedná se o klasickou NP-těžkou úlohu, proto už pro některé poměrně malé úlohy je prakticky nemožné najít globální optimum. \square

⁴Toto mechanické zařízení je známé jako *Varignon frame* a v minulosti se opravdu používalo na řešení úlohy. Úloha má bohatou historii, je známa také jako Fermat-Weberův problém.

⁵Tento pojem patří do *teorie složitosti algoritmů*, kterou jste ještě nebrali. Zde jen řekneme, že pro NP-těžkou úlohu jen malá naděje, že bude někdy nalezen algoritmus, který by úlohu shlukování řešil v polynomiálním čase. Algoritmus řeší úlohu v *polynomiálním čase*, jestliže existuje polynom p takový, že pro každý vstup najde řešení v čase menším než $p(L)$, kde L je počet bitů potřebných k zápisu vstupu.

⁶Úloha byla intenzivně studována nejen v kombinatorické optimalizaci, ale také ve statistické fyzice pod názvem hledání *minimální energie Isingova modelu*.

1.5 Cvičení

1.1. Vyřešte následující úlohy, přičemž slovní úlohy nejdříve formulujte ve tvaru (1.9). Stačí vám k tomu zdravý rozum a derivace funkcí jedné proměnné.

- a) $\min\{x^2 + y^2 \mid x > 0, y > 0, xy \geq 1\}$
- b) $\min\{(x-2)^2 + (y-1)^2 \mid x^2 \leq 1, y^2 \leq 1\}$
- c) $\min\{x \mid x \in \mathbb{R}, x \geq a_i (i = 1, \dots, n)\}$ pro daná $a_1, \dots, a_n \in \mathbb{R}$
- d) Máte vyrobit papírovou krabici (včetně víka) o objemu 72 litrů, jejíž délka je dvojnásobek její šířky. Jaké budou její rozměry, má-li se na ní spotřebovat co nejméně papíru? Tloušťka stěn je zanedbatelná.
- e) Jaké má rozměry válec s jednotkovým objemem a nejmenším povrchem?
- f) Najděte rozměry püllitru, na jehož výrobu je třeba co nejméně skla. Tloušťka stěn je zanedbatelná.
- g) Najděte obsah největšího obdélníka vepsaného do kružnice s poloměrem 1.
- h) Obdélník v rovině má jeden roh v počátku a druhý na křivce $y = x^2 + x^{-2}$, přičemž jeho strany jsou rovnoběžné se souřadnicovými osami. Pro jaké x bude jeho obsah minimální? Může být jeho obsah libovolně veliký?
- i) Najděte bod v rovině na parabole s rovnicí $y = x^2$ nejbližší bodu $(3, 0)$.
- j) Hektarová oblast obdélníkového tvaru se má obehnat ze tří stran živým plotem, který stojí 1000 korun na metr, a ze zbývajících stran obyčejným plotem, který stojí 500 korun na metr. Jaké budou rozměry oblasti při nejmenší ceně plotu?
- k) x, y jsou čísla v intervalu $[1, 5]$ taková, že jejich součet je 6. Najděte tato čísla tak, aby xy^2 bylo (a) co nejmenší a (b) co největší.
- l) Hledá se n -tice čísel $x_1, \dots, x_n \in \{-1, +1\}$ tak, že jejich součin je kladný a jejich součet minimální. Jako výsledek napište (co nejjednodušší) vzorec, který udává hodnotu tohoto minimálního součtu pro obecné n .
- m) *Potkaní biatlon*. Potkan stojí na břehu kruhového jezírka o poloměru 1 a potřebuje se dostat na protilehlý bod břehu. Potkan plave rychlostí v_1 a běží rychlostí v_2 . Chce se do cíle dostat co nejrychleji, přičemž může běžet, plavat, nebo zvolit kombinaci obojího. Jakou dráhu zvolí? Strategie potkana může být různá pro různé hodnoty v_1 a v_2 , vyřešte pro všechny kombinace těchto hodnot.
- n) (★) (na pracovní prostor robotu) Do mezikružní (množinový rozdíl dvou soustředných kruhů o poloměrech $R > r > 0$) máme vepsat elipsu s co největším obsahem. Nejen hranice elipsy, ale i její vnitřek musí ležet v mezikružní.

1.2. Necht' X je libovolná množina a $f: X \rightarrow \mathbb{R}$. Necht' $g: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ je rostoucí funkce. Dokažte, že $\operatorname{argmin}_{x \in X} f(x) = \operatorname{argmin}_{x \in X} g(f(x))$.

1.3. Necht' X je libovolná množina, $Y \subset X$, a $f: X \rightarrow \mathbb{R}$. Najděte co nejobecnější podmínku, za které platí $\operatorname{argmin}_{x \in Y} f(x) = Y \cap \operatorname{argmin}_{x \in X} f(x)$.

Část I

Použití lineární algebry v optimalizaci

Kapitola 2

Maticová algebra

Cílem této kapitoly je zopakovat si základní maticové pojmy a naučit se manipulovat s maticovými výrazy a rovnicemi, aniž byste zatím museli mnoho vědět o lineární algebře.

Reálná **matice** rozměru $m \times n$ je tabulka reálných čísel s m řádky a n sloupci¹,

$$\mathbf{A} = [a_{ij}] = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix},$$

kde a_{ij} jsou **prvky** matice. Množinu všech reálných matic rozměru $m \times n$ značíme $\mathbb{R}^{m \times n}$.

Používají se tyto názvy:

- Pro $m = n$ se matice nazývá **čtvercová** a pro $m \neq n$ **obdélníková**, přičemž pro $m < n$ je **široká** a pro $m > n$ je **úzká**.
- **Diagonální prvky** matice jsou prvky a_{11}, \dots, a_{pp} , kde $p = \min\{m, n\}$. Matice je **diagonální**, když všechny nediagonální prvky jsou nulové, tedy $a_{ij} = 0$ pro všechna $i \neq j$. Všimněte si, že diagonální matice nemusí být čtvercová. Čtvercovou ($m = n$) diagonální matici značíme $\mathbf{A} = \text{diag}(a_{11}, a_{22}, \dots, a_{nn})$.
- **Nulová matice** má všechny prvky nulové. Značíme ji $\mathbf{0}_{m \times n}$ (pokud jsou rozměry jasné z kontextu, pak pouze $\mathbf{0}$).
- **Jednotková matice** je čtvercová diagonální, jejíž diagonální prvky jsou jedničky. Značíme ji \mathbf{I}_n (pokud jsou rozměry jasné z kontextu, pak pouze \mathbf{I}).
- **Horní [dolní] trojúhelníková matice** má $a_{ij} = 0$ pro všechna $i > j$ [$i < j$]. Všimněte si, že horní/dolní trojúhelníková matice nemusí být čtvercová.

2.1 Binární operace s maticemi

V algebře reálných matic se reálná čísla nazývají také **skaláry**². Na maticích jsou definovány následující operace:

¹Formálněji můžeme matice definovat jako zobrazení $\{1, \dots, m\} \times \{1, \dots, n\} \rightarrow \mathbb{R}$ (podobně, vektor $(x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ lze považovat za zobrazení $\{1, \dots, n\} \rightarrow \mathbb{R}$). Množinu $\mathbb{R}^{m \times n}$ můžeme vidět jako množinu $(\mathbb{R}^m)^n$. V každém případě ale musíme dodat, že matici značíme tabulkou v hranatých závorkách.

²Přesněji, pohlížíme-li na množinu všech matic rozměru $m \times n$ jako na lineární prostor, jedná se o skaláry tohoto lineárního prostoru.

- Součin skaláru $\alpha \in \mathbb{R}$ a matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ je matice $\alpha \mathbf{A} = \mathbf{A} \alpha = [\alpha a_{ij}] \in \mathbb{R}^{m \times n}$.
Součin $\frac{1}{\alpha} \mathbf{A}$ píšeme krátce jako $\frac{\mathbf{A}}{\alpha}$ nebo \mathbf{A}/α . Součin $(-1)\mathbf{A}$ píšeme krátce jako $-\mathbf{A}$.
- Součet matic $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ je matice $\mathbf{A} + \mathbf{B} = [a_{ij} + b_{ij}] \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Rozdíl matic je $\mathbf{A} - \mathbf{B} = \mathbf{A} + (-\mathbf{B})$.
- **Maticový součin** matic $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times p}$ a $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{p \times n}$ je matice $\mathbf{C} = \mathbf{AB} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ s prvky

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^p a_{ik} b_{kj}, \quad i = 1, \dots, m, \quad j = 1, \dots, n. \quad (2.1)$$

Všimněte si, že násobit lze jen matice, které mají vnitřní rozměr (p) stejný.

Vlastnosti maticového součinu:

- $(\mathbf{AB})\mathbf{C} = \mathbf{A}(\mathbf{BC})$
- $(\mathbf{A} + \mathbf{B})\mathbf{C} = \mathbf{AC} + \mathbf{BC}$ a $\mathbf{A}(\mathbf{B} + \mathbf{C}) = \mathbf{AB} + \mathbf{AC}$
- $\mathbf{A}\mathbf{I}_n = \mathbf{A} = \mathbf{I}_m\mathbf{A}$
- $(\alpha\mathbf{A})\mathbf{B} = \mathbf{A}(\alpha\mathbf{B}) = \alpha(\mathbf{AB})$

Obecně neplatí $\mathbf{AB} = \mathbf{BA}$ (maticový součin není komutativní)!

Poznamenejme, že výraz $\alpha\mathbf{A}$ pro $\alpha \in \mathbb{R}$ nelze považovat za maticový součin 'matice' α rozměru 1×1 a matice \mathbf{A} , protože vnitřní rozměr matic by byl obecně různý. Tedy násobení matice skalárem je jiná operace, než maticový součin.

Pro čtvercovou matici \mathbf{A} značí \mathbf{A}^k maticový součin k matic \mathbf{A} .

2.2 Transpozice a symetrie

Transpozici matice $\mathbf{A} = [a_{ij}] \in \mathbb{R}^{m \times n}$ značíme $\mathbf{A}^T = [a_{ji}] \in \mathbb{R}^{n \times m}$. Vlastnosti transpozice:

- $(\alpha\mathbf{A})^T = \alpha\mathbf{A}^T$
- $(\mathbf{A}^T)^T = \mathbf{A}$
- $(\mathbf{A} + \mathbf{B})^T = \mathbf{A}^T + \mathbf{B}^T$
- $(\mathbf{AB})^T = \mathbf{B}^T\mathbf{A}^T$

Čtvercová matice se nazývá

- **symetrická**, když $\mathbf{A}^T = \mathbf{A}$, tj. $a_{ij} = a_{ji}$,
- **antisymetrická**, když $\mathbf{A}^T = -\mathbf{A}$, tj. $a_{ij} = -a_{ji}$ (z čehož plyne $a_{ii} = 0$).

2.3 Hodnost

Hodnost matice je dimenze lineárního obalu jejích sloupců. Značíme ji $\text{rank } \mathbf{A}$. Platí

$$\text{rank } \mathbf{A} = \text{rank}(\mathbf{A}^T), \quad (2.2)$$

tedy³ hodnost je také rovna dimenzi lineárního obalu řádků. Tato rovnost není zdaleka očividná, dokážeme ji v §3.2.3 (důkaz najdete také v každé učebnici lineární algebry).

³Někdo by raději psal $\text{rank}(A)$ než $\text{rank } \mathbf{A}$, ale před rozmožením počítačů bylo běžnější psát např. $\sin x$ než $\sin(x)$.

Z (2.2) plyne, že pro matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ je

$$\text{rank } \mathbf{A} \leq \min\{m, n\}. \quad (2.3)$$

Když $\text{rank } \mathbf{A} = \min\{m, n\}$, říkáme, že matice má **plnou hodnost**. Je $\text{rank } \mathbf{A} = n$ právě když \mathbf{A} má lineárně nezávislé sloupce, a $\text{rank } \mathbf{A} = m$ právě když \mathbf{A} má lineárně nezávislé řádky. Čtvercová matice s plnou hodností se nazývá **regulární**. Čtvercová matice, která nemá plnou hodnost, se nazývá **singulární**.

Je užitečné si pamatovat nerovnost (důkaz viz Cvičení 3.13)

$$\text{rank}(\mathbf{AB}) \leq \min\{\text{rank } \mathbf{A}, \text{rank } \mathbf{B}\}. \quad (2.4)$$

2.4 Inverze

Když platí

$$\mathbf{AB} = \mathbf{I}, \quad (2.5)$$

matice \mathbf{B} se nazývá **pravá inverze** matice \mathbf{A} a matice \mathbf{A} se nazývá **levá inverze** matice \mathbf{B} . Pravá či levá inverze nemusí existovat nebo nemusí být jediná. Pravá inverze matice existuje právě tehdy, má-li matice lineárně nezávislé řádky (dokážeme to později ve Větě 3.5, zatím si to pamatujte). Levá inverze matice existuje právě tehdy, má-li matice lineárně nezávislé sloupce (což plyne z předchozího, když si (2.5) napíšeme jako $\mathbf{B}^T \mathbf{A}^T = \mathbf{I}$; viz také Věta 3.7).

Jestliže matice \mathbf{A} je čtvercová a má pravou inverzi, má zároveň i levou inverzi a obě inverze se rovnají a jsou jediné. Opravdu: je-li $\mathbf{AX} = \mathbf{I}$ a $\mathbf{YA} = \mathbf{I}$, pak $\mathbf{YAX} = \mathbf{Y} = \mathbf{X}$. Protože toto platí pro každou levou inverzi a každou pravou inverzi, jsou zároveň jediné. Pak mluvíme pouze o **inverzi** matice a značíme ji \mathbf{A}^{-1} . Matice má inverzi, právě když je regulární. Vlastnosti inverze:

- $\mathbf{AA}^{-1} = \mathbf{I} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}$
- $(\mathbf{A}^{-1})^{-1} = \mathbf{A}$
- $(\mathbf{AB})^{-1} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^{-1}$
- $(\alpha\mathbf{A})^{-1} = \alpha^{-1}\mathbf{A}^{-1}$
- $(\mathbf{A}^T)^{-1} = (\mathbf{A}^{-1})^T$, což krátce značíme \mathbf{A}^{-T} .

2.5 Determinant

Determinant je funkce $\mathbb{R}^{n \times n} \rightarrow \mathbb{R}$ (tedy přiřazuje čtvercové matici skalár) definovaná jako

$$\det \mathbf{A} = \sum_{\sigma} \text{sgn } \sigma \prod_{i=1}^n a_{i\sigma(i)}, \quad (2.6)$$

kde sčítáme přes všechny permutace n prvků $\sigma: \{1, \dots, n\} \rightarrow \{1, \dots, n\}$, přičemž $\text{sgn } \sigma$ označuje znaménko permutace. Některé vlastnosti determinantu:

- $\det \mathbf{I} = 1$
- $\det(\mathbf{AB}) = (\det \mathbf{A})(\det \mathbf{B})$
- $\det \mathbf{A}^{-1} = (\det \mathbf{A})^{-1}$ (plyne z předchozího pro $\mathbf{B} = \mathbf{A}^{-1}$)

- $\det \mathbf{A}^T = \det \mathbf{A}$
- $\det \mathbf{A} = 0$ právě tehdy, když \mathbf{A} je singulární
- Determinant je multilineární funkce sloupců matice, tj. je lineární funkcí libovolného sloupce, jsou-li všechny ostatní sloupce konstantní.
- Determinant je alternující funkce sloupců matice, tj. prohození dvou sloupců změní znaménko determinantu.

2.6 Matice s jedním sloupcem nebo jedním řádkem

Matice s jediným sloupcem (tedy prvek $\mathbb{R}^{m \times 1}$) se také nazývá **sloupcový vektor**⁴. Matice s jediným řádkem (tedy prvek $\mathbb{R}^{1 \times n}$) se také nazývá **řádkový vektor**.

Lineární prostor $\mathbb{R}^{m \times 1}$ všech matic s jediným sloupcem je ‘skoro stejný’ jako lineární prostor \mathbb{R}^m všech uspořádaných m -tic (x_1, \dots, x_m) . Proto je zvykem tyto prostory ztotožnit a bez upozornění přecházet mezi oběma významy. Prvkům

$$\mathbf{x} = \underbrace{(x_1, \dots, x_m)}_{\text{uspořádaná } m\text{-tice}} = \underbrace{\begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix}}_{\text{matice } m \times 1} \in \mathbb{R}^m$$

tohoto prostoru budeme říkat krátce **vektory**. Jinak řečeno, slovem *vektor* (bez přívlastku) budeme rozumět *sloupcový vektor* nebo také uspořádanou n -tici čísel⁵.

Všimněme si případů, kdy se v maticovém součinu vyskytnou vektory:

- Pro matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ a vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, výraz $\mathbf{A}\mathbf{x}$ je maticový součin matice $m \times n$ a matice $n \times 1$, což je (sloupcový) vektor délky m . Je to vlastně lineární kombinace sloupců matice \mathbf{A} s koeficienty \mathbf{x} (viz §3.2).
- Pro matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ a vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$, výraz $\mathbf{x}^T \mathbf{A}$ je maticový součin matice $1 \times m$ a matice $m \times n$, což je řádkový vektor délky n . Je to vlastně lineární kombinace řádků matice \mathbf{A} s koeficienty \mathbf{x} .
- Pro $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ je $\mathbf{x}^T \mathbf{y} = x_1 y_1 + \dots + x_n y_n$ je maticový součin řádkového vektoru \mathbf{x}^T a sloupcového vektoru \mathbf{y} , jehož výsledkem je skalár. Je to standardní skalární součin vektorů \mathbf{x} a \mathbf{y} (více si o něm řekneme §4.1).
- Pro $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$ a $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ je $\mathbf{x}\mathbf{y}^T$ matice rozměru $m \times n$, které se někdy říká **vnější součin** vektorů \mathbf{x} a \mathbf{y} nebo **dyáda**.

Symbol $\mathbf{1}_n = (1, \dots, 1) \in \mathbb{R}^n$ značí (sloupcový) vektor s jedničkovými složkami. Pokud n plyne z kontextu, píšeme jen $\mathbf{1}$. Příklad: pro $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ je $\mathbf{1}^T \mathbf{x} = x_1 + \dots + x_n$.

Symbol $\mathbf{e}_i = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0) \in \mathbb{R}^n$ (jednička na i -tém místě) značí i -tý (sloupcový) vektor standardní báze, kde počet n složek vektoru \mathbf{e}_i je určen kontextem. Standardní báze tvoří sloupce jednotkové matice, $[\mathbf{e}_1 \ \dots \ \mathbf{e}_n] = \mathbf{I}_n$.

⁴V lineární algebře má slovo *vektor* obecnější význam než v maticové algebře: znamená prvek lineárního prostoru (který se někdy také nazývá *vektorový prostor*).

⁵Totéž bychom samozřejmě mohli udělat s řádky (a někdo to tak i dělá, např. počítačové grafici).

2.7 Matice sestavené z bloků

Matici je možno sestavit z několika jejích **podmatic** (zvaných též **bloky**), např.

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{bmatrix}, \quad [\mathbf{A} \quad \mathbf{B}], \quad \begin{bmatrix} \mathbf{A} \\ \mathbf{B} \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{I} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D} \end{bmatrix}. \quad (2.7)$$

Rozměry jednotlivých bloků musí být slučitelné, v prvním příkladu musí mít např. matice \mathbf{A}, \mathbf{B} stejný počet řádků a matice \mathbf{A}, \mathbf{C} stejný počet sloupců. V posledním příkladu jsou rozměry jednotkové matice \mathbf{I} a nulové matice $\mathbf{0}$ určeny rozměry matic \mathbf{A} a \mathbf{D} .

Při násobení matic sestavených z bloků je užitečné pravidlo, že lze formálně užít obvyklý postup pro násobení matic, pouze místo prvků matice si představíme bloky.

Příklad 2.1. Jsou-li a, b, c, d, x, y skaláry, máme

$$\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} ax + by \\ cx + dy \end{bmatrix}.$$

Jsou-li $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}, \mathbf{D}, \mathbf{X}, \mathbf{Y}$ matice vhodných rozměrů, máme tedy (ověřte dle vzorce (2.1)!) □

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{X} \\ \mathbf{Y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{AX} + \mathbf{BY} \\ \mathbf{CX} + \mathbf{DY} \end{bmatrix}.$$

Často je užitečné vnímat matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ jako matici sestavenou z bloků

$$\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1 \quad \cdots \quad \mathbf{a}_n],$$

kde sloupcové vektory $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n \in \mathbb{R}^m$ jsou sloupce matice \mathbf{A} . Matici lze také vnímat jako sestavenou z bloků

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1^T \\ \vdots \\ \mathbf{a}_m^T \end{bmatrix},$$

kde řádkové vektory $\mathbf{a}_1^T, \dots, \mathbf{a}_m^T$ jsou řádky matice \mathbf{A} , přičemž $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m \in \mathbb{R}^n$.

Vyjádríme-li matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times p}$ pomocí řádků a matici $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{p \times n}$ pomocí sloupců, je

$$\mathbf{AB} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1^T \\ \vdots \\ \mathbf{a}_m^T \end{bmatrix} [\mathbf{b}_1 \quad \cdots \quad \mathbf{b}_n] = [\mathbf{Ab}_1 \quad \cdots \quad \mathbf{Ab}_n] = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1^T \mathbf{B} \\ \vdots \\ \mathbf{a}_m^T \mathbf{B} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1^T \mathbf{b}_1 & \cdots & \mathbf{a}_1^T \mathbf{b}_n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{a}_m^T \mathbf{b}_1 & \cdots & \mathbf{a}_m^T \mathbf{b}_n \end{bmatrix}. \quad (2.8)$$

Vyjádríme-li matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times p}$ pomocí sloupců a matici $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{p \times n}$ pomocí řádků, je

$$\mathbf{AB} = [\mathbf{a}_1 \quad \cdots \quad \mathbf{a}_p] \begin{bmatrix} \mathbf{b}_1^T \\ \vdots \\ \mathbf{b}_p^T \end{bmatrix} = \mathbf{a}_1 \mathbf{b}_1^T + \cdots + \mathbf{a}_p \mathbf{b}_p^T. \quad (2.9)$$

2.8 Co je soustava lineárních rovnic?

Soustava rovnic je *lineární*, jestliže se v žádné rovnici proměně nevyskytují v mocninách (např. x^2) ani v součinech (např. xy). Tedy, pravá i levá strana každé rovnice je polynom nejvýše prvního stupně (ale ve více proměnných, viz zač. §6). Když pojmenujeme proměnné jako x_1, \dots, x_n , každou lineární soustavu m rovnic s n neznámými jde zapsat jako

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + \dots + a_{1n}x_n &= b_1, \\ &\vdots \\ a_{m1}x_1 + \dots + a_{mn}x_n &= b_m, \end{aligned}$$

neboli

$$\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j = b_i, \quad i = 1, \dots, m.$$

neboli

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \tag{2.10}$$

kde $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$. Soustava je **homogenní** pokud $\mathbf{b} = \mathbf{0}$ (tj. každé z čísel b_1, \dots, b_m je nulové), v opačném případě (aspoň jedno z čísel b_1, \dots, b_m je nenulové) je **nehomogenní**.

Chceme-li řešit lineární soustavu na počítači, příslušné algoritmy většinou vyžadují soustavu ve tvaru (2.10). Ovšem ne vždy dostaneme lineární soustavu v tomto tvaru. Přepsat takové soustavy do tvaru (2.10) vyžaduje cvik, viz následující příklady a Cvičení 2.7.

Příklad 2.2. Soustava $\{\mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \mathbf{A}^T \mathbf{y} = \mathbf{x}\}$, kde $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ a $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$ jsou neznámé a $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ a $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ jsou dány. Je to lineární soustava $m + n$ rovnic s $m + n$ neznámými. \square

Příklad 2.3. Soustava $\mathbf{AX} + \mathbf{X}^T \mathbf{B}^T = \mathbf{C}$, kde $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ je neznámá a $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times m}$ a $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ jsou dány. Je to lineární soustava n^2 rovnic s mn neznámými. \square

Příklad 2.4. Soustava

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^n x_{ij} &= a_i, \quad i = 1, \dots, m, \\ \sum_{i=1}^m x_{ij} &= b_j, \quad j = 1, \dots, n, \end{aligned}$$

kde $x_{11}, \dots, x_{mn} \in \mathbb{R}$ jsou neznámé a $a_1, \dots, a_m, b_1, \dots, b_n \in \mathbb{R}$ jsou dány. Je to lineární soustava $m + n$ rovnic s mn neznámými. \square

2.9 Maticové zločiny

Při manipulaci s maticovými výrazy a rovnicemi dělají začátečníci někdy hrubé chyby, kterých se lze při alespoň minimální pozornosti vyhnout. Takové chyby jsou neomluvitelné. Uvedme typické příklady těchto zločinů.

2.9.1 Výraz je nesmyslný kvůli rozměrům matic

Jako první příklad uveďme chyby, kdy výraz nemá smysl kvůli rozměrům matic a vektorů. Např.:

- Pokud $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{2 \times 3}$ a $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$, tak následující výrazy jsou chybné:

$$\mathbf{A} + \mathbf{B}, \quad \mathbf{A} = \mathbf{B}, \quad [\mathbf{A} \ \mathbf{B}], \quad \mathbf{A}^T \mathbf{B}, \quad \mathbf{A}^{-1}, \quad \det \mathbf{A}, \quad \mathbf{A}^2.$$

- Zcela odstrašující je použití zlomku pro matice, např. $\frac{\mathbf{A}}{\mathbf{B}}$. ‘Zlomková čára’ není pro matice definována. Nebyla by totiž jednoznačná, protože může znamenat buď $\mathbf{A}\mathbf{B}^{-1}$ nebo $\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}$.
- Inverze čtvercové, ale evidentně singulární matice. Např. $(\mathbf{w}\mathbf{w}^T)^{-1}$, kde $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^3$. Singulárity matice plyne např. z (2.4).
- Předpoklad, že existuje pravá inverze úzké matice. Ale úzká matice má lineárně závislé řádky, proto nemá pravou inverzi. Napíšeme-li proto $\mathbf{Q}\mathbf{Q}^T = \mathbf{I}$ pro matici $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{5 \times 3}$, je to zločin.

Příklad 2.5. Vidíme-li výraz $(\mathbf{A}^T \mathbf{B})^{-1}$, musí nám okamžitě hlavou proběhnout tyto úvahy o rozměrech matic $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ a $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{k \times p}$:

- Aby byly kompatibilní velikosti matic v násobení, musí být $m = k$. (Výjimkou je případ, kdy \mathbf{A} je skalár nebo \mathbf{B} je skalár – pak by $\mathbf{A}^T \mathbf{B}$ byl sice nezvyklý ale korektní zápis.)
- Jelikož součin $\mathbf{A}^T \mathbf{B}$ je rozměru $n \times p$, musí být $n = p$, protože invertovat můžeme jen čtvercovou matici. Teď tedy víme, že obě matice musí mít stejný rozměr.
- Z nerovnosti (2.4) je jasné, že pokud by \mathbf{A}^T byla úzká nebo \mathbf{B} široká, $\mathbf{A}^T \mathbf{B}$ by byla singulární a tedy by neměla inverzi. Abychom se tomu vyhnuli, musí být obě matice buď čtvercové nebo úzké, $m \geq n$.

Závěr: Aby výraz $(\mathbf{A}^T \mathbf{B})^{-1}$ měl smysl, je nutné, aby matice \mathbf{A}, \mathbf{B} měly stejný rozměr a byly čtvercové nebo úzké. \square

2.9.2 Použití neexistujících maticových identit

Pro manipulaci s maticovými výrazy je užitečné mít v paměti zásobu maticových identit. Ovšem nesmí být chybné. Typické příklady:

- $(\mathbf{A}\mathbf{B})^T = \mathbf{A}^T \mathbf{B}^T$ (pokud v maticovém součinu $\mathbf{A}^T \mathbf{B}^T$ je vnitřní rozměr různý, je to chyba už kvůli rozměrům matic)
- $(\mathbf{A}\mathbf{B})^{-1} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}^{-1}$ (pro nečtvercové matice je to také syntaktická chyba, pro čtvercové ale singulární matice je to také chyba kvůli rozměrům matic)
- $(\mathbf{A} + \mathbf{B})^2 = \mathbf{A}^2 + 2\mathbf{A}\mathbf{B} + \mathbf{B}^2$. Tato identita se opírá o velice užitečnou (avšak neexistující) identitu $\mathbf{A}\mathbf{B} = \mathbf{B}\mathbf{A}$. Správně je $(\mathbf{A} + \mathbf{B})^2 = \mathbf{A}^2 + \mathbf{A}\mathbf{B} + \mathbf{B}\mathbf{A} + \mathbf{B}^2$.

2.9.3 Neekvivalentní úpravy (ne)rovníc

Zde pachatel udělá chybný úsudek při *neekvivalentní úpravě* rovnice či nerovnice. Ekvivalentní a neekvivalentní úpravy skalárních rovnic známe již ze základní školy. Např. úprava ‘přičti k rovnici jedničku’ je ekvivalentní, neboť $a = b \Leftrightarrow a + 1 = b + 1$. Úprava ‘umocni rovnici na druhou’ je neekvivalentní, neboť sice $a = b \Rightarrow a^2 = b^2$, ale neplatí $a^2 = b^2 \Rightarrow a = b$. Příklady:

- Student si myslí, že $\mathbf{a}^T \mathbf{x} = \mathbf{a}^T \mathbf{y} \Rightarrow \mathbf{x} = \mathbf{y}$ (není pravda, ani když vektor \mathbf{a} je nenulový).
- Student si myslí, že pokud $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{3 \times 5}$ a $\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{A}\mathbf{Y}$, pak $\mathbf{X} = \mathbf{Y}$ (není pravda, protože \mathbf{A} nemá lineárně nezávislé sloupce, tedy nemá levou inverzi).
- Student si myslí, že $\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{B}^T \mathbf{B} \Rightarrow \mathbf{A} = \mathbf{B}$ (není pravda dokonce ani pro skaláry).
- Student řeší soustavu rovnic $\{\mathbf{a}^T \mathbf{x} = 0, \mathbf{x}^T \mathbf{x} = 1\}$, kde $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$ je dáno a $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ je neznámá. Dělá to tak, že ‘vyjádří’ \mathbf{x} z první rovnice a dosadí ho do druhé rovnice. To je těžký zločin, protože rovnice $\mathbf{a}^T \mathbf{x} = 0$ má nekonečně mnoho řešení (alespoň pro $n > 1$) a tedy z ní neplyne, že \mathbf{x} je rovno jakémukoliv jednomu vektoru.

2.9.4 Další nápady pro práci s maticemi

- Pod výrazy s maticemi a vektory si malujte obdélníčky s rozměry matic, abyste měli jasnou představu o jejich rozměrech.
- Vidíte-li maticovou rovnici či soustavu rovnic, spočítejte si skalární rovnice a neznámé.
- Pracujte nejen s papírem, ale i s Matlabem. Úpravy maticových výrazů lze často ověřit na náhodných maticích. Např. chceme-li ověřit rovnost $(\mathbf{A}\mathbf{B})^T = \mathbf{B}^T \mathbf{A}^T$, zkusíme např. `A=randn(5,3); B=randn(3,6); (A*B)'` `-B'*A'`. Samozřejmě to není důkaz.

2.10 Cvičení

2.1. Vyřešte tyto rovnice a soustavy rovnic pro neznámou matici \mathbf{X} (předpokládejte, že každá potřebná inverze existuje):

- $\mathbf{A}\mathbf{X} + \mathbf{B} = \mathbf{A}^2 \mathbf{X}$
- $\mathbf{X} - \mathbf{A} = \mathbf{X}\mathbf{B}$
- $2\mathbf{X} - \mathbf{A}\mathbf{X} + 2\mathbf{A} = \mathbf{0}$

2.2. Řešíme soustavu rovnic $\mathbf{b}_i = \mathbf{X}\mathbf{a}_i$ (kde $i = 1, \dots, k$) pro neznámou matici $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Napište soustavu jako jedinou maticovou rovnici. Jaké musí být k , aby soustava měla stejný počet (skalárních) rovnic jako neznámých? Za jaké podmínky má soustava jediné řešení?

2.3. Vyřešte soustavu rovnic $\{\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}, \mathbf{x} = \mathbf{A}^T \mathbf{y}\}$, kde \mathbf{x}, \mathbf{y} jsou neznámé vektory. Předpokládejte, že matice $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$ je regulární. Najděte jen vztah pro \mathbf{x} , vztah pro \mathbf{y} nás nezajímá. Ověřte v Matlabu pro náhodné zadání, které získáte příkazy `A=randn(m,n); b=randn(m,1)`.

2.4. Mějme soustavu rovnic pro neznámé \mathbf{x} a \mathbf{y} :

$$\begin{aligned} \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{B}\mathbf{y} &= \mathbf{a} \\ \mathbf{C}\mathbf{x} + \mathbf{D}\mathbf{y} &= \mathbf{b} \end{aligned}$$

- Vyjádřete soustavu ve tvaru $\mathbf{P}\mathbf{u} = \mathbf{q}$.
- Je-li $\mathbf{a}, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{b}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$, ukažte, že $\mathbf{x} = (\mathbf{A} - \mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C})^{-1}(\mathbf{a} - \mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{b})$. Jakou to má výpočetní výhodu oproti počítání \mathbf{u} přímo ze soustavy $\mathbf{P}\mathbf{u} = \mathbf{q}$?

2.5. V následujících soustavách rovnic malá písmena značí vektory a velká matice. Jaké jsou nejobecnější rozměry matic a vektorů, aby rovnice byly syntakticky správně? Jaký je počet rovnic a neznámých v každé soustavě? Které z těchto soustav rovnic jsou lineární?

- a) $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, neznámá \mathbf{x} .
- b) $\mathbf{x}^T \mathbf{Ax} = 1$, neznámá \mathbf{x} .
- c) $\mathbf{a}^T \mathbf{Xb} = 0$, neznámá \mathbf{X} .
- d) $\mathbf{AX} + \mathbf{XA}^T = \mathbf{C}$, neznámá \mathbf{X}
- e) $\{\mathbf{X}^T \mathbf{Y} = \mathbf{A}, \mathbf{XY}^T = \mathbf{B}\}$, neznámé \mathbf{X}, \mathbf{Y}

2.6. Zobrazení $\text{vec} : \mathbb{R}^{m \times n} \rightarrow \mathbb{R}^{mn}$ ('vektorizace' matice, v Matlabu označeno $\mathbf{A}(:)$) je definováno tak, že vektor $\text{vec } \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{mn}$ je matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ přerovnaná po sloupcích do vektoru. *Kroneckerův součin matic* (v Matlabu $\text{kron}(\mathbf{A}, \mathbf{B})$) je definován jako

$$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = \begin{bmatrix} a_{11} \mathbf{B} & \cdots & a_{1n} \mathbf{B} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} \mathbf{B} & \cdots & a_{mn} \mathbf{B} \end{bmatrix}.$$

Pro libovolné matice (s kompatibilními velikostmi) platí

$$\text{vec}(\mathbf{ABC}) = (\mathbf{C}^T \otimes \mathbf{A}) \text{vec } \mathbf{B}. \quad (2.11)$$

Použijte tohoto vzorce pro transformaci následujících soustav rovnic s neznámou maticí \mathbf{X} do tvaru $\mathbf{Pu} = \mathbf{q}$ s neznámým vektorem \mathbf{u} . Předpokládejte, že počet rovnic je rovný počtu neznámých. Předpokládejte, že matice a vektory mají nejobecnější možné rozměry, aby to dávalo smysl.

- a) $\{\mathbf{b}_i^T \mathbf{Xa}_i = 0, i = 1, \dots, k\}$
- b) $\mathbf{AX} + \mathbf{XA}^T = \mathbf{C}$

2.7. Následující soustavy rovnic převed'te do tvaru $\mathbf{Pu} = \mathbf{q}$ s neznámým vektorem \mathbf{u} (najděte co nejjednodušší vzorce, které vypočítají matice \mathbf{P} , \mathbf{q} , \mathbf{u} z matic zadané soustavy):

- a) Soustava $\mathbf{Ax} = \alpha \mathbf{b}$, kde neznámé jsou (\mathbf{x}, α) .
- b) Soustava z Příkladu 2.2.
- c) Soustava z Příkladu 2.3.
- d) Soustava z Příkladu 2.4.

2.8. *Komutátorem* dvou matic rozumíme matici $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{AB} - \mathbf{BA}$. Dokažte:

- a) Komutátor symetrických matic je antisymetrická matice.
- b) $[\mathbf{A}, [\mathbf{B}, \mathbf{C}]] + [\mathbf{B}, [\mathbf{C}, \mathbf{A}]] + [\mathbf{C}, [\mathbf{A}, \mathbf{B}]] = \mathbf{0}$ (*Jacobiho identita*)
- c) $[\mathbf{A}, \mathbf{BC}] = [\mathbf{A}, \mathbf{B}]\mathbf{C} + \mathbf{B}[\mathbf{A}, \mathbf{C}]$

2.9. Dokažte *vzorec Shermana a Morrisonové* (kde \mathbf{A} je regulární a $\mathbf{v}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{u} + 1 \neq 0$)

$$(\mathbf{A} + \mathbf{uv}^T)^{-1} = \mathbf{A}^{-1} - \frac{\mathbf{A}^{-1} \mathbf{uv}^T \mathbf{A}^{-1}}{1 + \mathbf{v}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{u}}$$

a *vzorec Shermana, Morrisonové a Woodburyho* (kde $\mathbf{I} + \mathbf{V}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{U}$ je regulární)

$$(\mathbf{A} + \mathbf{UV}^T)^{-1} = \mathbf{A}^{-1} - \mathbf{A}^{-1} \mathbf{U} (\mathbf{I} + \mathbf{V}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{U})^{-1} \mathbf{V}^T \mathbf{A}^{-1}.$$

2.10. Dokažte pro regulární matice \mathbf{A}, \mathbf{B} , že $(\mathbf{AB})^{-1} = \mathbf{B}^{-1} \mathbf{A}^{-1}$.

2.11. Dokažte, že pro každou čtvercovou matici \mathbf{A} platí:

- a) $\mathbf{A} + \mathbf{A}^T$ je symetrická,
- b) $\mathbf{A} - \mathbf{A}^T$ je antisymetrická,
- c) existuje právě jedna symetrická \mathbf{B} a právě jedna antisymetrická \mathbf{C} tak, že $\mathbf{A} = \mathbf{B} + \mathbf{C}$,
- d) $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ je symetrická.

2.12. Dokažte, že pro každé $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ a $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times m}$ má matice

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} \mathbf{I} - \mathbf{BA} & \mathbf{B} \\ 2\mathbf{A} - \mathbf{ABA} & \mathbf{AB} - \mathbf{I} \end{bmatrix}$$

vlastnost $\mathbf{L}^2 = \mathbf{I}$ (kde \mathbf{L}^2 je zkratka pro \mathbf{LL}). Matice s touto vlastností se nazývá *involuce*.

2.13. Kdy je diagonální matice regulární? Co je inverzí diagonální matice?

2.14. Ukažte, že čtvercové diagonální matice komutují (tj. $\mathbf{AB} = \mathbf{BA}$).

2.15. Dokažte, že pokud je $\mathbf{I} - \mathbf{A}$ regulární, pak $\mathbf{A}(\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1} = (\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}$.

2.16. Dokažte, že pokud \mathbf{A} , \mathbf{B} a $\mathbf{A} + \mathbf{B}$ jsou regulární, pak

$$\mathbf{A}(\mathbf{A} + \mathbf{B})^{-1}\mathbf{B} = \mathbf{B}(\mathbf{A} + \mathbf{B})^{-1}\mathbf{A} = (\mathbf{A}^{-1} + \mathbf{B}^{-1})^{-1}.$$

2.17. Dokažte, že inverze regulární symetrické matice je symetrická matice.

2.18. (\star) Necht' čtvercové matice $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}, \mathbf{D}$ jsou takové, že \mathbf{AB}^T a \mathbf{CD}^T jsou symetrické a platí $\mathbf{AD}^T - \mathbf{BC}^T = \mathbf{I}$. Dokažte, že $\mathbf{A}^T \mathbf{D} - \mathbf{C}^T \mathbf{B} = \mathbf{I}$.

Nápověda a řešení

2.1.a) $\mathbf{X} = (\mathbf{A}^2 - \mathbf{A})^{-1}\mathbf{B} = (\mathbf{A} - \mathbf{I})^{-1}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}$

2.1.b) $\mathbf{X} = \mathbf{A}(\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1}$

2.1.c) $\mathbf{X} = 2(\mathbf{A} - 2\mathbf{I})^{-1}\mathbf{A} = (\mathbf{A}/2 - \mathbf{I})^{-1}\mathbf{A}$

2.2. Lze napsat jako $\mathbf{B} = \mathbf{XA}$, kde $\mathbf{a}_i \in \mathbb{R}^n$ jsou sloupce $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times k}$ a $\mathbf{b}_i \in \mathbb{R}^m$ jsou sloupce $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{m \times k}$. Neznámých je $m \times n$, rovnic je $m \times k$, tedy musí být $n = k$. Pro jediné řešení musí být vektory \mathbf{a}_i lineárně nezávislé.

2.3. $\mathbf{x} = \mathbf{A}^T(\mathbf{AA}^T)^{-1}\mathbf{b}$

2.4.a) $\mathbf{P} = \begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{bmatrix}$, $\mathbf{q} = \begin{bmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \end{bmatrix}$, $\mathbf{u} = \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{y} \end{bmatrix}$

2.5.a) Rovnic je m , neznámých n , kde $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Je lineární.

2.5.b) Rovnice je jedna, neznámých je n , kde $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$. Není lineární.

2.5.c) Rovnice je jedna, neznámých je mn , kde $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Je lineární.

2.5.d) Všechny tři matice $\mathbf{A}, \mathbf{C}, \mathbf{X}$ musí být čtvercové velikosti $n \times n$. Rovnic i neznámých je n^2 .

2.5.e) Rovnic je $m^2 + n^2$, neznámých je $2mn$, kde $\mathbf{X}, \mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Není lineární.

2.7.d) Soustava jde napsat v maticovém tvaru jako $\{\mathbf{X}\mathbf{1} = \mathbf{a}, \mathbf{X}^T \mathbf{1} = \mathbf{b}\}$ kde $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_m) \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{b} = (b_1, \dots, b_n) \in \mathbb{R}^n$ a $\mathbf{X} = [x_{ij}] \in \mathbb{R}^{m \times n}$. To ale není kýžený tvar, neboť proměnné jsou soustředěné do matice \mathbf{X} a nikoliv do vektoru. Kýžený tvar získáme volbou

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{x}_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{mn}, \quad \mathbf{P} = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_m & \cdots & \mathbf{I}_m \\ \mathbf{1}_m^T & & \\ & \ddots & \\ & & \mathbf{1}_m^T \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(m+n) \times (mn)}, \quad \mathbf{q} = \begin{bmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m+n},$$

kde $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$ jsou sloupce matice $\mathbf{X} = [x_{ij}]$, tj. $\mathbf{u} = (x_{11}, \dots, x_{m1}, x_{12}, \dots, x_{m2}, \dots, \dots, x_{mn})$.

- 2.17. Necht' \mathbf{A} je regulární a symetrická (tedy čtvercová). Necht' $\mathbf{BA} = \mathbf{I}$, tedy \mathbf{B} je levá inverze \mathbf{A} . Z toho $\mathbf{A}^T \mathbf{B}^T = \mathbf{AB}^T = \mathbf{I}$, tedy \mathbf{B}^T je pravá inverze \mathbf{A} . Ale pro regulární matici jsou si levá a pravá inverze rovny (viz §2.4), tedy $\mathbf{B}^T = \mathbf{B}$.

Kapitola 3

Linearita

3.1 Lineární podprostory

Množina \mathbb{R}^n spolu s operacemi sčítání vektorů a násobení vektorů skalárem tvoří *lineární prostor* nad tělesem \mathbb{R} . Zopakujte si z lineární algebry pojem lineárního prostoru!

Lineární kombinace vektorů $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$ je vektor

$$\mathbf{x} = \alpha_1 \mathbf{x}_1 + \dots + \alpha_k \mathbf{x}_k \quad (3.1)$$

pro nějaké skaláry $\alpha_1, \dots, \alpha_k \in \mathbb{R}$. Vektory jsou **lineárně nezávislé**, když platí implikace

$$\alpha_1 \mathbf{x}_1 + \dots + \alpha_k \mathbf{x}_k = \mathbf{0} \implies \alpha_1 = \dots = \alpha_k = 0. \quad (3.2)$$

V opačném případě jsou **lineárně závislé**.

Věta 3.1. Jsou-li vektory $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k$ lineárně nezávislé, koeficienty $\alpha_1, \dots, \alpha_k$ jsou vektorem (3.1) určeny jednoznačně (tj. soustava (3.1) s neznámými $\alpha_1, \dots, \alpha_k$ má právě jedno řešení).

Důkaz. Necht' kromě rovnice (3.1) platí také $\mathbf{x} = \beta_1 \mathbf{x}_1 + \dots + \beta_k \mathbf{x}_k$. Odečtením obou rovnic máme $\mathbf{0} = (\alpha_1 - \beta_1) \mathbf{x}_1 + \dots + (\alpha_k - \beta_k) \mathbf{x}_k$. Ale z (3.2) plyne $\alpha_i - \beta_i = 0$, tedy $\alpha_i = \beta_i$. \square

Lineární obal vektorů $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k$ je množina

$$\text{span}\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k\} = \{ \alpha_1 \mathbf{x}_1 + \dots + \alpha_k \mathbf{x}_k \mid \alpha_1, \dots, \alpha_k \in \mathbb{R} \}$$

všech jejich lineárních kombinací (zde předpokládáme, že vektorů je konečný počet).

Neprázdná množina $X \subseteq \mathbb{R}^n$ se nazývá **lineární podprostor** (nebo jen **podprostor**) lineárního prostoru \mathbb{R}^n , jestliže každá lineární kombinace každé (konečné) množiny vektorů z X leží v X (neboli že množina X je uzavřená vůči lineárním kombinacím):

$$\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k \in X, \alpha_1, \dots, \alpha_k \in \mathbb{R} \implies \alpha_1 \mathbf{x}_1 + \dots + \alpha_k \mathbf{x}_k \in X. \quad (3.3)$$

Snadno se ukáže, že lineární obal libovolné množiny vektorů je lineární podprostor.

Báze lineárního podprostoru¹ $X \subseteq \mathbb{R}^n$ je lineárně nezávislá množina vektorů, jejíž lineární obal je X . Platí následující netriviální tvrzení (důkazy najdete v učebnicích lineární algebry):

¹Výrok 'množina $X \subseteq \mathbb{R}^n$ je lineární podprostor' je totéž jako 'množina X je lineární podprostor prostoru \mathbb{R}^n '.

Věta 3.2.

- Z každé množiny vektorů lze vybrat bázi jejich lineárního obalu.
- Každou lineárně nezávislou množinu vektorů z lineárního podprostoru lze doplnit na jeho bázi.
- Každý lineární podprostor má (alespoň jednu) bázi.
- Každá báze každého lineárního podprostoru má stejný počet vektorů.

Počet vektorů báze lineárního podprostoru X se nazývá jeho **dimenze**, značíme ji $\dim X$. Je-li $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k\}$ báze podprostoru X a $\alpha_1 \mathbf{x}_1 + \dots + \alpha_k \mathbf{x}_k = \mathbf{x} \in X$, potom (jednoznačně určené) skaláry $\alpha_1, \dots, \alpha_k$ se nazývají **souřadnice** vektoru \mathbf{x} v dané bázi.

Věta 3.3. Pro každé podprostory $X, Y \subseteq \mathbb{R}^n$ platí:

- $X \subseteq Y$ implikuje $\dim X \leq \dim Y$.
- $X \subseteq Y$ a $\dim X = \dim Y$ implikuje $X = Y$.

Důkaz. Jestliže $X \subseteq Y$, každá báze podprostoru X patří do Y . Dle Věty 3.2 lze tuto bázi doplnit na bázi podprostoru Y , odtud první tvrzení. Jestliže navíc $\dim X = \dim Y$, každá báze X je už bázi Y (tedy doplnění nepřidá žádný vektor), odtud druhé tvrzení. \square

Příklad 3.1. Triviálně, prostor \mathbb{R}^3 je svým vlastním podprostorem. Jeho dimenze je 3. Jeho báze je např. $\{(1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1)\}$ (standardní) nebo $\{(1, 1, 1), (1, -1, 0), (2, 0, 0)\}$. \square

Příklad 3.2. Množina $X = \text{span}\{(1, 2, 3)\} = \{\alpha(1, 2, 3) \mid \alpha \in \mathbb{R}\} \subseteq \mathbb{R}^3$ je podprostor \mathbb{R}^3 dimenze 1. Je to přímka procházející počátkem. Její báze je např. množina $\{(1, 2, 3)\}$, jiná báze je množina $\{(2, 4, 6)\}$. \square

Příklad 3.3. Množina $X = \text{span}\{(1, 2, 3, 0), (0, 1, 2, -1), (0, 2, 4, -2)\} \subseteq \mathbb{R}^4$ je podprostor \mathbb{R}^4 dimenze 2. Všimněte si, že vektory jsou lineárně závislé. Báze podprostoru X je např. množina $\{(1, 2, 3, 0), (0, 1, 2, -1)\}$. \square

Příklad 3.4. Všechny možné podprostory prostoru \mathbb{R}^3 jsou tyto: počátek $\mathbf{0}$ (dimenze 0), všechny přímky procházející počátkem (dimenze 1), všechny roviny procházející počátkem (dimenze 2), a konečně celý prostor \mathbb{R}^3 (dimenze 3). \square

Příklad 3.5. Množina $X = \{(1 + \alpha, \alpha) \mid \alpha \in \mathbb{R}\} \subseteq \mathbb{R}^2$ (přímka neprocházející počátkem) není podprostor \mathbb{R}^2 , protože např. $(1, 0) \in X$ ale $2(1, 0) = (2, 0) \notin X$. \square

3.2 Lineární zobrazení

Zobrazení $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ je **lineární**, jestliže pro každé $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$ a $\alpha_1, \dots, \alpha_k \in \mathbb{R}$ platí

$$\mathbf{f}(\alpha_1 \mathbf{x}_1 + \dots + \alpha_k \mathbf{x}_k) = \alpha_1 \mathbf{f}(\mathbf{x}_1) + \dots + \alpha_k \mathbf{f}(\mathbf{x}_k). \quad (3.4)$$

Věta 3.4. Zobrazení $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ je lineární, právě když existuje matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ taková, že

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{x} \quad (3.5)$$

pro všechna $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$. Matice \mathbf{A} je navíc zobrazením \mathbf{f} určena jednoznačně.

Říkáme proto, že matice \mathbf{A} reprezentuje lineární zobrazení \mathbf{f} .

Důkaz. Důkaz jedné implikace je snadný: zobrazení (3.5) je lineární, neboť

$$\mathbf{f}(\alpha_1 \mathbf{x}_1 + \cdots + \alpha_k \mathbf{x}_k) = \mathbf{A}(\alpha_1 \mathbf{x}_1 + \cdots + \alpha_k \mathbf{x}_k) = \alpha_1 \mathbf{A} \mathbf{x}_1 + \cdots + \alpha_k \mathbf{A} \mathbf{x}_k = \alpha_1 \mathbf{f}(\mathbf{x}_1) + \cdots + \alpha_k \mathbf{f}(\mathbf{x}_k).$$

Dokažme opačnou implikaci. Necht' $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ je lineární zobrazení. Necht' $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n \in \mathbb{R}^n$ je standardní báze prostoru \mathbb{R}^n . Pro každé $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ máme $\mathbf{x} = x_1 \mathbf{e}_1 + \cdots + x_n \mathbf{e}_n$. Z (3.4) plyne

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(x_1 \mathbf{e}_1 + \cdots + x_n \mathbf{e}_n) = x_1 \mathbf{f}(\mathbf{e}_1) + \cdots + x_n \mathbf{f}(\mathbf{e}_n) = [\mathbf{f}(\mathbf{e}_1) \ \cdots \ \mathbf{f}(\mathbf{e}_n)] \mathbf{x}.$$

Nyní označíme $[\mathbf{f}(\mathbf{e}_1) \ \cdots \ \mathbf{f}(\mathbf{e}_n)] = \mathbf{A}$. Tedy \mathbf{A} je matice se sloupci $\mathbf{f}(\mathbf{e}_1), \dots, \mathbf{f}(\mathbf{e}_n)$.

Dokažme jednoznačnost matice \mathbf{A} . Platí-li $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{B} \mathbf{x}$ pro každé $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, pak samozřejmě platí $\mathbf{A} = \mathbf{B}$, protože stačí dosadit za \mathbf{x} postupně vektory $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n$. \square

Příklad 3.6. Zobrazení $\mathbf{f}: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$ definované jako $\mathbf{f}(x_1, x_2) = (x_1 + x_2, x_1 - x_2, 2x_1)$ je lineární. To bychom dokázali ověřením podmínky (3.4). Ovšem je to patrné na první pohled, protože jej lze vyjádřit ve tvaru (3.5):

$$\mathbf{f}(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \\ 2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 + x_2 \\ x_1 - x_2 \\ 2x_1 \end{bmatrix} = (x_1 + x_2, x_1 - x_2, 2x_1). \quad \square$$

Pokud $m = 1$, lineární zobrazení je funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ tvaru

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{a}^T \mathbf{x} = a_1 x_1 + \cdots + a_n x_n, \quad (3.6)$$

kde $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$. Této funkci se též říká *lineární forma*.

Podívejme se blíže na vzorec (3.5). Výraz $\mathbf{A} \mathbf{x}$ je maticový součin matice $m \times n$ maticí $n \times 1$ (viz §2.6). Označíme-li $\mathbf{y} = \mathbf{A} \mathbf{x}$, je tedy podle (2.1)

$$y_i = \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j, \quad i = 1, \dots, m. \quad (3.7)$$

Dále, vyjádříme-li matici \mathbf{A} pomocí sloupců, máme

$$\mathbf{A} \mathbf{x} = [\mathbf{a}_1 \ \cdots \ \mathbf{a}_n] \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = x_1 \mathbf{a}_1 + \cdots + x_n \mathbf{a}_n, \quad (3.8)$$

tedy vektor $\mathbf{A} \mathbf{x}$ je *lineární kombinace sloupců* matice \mathbf{A} . Naopak, vyjádříme-li matici \mathbf{A} pomocí řádků, máme

$$\mathbf{A} \mathbf{x} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1^T \\ \vdots \\ \mathbf{a}_m^T \end{bmatrix} \mathbf{x} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1^T \mathbf{x} \\ \vdots \\ \mathbf{a}_m^T \mathbf{x} \end{bmatrix}, \quad (3.9)$$

tedy složky vektoru $\mathbf{A} \mathbf{x}$ jsou *skalární součiny řádků* matice \mathbf{A} a vektoru \mathbf{x} . Všimněte si, že (3.8) a (3.9) jsou speciální případy (2.8) a (2.9).

Složení lineárních zobrazení je opět lineární zobrazení. Pro $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{A} \mathbf{x}$ a $\mathbf{g}(\mathbf{y}) = \mathbf{B} \mathbf{y}$ máme

$$(\mathbf{g} \circ \mathbf{f})(\mathbf{x}) = \mathbf{g}(\mathbf{f}(\mathbf{x})) = \mathbf{B}(\mathbf{A} \mathbf{x}) = (\mathbf{B} \mathbf{A}) \mathbf{x} = \mathbf{B} \mathbf{A} \mathbf{x},$$

tedy $\mathbf{B} \mathbf{A}$ je matice složeného zobrazení $\mathbf{g} \circ \mathbf{f}$. Tedy matice složeného zobrazení je součinem matic jednotlivých zobrazení. To je hlavní důvod, proč je rozumné definovat maticové násobení jako (2.1): *násobení matic odpovídá skládání lineárních zobrazení* reprezentovaných těmito maticemi.

3.2.1 Prostor obrazů

S lineárním zobrazením jsou spjaty dva lineární podprostory, prostor obrazů a nulový prostor (jádro). Je-li zobrazení reprezentováno maticí jako $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{Ax}$, hovoříme o prostoru obrazů a nulovém prostoru matice \mathbf{A} .

Prostor obrazů matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ je množina

$$\text{rng } \mathbf{A} = \{ \mathbf{Ax} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \} \subseteq \mathbb{R}^m. \quad (3.10)$$

Interpretace prostoru obrazů:

- Je to množina $\mathbf{f}(\mathbb{R}^n)$ všech hodnot, jichž může zobrazení $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{Ax}$ nabýt.
- Je to množina všech vektorů \mathbf{y} , pro které má lineární soustava $\mathbf{Ax} = \mathbf{y}$ řešení.
- Dle (3.8) je to lineární obal sloupců matice \mathbf{A} . Tedy je to lineární podprostor \mathbb{R}^m .

Dimenze lineárního obalu sloupců se nazývá hodnota matice (už jsme ji potkali v §2.3),

$$\text{rank } \mathbf{A} = \dim \text{rng } \mathbf{A}. \quad (3.11)$$

Věta 3.5. Pro matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ jsou následující tvrzení ekvivalentní:

1. $\text{rng } \mathbf{A} = \mathbb{R}^m$
2. Soustava $\mathbf{Ax} = \mathbf{y}$ má řešení pro každé \mathbf{y} .
3. $\text{rank } \mathbf{A} = m$
4. Zobrazení $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{Ax}$ je surjektivní, tj. $\mathbf{f}(\mathbb{R}^n) = \mathbb{R}^m$ (viz §1.1.2).
5. Řádky matice \mathbf{A} jsou lineárně nezávislé.
6. Matice \mathbf{A} má pravou inverzi, tj. existuje \mathbf{B} tak, že $\mathbf{AB} = \mathbf{I}$.
7. Matice $\mathbf{AA}^T \in \mathbb{R}^{m \times m}$ je regulární.

Důkaz.

- $1 \Leftrightarrow 2 \Leftrightarrow 3 \Leftrightarrow 4$ plyne přímo z definic.
- $3 \Leftrightarrow 5$ plyne z definice hodnosti a z (2.2).
- $2 \Rightarrow 6$ platí, neboť soustava $\mathbf{Ab}_i = \mathbf{e}_i$ má řešení \mathbf{b}_i pro každé i (kde \mathbf{e}_i resp. \mathbf{b}_i je i -tý sloupec matice \mathbf{I} resp. \mathbf{B}). Pro důkaz $6 \Rightarrow 2$ položíme $\mathbf{x} = \mathbf{By}$.
- Tvrzení $1 \Leftrightarrow 7$ plyne z rovnosti (5.4a), uvedené později. □

Věta 3.6. Pro libovolné matice \mathbf{A}, \mathbf{B} platí

- $\text{rng}(\mathbf{AB}) \subseteq \text{rng } \mathbf{A}$.
- $\text{rng}(\mathbf{AB}) = \text{rng } \mathbf{A}$, jestliže řádky matice \mathbf{B} jsou lineárně nezávislé.

Důkaz. První tvrzení říká, že jestliže soustava $\mathbf{z} = \mathbf{ABx}$ má řešení, pak i soustava $\mathbf{z} = \mathbf{Ay}$ má řešení. To je ale jasné, protože můžeme položit $\mathbf{y} = \mathbf{Bx}$. Druhé tvrzení navíc říká, že jestliže \mathbf{B} má lineárně nezávislé řádky a $\mathbf{z} = \mathbf{Ay}$ má řešení, pak i $\mathbf{z} = \mathbf{ABx}$ má řešení. To platí, neboť dle implikace $5 \Rightarrow 2$ ve Větě 3.5 má soustava $\mathbf{Bx} = \mathbf{y}$ řešení pro každé \mathbf{y} . □

3.2.2 Nulový prostor

Nulový prostor matice \mathbf{A} (také se nazývá *jádro* zobrazení $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{Ax}$) je množina

$$\text{null } \mathbf{A} = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{Ax} = \mathbf{0} \} \subseteq \mathbb{R}^n. \quad (3.12)$$

Interpretace nulového prostoru:

- Je to množina všech vektorů, které se zobrazí na nulový vektor.
- Podle (3.9) je to množina všech vektorů, které jsou kolmé na každý řádek matice \mathbf{A} . Z toho je vidět, že je to lineární podprostor \mathbb{R}^n .

Platí navíc, že každý lineární podprostor prostoru \mathbb{R}^n je nulovým prostorem nějaké matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ (toto tvrzení není samozřejmé, lze ho dokázat např. z pozdější Věty 4.1). Tedy lineární podprostor X lze reprezentovat (např. v počítači) dvěma způsoby:

- jako lineární obal konečného počtu vektorů (tedy maticí \mathbf{A} takovou, že $X = \text{rng } \mathbf{A}$),
- jako množinu řešení homogenní lineární soustavy (tedy maticí \mathbf{A} takovou, že $X = \text{null } \mathbf{A}$).

Věta 3.7. Pro matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ jsou následující tvrzení ekvivalentní:

1. $\text{null } \mathbf{A} = \{ \mathbf{0} \}$ (tj. nulový prostor je triviální).
2. Soustava $\mathbf{Ax} = \mathbf{0}$ má jediné řešení $\mathbf{x} = \mathbf{0}$.
3. $\text{rank } \mathbf{A} = n$.
4. Zobrazení $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{Ax}$ je injektivní (viz §1.1.2).
5. Sloupce matice \mathbf{A} jsou lineárně nezávislé.
6. Matice \mathbf{A} má levou inverzi, tj. existuje \mathbf{B} tak, že $\mathbf{BA} = \mathbf{I}$.
7. Matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je regulární.

Důkaz.

- Ekvivalence $1 \Leftrightarrow 2$ plyne z definice nulového prostoru (3.12).
- Ekvivalence $2 \Leftrightarrow 5$ plyne z definice lineární nezávislosti (3.2), tj. $\mathbf{Ax} = \mathbf{0} \Rightarrow \mathbf{x} = \mathbf{0}$.
- Ekvivalence $3 \Leftrightarrow 5$ plyne z definice hodnosti (3.11).
- Tvrzení 4 říká, že pro každé \mathbf{x}, \mathbf{y} je $\mathbf{Ax} = \mathbf{Ay} \Rightarrow \mathbf{x} = \mathbf{y}$, tj. $\mathbf{A}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \mathbf{0} \Rightarrow \mathbf{x} - \mathbf{y} = \mathbf{0}$. Ale to je definice (3.2) lineární nezávislosti sloupců \mathbf{A} . Tedy platí $2 \Leftrightarrow 4$.
- Tvrzení 6 je ekvivalentní tomu, že matice \mathbf{A}^T má pravou inverzi, tj. $\mathbf{A}^T \mathbf{B}^T = \mathbf{I}$. Tedy $3 \Leftrightarrow 6$ plyne ekvivalence $3 \Leftrightarrow 6$ ve Větě 3.5.
- Tvrzení $1 \Leftrightarrow 7$ je plyne z rovnosti (5.4b), uvedené později. \square

Věta 3.8. Pro libovolné matice \mathbf{A}, \mathbf{B} platí:

- $\text{null}(\mathbf{AB}) \supseteq \text{null } \mathbf{B}$.
- $\text{null}(\mathbf{AB}) = \text{null } \mathbf{B}$, jestliže sloupce matice \mathbf{A} jsou lineárně nezávislé.

Důkaz. První tvrzení říká, že $\mathbf{Bx} = \mathbf{0} \Rightarrow \mathbf{ABx} = \mathbf{0}$, což platí vynásobením maticí \mathbf{A} zleva. Druhé tvrzení říká, že když \mathbf{A} má lineárně nezávislé sloupce, pak $\mathbf{ABx} = \mathbf{0} \Rightarrow \mathbf{Bx} = \mathbf{0}$. To platí, neboť dle implikace $5 \Rightarrow 2$ ve Větě 3.7 máme $\mathbf{Ay} = \mathbf{0} \Rightarrow \mathbf{y} = \mathbf{0}$. \square

3.2.3 Dvě věty o dimenzích

Zde dokážeme dvě obtížnější věty o dimenzích prostoru obrazů a nulového prostoru.

Jako první uvedeme slíbený důkaz rovnosti (2.2). K tomu nejdřív uvedeme pomocnou větu, která je zajímavá sama o sobě.

Věta 3.9. Pro každou matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ hodnosti r existují $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{m \times r}$ a $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{r \times n}$ tak, že

$$\mathbf{A} = \mathbf{BC}. \quad (3.13)$$

Důkaz. Zvolme libovolnou bázi prostoru $\text{rng } \mathbf{A}$. Necht' vektory této báze tvoří sloupce matice $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{m \times r}$, kde $r = \dim \text{rng } \mathbf{A}$. Nyní j -tý sloupec \mathbf{a}_j matice \mathbf{A} je lineární kombinací sloupců matice \mathbf{B} , neboli existuje vektor \mathbf{c}_j tak že $\mathbf{a}_j = \mathbf{Bc}_j$. Platí tedy (3.13), kde matice $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{r \times n}$ má sloupce $\mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_n$. \square

Rozkladu (3.13) se někdy říká **rozklad matice podle hodnosti** (angl. *rank factorization*). Lze na něj pohlížet jako na 'kompresi' matice \mathbf{A} , což při $r \ll \min\{m, n\}$ může být značná úspora. Např.:

- Uložení matice \mathbf{A} do paměti zabere mn čísel, uložení matic \mathbf{B} a \mathbf{C} jen $(m+n)r$ čísel.
- Přímý výpočet maticového součinu \mathbf{Ax} vyžaduje mn operací. Spočítáme-li ale nejdřív vektor $\mathbf{z} = \mathbf{Cx}$ a pak vektor $\mathbf{y} = \mathbf{Bz}$, potřebujeme jen $(m+n)r$ operací.
- Představme si zobrazení $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{Ax}$ jako přenosový kanál, jehož vstupem jsou proměnné x_1, \dots, x_n a výstupem y_1, \dots, y_m . Přenos můžeme realizovat jen po r 'drátech' z_1, \dots, z_r .

A nyní můžeme dokázat rovnost (2.2), tj. že dimenze lineárního obalu sloupců je rovna dimenzi lineárního obalu řádků:

Věta 3.10. Pro každou matici \mathbf{A} platí

$$\text{rank } \mathbf{A} = \dim \text{rng } \mathbf{A} = \dim \text{rng}(\mathbf{A}^T) = \text{rank}(\mathbf{A}^T). \quad (3.14)$$

Důkaz. Pišme (3.13) jako $\mathbf{A}^T = \mathbf{C}^T \mathbf{B}^T$. Dle Věty 3.6 je $\text{rng}(\mathbf{A}^T) \subseteq \text{rng}(\mathbf{C}^T)$. Dle Věty 3.3 tedy $\dim \text{rng}(\mathbf{A}^T) \leq \dim \text{rng}(\mathbf{C}^T)$. Protože \mathbf{C}^T má r sloupců, je $\dim \text{rng}(\mathbf{C}^T) \leq r = \dim \text{rng } \mathbf{A}$. Tedy

$$\dim \text{rng}(\mathbf{A}^T) \leq \dim \text{rng } \mathbf{A}. \quad (3.15)$$

Ukázali jsme, že pro každou matici \mathbf{A} platí nerovnost (3.15). Nyní tuto nerovnost použijeme na matici \mathbf{A}^T , což dá $\dim \text{rng } \mathbf{A} \leq \dim \text{rng}(\mathbf{A}^T)$. Obě nerovnosti dohromady dají (3.14). \square

Jako druhou uvedeme větu o vztahu dimenze prostoru obrazů, nulového prostoru, a 'vstupního' prostoru \mathbb{R}^n lineárního zobrazení. Někdy se jí říká *rank-plus-nullity theorem*, kde *nullity* označuje dimenzi nulového prostoru matice:

Věta 3.11. Pro každou matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ platí

$$\dim \text{rng } \mathbf{A} + \dim \text{null } \mathbf{A} = n. \quad (3.16)$$

Důkaz. (★) Necht' bázi prostoru $\text{rng } \mathbf{A}$ tvoří sloupce matice $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{m \times r}$. Tedy existuje matice $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{n \times r}$ tak, že $\mathbf{B} = \mathbf{AC}$. Necht' bázi prostoru $\text{null } \mathbf{A}$ tvoří sloupce matice $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{n \times q}$.

Protože sloupce \mathbf{B} tvoří bázi $\text{rng } \mathbf{A}$, pro každý vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ existuje právě jeden vektor $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^r$ tak, že $\mathbf{Ax} = \mathbf{By}$, to jest $\mathbf{Ax} = \mathbf{ACy}$, to jest $\mathbf{A}(\mathbf{x} - \mathbf{Cy}) = \mathbf{0}$. To ale znamená $\mathbf{x} - \mathbf{Cy} \in \text{null } \mathbf{A}$, proto existuje právě jeden vektor $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^q$ tak, že $\mathbf{x} - \mathbf{Cy} = \mathbf{Dz}$.

A jsme hotovi. Ukázali jsme totiž, že pro každý $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ existuje právě jeden $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^r$ a právě jeden $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^q$ tak, že $\mathbf{x} = \mathbf{Cy} + \mathbf{Dz}$. To ale znamená, že sloupce matice $[\mathbf{C} \ \mathbf{D}] \in \mathbb{R}^{n \times (r+q)}$ tvoří bázi prostoru \mathbb{R}^n . Tedy musí být $r + q = n$, což je rovnost (3.16). \square

Interpretace věty 3.11:

- Každá dimenze na vstupu zobrazení $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{x}$ se buď ‘smáčkne’ do nulového vektoru nebo se objeví na výstupu.
- Počet lineárně nezávislých řešení lineární homogenní soustavy $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{0}$ je $n - \text{rank } \mathbf{A}$.
- Protože $\text{rank } \mathbf{A} = \text{rank}(\mathbf{A}^T)$, rovnost (3.16) lze psát také jako

$$\dim \text{rng}(\mathbf{A}^T) + \dim \text{null } \mathbf{A} = n. \quad (3.17)$$

Protože $\text{rng}(\mathbf{A}^T)$ je lineární obal řádků matice \mathbf{A} a $\text{null } \mathbf{A}$ je množina všech vektorů kolmých na řádky \mathbf{A} , rovnost (3.17) říká, že součet dimenzí těchto dvou podprostorů prostoru \mathbb{R}^n je n . O tom si více řekneme v části o ortogonálním doplňku (§4.2).

3.3 Afinní podprostor a zobrazení

Afinní kombinace vektorů $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$ je lineární kombinace $\alpha_1\mathbf{x}_1 + \dots + \alpha_k\mathbf{x}_k$, ve které koeficienty kombinace splňují

$$\alpha_1 + \dots + \alpha_k = 1.$$

Afinní obal vektorů $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k$ je množina všech jejich afinních kombinací. Množina $A \subseteq \mathbb{R}^n$ je **afinní podprostor**² lineárního prostoru \mathbb{R}^n , jestliže každá afinní kombinace každé (konečné) množiny vektorů z A leží v A (neboli množina A je uzavřená vůči afinním kombinacím):

$$\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k \in A, \quad \alpha_1 + \dots + \alpha_k = 1 \quad \implies \quad \alpha_1\mathbf{x}_1 + \dots + \alpha_k\mathbf{x}_k \in A. \quad (3.18)$$

Afinní kombinace *nezávisí na počátku*. To znamená, že afinní kombinace vektorů posunutých o libovolný vektor \mathbf{x}_0 je rovna afinní kombinaci neposunutých vektorů posunutých o \mathbf{x}_0 . To snadno dokážeme:

$$\alpha_1(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0) + \dots + \alpha_k(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_0) = \alpha_1\mathbf{x}_1 + \dots + \alpha_k\mathbf{x}_k - (\alpha_1 + \dots + \alpha_k)\mathbf{x}_0 = (\alpha_1\mathbf{x}_1 + \dots + \alpha_k\mathbf{x}_k) - \mathbf{x}_0.$$

Na rozdíl od toho, obecná lineární kombinace na počátku závisí.

K tomu (mírně neformální) poznámka: Jestliže s prvky vektorového (pod)prostoru provádíme operace afinní kombinace, tyto prvky si stačí představovat/kreslit jako body. Poloha počátku není důležitá, protože afinní kombinace na něm nezávisí. Afinní kombinaci bodů na papíře lze sestavit pomocí pravítka a měřítka bez znalosti polohy počátku. Naproti tomu, jestliže s prvky vektorového (pod)prostoru provádíme operace lineární kombinace, tyto prvky si představujeme jako šipky spojující počátek s koncovým bodem (přesněji jako *volné vektory*), protože lineární kombinaci vektorů můžeme sestavit pouze se znalostí polohy počátku. To je důvod, proč se prvkům afinního (pod)prostoru říká *body* zatímto prvkům pouhého vektorového (= lineárního) (pod)prostoru *vektory*.

Příklad 3.7. Afinní obal dvou bodů $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \mathbb{R}^3$ je množina

$$\text{aff}\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\} = \{ \alpha_1\mathbf{x}_1 + \alpha_2\mathbf{x}_2 \mid \alpha_1 + \alpha_2 = 1 \}.$$

Pokud $\mathbf{x}_1 \neq \mathbf{x}_2$, je touto množinou přímka procházející body $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$. Tato přímka je afinní podprostor \mathbb{R}^3 . Na obrázku dole vlevo je několik bodů na přímce a příslušné koeficienty (α_1, α_2) .

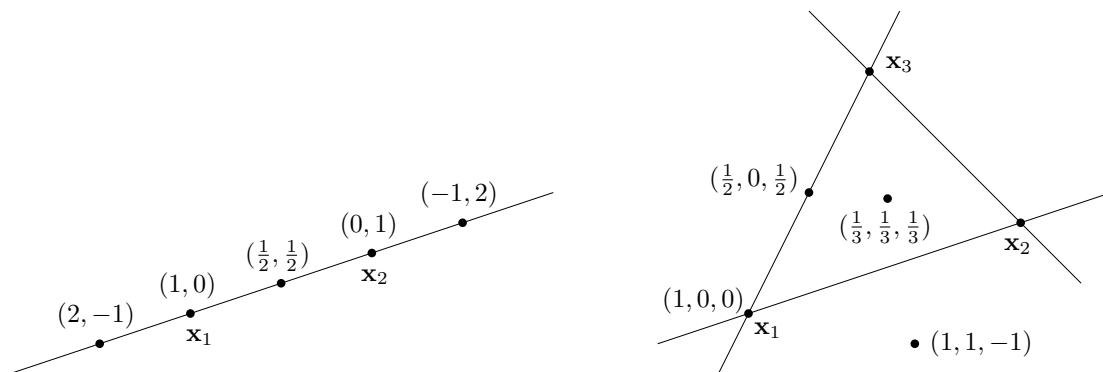
²Všimněte si, že definujeme afinní *podprostor* lineárního prostoru, ale už ne afinní *prostor* sám o sobě. Definice afinního prostoru bez odkazu k nějakému lineárnímu prostoru (tj. pomocí axiomů) existuje, ale neuvádíme ji.

Naproti tomu, lineární obal dvou vektorů $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ (pokud jsou lineárně nezávislé) je rovina procházející těmito dvěma body a počátkem $\mathbf{0}$.

Afinní obal tří bodů $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3 \in \mathbb{R}^3$ je množina

$$\text{aff}\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3\} = \{ \alpha_1 \mathbf{x}_1 + \alpha_2 \mathbf{x}_2 + \alpha_3 \mathbf{x}_3 \mid \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 1 \}.$$

Pokud body $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3$ neleží v přímce, je touto množinou rovina jimi procházející. Tato rovina je afinní podprostor \mathbb{R}^3 . Na obrázku vpravo je několik bodů v této rovině a příslušné koeficienty $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$.



(Protože afinní kombinace nezávisí na poloze počátku, do obrázků jsme počátek ani nekreslili a prvky prostoru \mathbb{R}^3 jsme kreslili jako body, viz poznámka výše.) \square

Pro množinu $X \subseteq \mathbb{R}^n$ a vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ označme

$$X + \mathbf{x} = \{ \mathbf{x} + \mathbf{y} \mid \mathbf{y} \in X \}. \quad (3.19)$$

Věta 3.12.

- Je-li X lineární podprostor \mathbb{R}^n a $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, pak množina $X + \mathbf{x}$ je afinní podprostor \mathbb{R}^n .
- Je-li A afinní podprostor \mathbb{R}^n a $\mathbf{x} \in A$, pak množina $A - \mathbf{x}$ je lineární podprostor \mathbb{R}^n .
- Je-li A afinní podprostor a $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in A$, pak $A - \mathbf{x} = A - \mathbf{y}$.

Důkaz. První tvrzení: Chceme dokázat, že afinní kombinace bodů z množiny $X + \mathbf{x}$ leží v této množině. Necht' tedy $\alpha_1 + \dots + \alpha_k = 1$ a chceme dokázat implikaci

$$\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k \in X + \mathbf{x} \implies \alpha_1 \mathbf{x}_1 + \dots + \alpha_k \mathbf{x}_k \in X + \mathbf{x},$$

neboli³

$$\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}, \dots, \mathbf{x}_k - \mathbf{x} \in X \implies \alpha_1 \mathbf{x}_1 + \dots + \alpha_k \mathbf{x}_k - \mathbf{x} = \alpha_1 (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}) + \dots + \alpha_k (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}) \in X.$$

Tato implikace platí díky linearitě X .

Druhé tvrzení: Chceme dokázat, že lineární kombinace vektorů z množiny $A - \mathbf{x}$ leží v této množině. Necht' tedy $\alpha_1, \dots, \alpha_k \in \mathbb{R}$ a chceme dokázat implikaci

$$\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k \in A \implies \alpha_1 (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}) + \dots + \alpha_k (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}) \in A - \mathbf{x}.$$

³Zde jsme použili skutečnost, že k výroku typu $\mathbf{x} \in X$ můžeme přičíst libovolný vektor a výrok se tím nezmění. Přesněji, pro každé $X \subseteq \mathbb{R}^n$ a $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ platí $\mathbf{x} \in X \Leftrightarrow \mathbf{x} + \mathbf{y} \in X + \mathbf{y}$. To snadno plyne z (3.19).

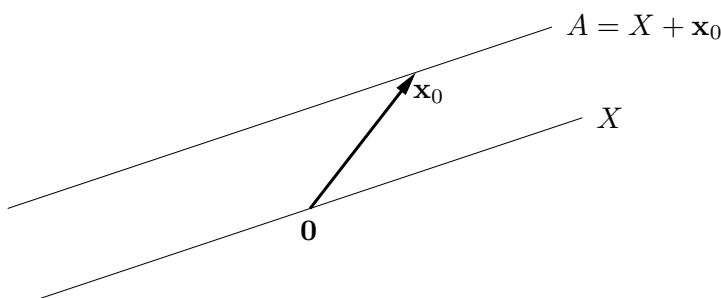
Pravá strana této implikace jde psát jako

$$\alpha_1(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}) + \cdots + \alpha_k(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}) + \mathbf{x} = \alpha_1\mathbf{x}_1 + \cdots + \alpha_k\mathbf{x}_k + (1 - \alpha_1 - \cdots - \alpha_k)\mathbf{x} \in A.$$

To je ale pravda, neboť $\alpha_1 + \cdots + \alpha_k + (1 - \alpha_1 - \cdots - \alpha_k) = 1$ a tedy poslední výraz je afinní kombinace vektorů z A , která podle předpokladu leží v A .

Třetí tvrzení: Označme $X = A - \mathbf{x}$. Jelikož $\mathbf{y} \in A$, je také $\mathbf{y} - \mathbf{x} \in A - \mathbf{x} = X$. Nyní pišme $A - \mathbf{y} = A - \mathbf{x} + \mathbf{x} - \mathbf{y} = X - (\mathbf{y} - \mathbf{x}) = X$, kde poslední rovnost plyne z linearity X (kterou jsme dokázali v druhém tvrzení). \square

Věta 3.12 říká, že afinní podprostor není nic jiného, než ‘posunutý’ lineární podprostor (tedy nemusí procházet počátkem, na rozdíl od lineárního podprostoru). Třetí tvrzení věty navíc ukazuje, že tento lineární podprostor je afinním prostorem určen jednoznačně:



Dimenze afinního podprostoru je dimenze tohoto lineárního podprostoru. Afinnímu podprostoru \mathbb{R}^n dimenze 0, 1, 2 a $n - 1$ se říká po řadě **bod**, **přímka**, **rovina**, a **nadrovina**.

Věta 3.13. Množina $A \subseteq \mathbb{R}^n$ je afinní podprostor právě tehdy, když je množinou řešení nějaké lineární soustavy⁴, tj. existují \mathbf{A} a \mathbf{b} splňující $A = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \}$.

Důkaz. Předpokládejme, že množina A je neprázdná (pro $A = \emptyset$ věta zjevně platí, protože prázdná množina je afinní podprostor a je to také řešení nějaké lineární soustavy).

Důkaz \Leftarrow : Necht' $A = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \}$. Necht' $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k \in A$ a $\alpha_1 + \cdots + \alpha_k = 1$. Dokažme, že $\alpha_1\mathbf{x}_1 + \cdots + \alpha_k\mathbf{x}_k \in A$:

$$\mathbf{A}(\alpha_1\mathbf{x}_1 + \cdots + \alpha_k\mathbf{x}_k) = \alpha_1\mathbf{A}\mathbf{x}_1 + \cdots + \alpha_k\mathbf{A}\mathbf{x}_k = \alpha_1\mathbf{b} + \cdots + \alpha_k\mathbf{b} = \mathbf{b}.$$

Jiný důkaz \Leftarrow : Necht' $X = \text{null } \mathbf{A}$ a \mathbf{x}_0 je libovolný bod splňující $\mathbf{A}\mathbf{x}_0 = \mathbf{b}$ (tzv. *partikulární řešení* soustavy $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$). Pak

$$A = \{ \mathbf{x} \mid \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \} = \{ \mathbf{x} \mid \mathbf{A}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = \mathbf{0} \} = \{ \mathbf{x}' + \mathbf{x}_0 \mid \mathbf{A}\mathbf{x}' = \mathbf{0} \} = X + \mathbf{x}_0. \quad (3.20)$$

Tedy dle Věty 3.12 je A afinní podprostor.

Důkaz \Rightarrow : Necht' A je afinní podprostor a necht' $\mathbf{x}_0 \in A$. Pak (dle Věty 3.12) je množina $X = A - \mathbf{x}_0$ lineární podprostor, tedy (viz poznámka v §3.2.2) existuje matice \mathbf{A} tak, že $X = \text{null } \mathbf{A}$. Necht' $\mathbf{b} = \mathbf{A}\mathbf{x}_0$. Pak dle (3.20) je $X + \mathbf{x}_0 = \{ \mathbf{x} \mid \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \}$. \square

⁴Proto se afinnímu podprostoru říká také *lineární varieta*. Je to speciální případ *algebraické variety*, což je množina řešení soustavy polynomiálních rovnic. Jejich studiem se zabývá *algebraická geometrie*.

Shrňme: každý lineární podprostor lze reprezentovat buď jako $\text{rng } \mathbf{A}$ pro nějakou matici \mathbf{A} , nebo jako $\text{null } \mathbf{A}$ (tj. množinou řešení soustavy $\mathbf{Ax} = \mathbf{0}$) pro nějakou (jinou!) matici \mathbf{A} . Každý afinní podprostor lze reprezentovat buď jako $\mathbf{x} + X$ pro nějaký vektor \mathbf{x} a lineární podprostor X , nebo jako množinu řešení soustavy $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ pro nějaké \mathbf{A}, \mathbf{b} .

Body $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$ jsou **afinně nezávislé**, jestliže žádný není afinní kombinací ostatních. Afinní nezávislost lze ovšem definovat i jinak (důkaz věty neuvádíme, i když není těžký):

Věta 3.14. Pro body $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$ jsou následující tvrzení ekvivalentní:

1. Žádný bod není roven afinní kombinaci ostatních bodů.
2. Platí (srov. se (3.2))

$$\alpha_1 + \dots + \alpha_k = 0, \quad \alpha_1 \mathbf{x}_1 + \dots + \alpha_k \mathbf{x}_k = \mathbf{0} \quad \implies \quad \alpha_1 = \dots = \alpha_k = 0. \quad (3.21)$$

3. Vektory $\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k - \mathbf{x}_1$ jsou lineárně nezávislé.
4. Vektory $\begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 \\ 1 \end{bmatrix}, \dots, \begin{bmatrix} \mathbf{x}_k \\ 1 \end{bmatrix}$ jsou lineárně nezávislé (kde $\begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n+1}$ značí vektor \mathbf{x} s přidanou jedničkou jako $(n+1)$ -ní souřadnicí⁵).

Příklad 3.8. Dva body $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \mathbb{R}^n$ jsou afinně nezávislé, právě když $\mathbf{x}_1 \neq \mathbf{x}_2$ (neboli nejsou identické). Tři body $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3 \in \mathbb{R}^n$ jsou afinně nezávislé, právě když neleží v jedné přímce (neboli nejsou *kolineární*). Viz Příklad 3.7. Čtyři body $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4 \in \mathbb{R}^n$ jsou afinně nezávislé, právě když neleží v jedné rovině (neboli nejsou *koplanární*). \square

Zobrazení $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ nazveme **afinní**, pokud (3.4) platí pro všechna $\alpha_1 + \dots + \alpha_k = 1$. Lze dokázat (proved'te!), že zobrazení \mathbf{f} je afinní, právě když existuje matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ a vektor $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ tak, že

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{Ax} + \mathbf{b}. \quad (3.22)$$

Pro $m = 1$ se zobrazení (3.22) nazývá také **afinní funkce**⁶ $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ a má tvar

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{a}^T \mathbf{x} + b = a_1 x_1 + \dots + a_n x_n + b, \quad (3.23)$$

kde $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$ a $b \in \mathbb{R}$.

Příklad 3.9. Zobrazení $\mathbf{f}: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$ definované jako $\mathbf{f}(x_1, x_2) = (x_1 + x_2 + 1, x_1 - x_2 - 2, 2x_1)$ je afinní. To bychom mohli dokázat ověřením podmínek (3.4) pro $\alpha_1 + \dots + \alpha_k = 1$. Ale je to patrné i z toho, že zobrazení lze vyjádřit ve tvaru (3.22):

$$\mathbf{f}(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \\ 2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad \square$$

⁵Tento vektor dobře znají počítačové grafici jako *homogenní souřadnice* bodu \mathbf{x} .

⁶V lineární algebře znamená 'lineární funkce' něco jiného než v matematické analýze. Např. funkci jedné proměnné $f(x) = ax + b$ znáte ze základní školy jako lineární, v lineární algebře však lineární není – je afinní. Ovšem soustavě rovnic $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ se říká 'lineární' i v lineární algebře.

Příklad 3.10. Pro dané body $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$ a $\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_k \in \mathbb{R}^m$ máme za úkol najít afinní zobrazení \mathbf{f} takové, aby platilo $\mathbf{y}_i = \mathbf{f}(\mathbf{x}_i)$ pro všechna $i = 1, \dots, k$. Řešíme tedy lineární soustavu $\mathbf{y}_i = \mathbf{A}\mathbf{x}_i + \mathbf{b}$, $i = 1, \dots, k$, pro neznámé $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ a $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$. Tuto soustavu můžeme napsat v maticovém tvaru

$$[\mathbf{y}_1 \ \cdots \ \mathbf{y}_k] = [\mathbf{A} \ \mathbf{b}] \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 & \cdots & \mathbf{x}_k \\ 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}.$$

Je-li $k = n + 1$ a body $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k$ jsou afinně nezávislé, matice $\begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 & \cdots & \mathbf{x}_k \\ 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$ je regulární a tedy soustava má jediné řešení. \square

Shrňme: každé lineární zobrazení lze reprezentovat jako $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{x}$ pro nějakou \mathbf{A} a každé afinní zobrazení jako $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b}$ pro nějaké \mathbf{A}, \mathbf{b} .

3.4 Cvičení

3.1. Rozhodněte, zda následující množiny jsou lineární nebo afinní podprostory \mathbb{R}^n a když ano, určete jejich dimenze:

- a) $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{a}^T \mathbf{x} = 0 \}$ pro dané $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$
- b) $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{a}^T \mathbf{x} = b \}$ pro dané $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n, b \in \mathbb{R}$
- c) $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{x}^T \mathbf{x} = 1 \}$
- d) $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{a}\mathbf{x}^T = \mathbf{I} \}$ pro dané $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$
- e) $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \sum_{i=1}^n x_i = 0 \}$

3.2. Je dáno zobrazení $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{x} \times \mathbf{y}$, kde $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^3$ je pevný vektor a \times označuje vektorový součin. Jde tedy o zobrazení $\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$. Je toto zobrazení lineární? Pokud ano, najděte matici \mathbf{A} tak, aby $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{x}$. Čemu je rovno \mathbf{A}^T ? Jakou hodnotu má \mathbf{A} ?

3.3. Máme zobrazení $\mathbf{f}: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$ definované jako $\mathbf{f}(x, y) = (x + y, 2x - 1, x - y)$. Je toto zobrazení lineární? Pokud ano, napište ho ve formě (3.5). Je toto zobrazení afinní? Pokud ano, napište ho ve formě (3.22). Obě odpovědi dokažte z definic.

3.4. Mějme nehomogenní lineární soustavu

$$\begin{aligned} x + 2y + z &= 1 \\ -x + y + 2z &= 2 \end{aligned}$$

dvou rovnic o třech neznámých. Napište množinu řešení soustavy jako $X + \mathbf{x}_0$, kde $X \subseteq \mathbb{R}^3$ je lineární podprostor (napište jeho bázi) a $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^3$.

3.5. Najděte bázi prostoru obrazů a bázi nulového prostoru následujících lineárních zobrazení:

- a) $\mathbf{f}(x_1, x_2, x_3) = (x_1 - x_2, x_2 - x_3 + 2x_1)$
- b) $\mathbf{f}(x_1, x_2) = (2x_1 + x_2, x_1 - x_2, 2x_2 + x_1)$

3.6. Máte matice \mathbf{A} a \mathbf{B} se stejným počtem řádků. Jak byste ověřili, zda $\text{rng } \mathbf{A} = \text{rng } \mathbf{B}$, umíte-li spočítat hodnotu libovolné matice?

3.7. Které z těchto výroků jsou pravdivé? Každý výrok dokažte nebo najděte protipříklad. Některé výroky mohou platit jen pro určité rozměry matic – najděte co nejobecnější podmínky na rozměry matic, aby výroky byly pravdivé.

- a) Pokud \mathbf{AB} má plnou hodnost, pak \mathbf{A} a \mathbf{B} mají plnou hodnost.
 b) Pokud \mathbf{A} a \mathbf{B} mají plnou hodnost, pak \mathbf{AB} má plnou hodnost.
 c) Pokud \mathbf{A} a \mathbf{B} mají triviální nulový prostor, pak \mathbf{AB} má triviální nulový prostor.
 d) (\star) Pokud \mathbf{A} a \mathbf{B} jsou úzké s plnou hodností a platí $\mathbf{A}^T\mathbf{B} = \mathbf{0}$, pak matice $[\mathbf{A} \ \mathbf{B}]$ je úzká s plnou hodností.
 e) (\star) Pokud matice $\begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{B} \end{bmatrix}$ má plnou hodnost, pak \mathbf{A} i \mathbf{B} mají plnou hodnost.
- 3.8. Necht' X je lineární podprostor \mathbb{R}^n a $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ je lineární zobrazení. Je množina $\mathbf{f}(X)$ lineární podprostor \mathbb{R}^m ? Odpověď dokažte.
- 3.9. Navrhněte postup, jak spočítat afinní zobrazení $\mathbf{f}: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$, které zobrazí trojúhelník s vrcholy $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3 \in \mathbb{R}^2$ na trojúhelník s vrcholy $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3 \in \mathbb{R}^2$. Zobrazení má zobrazit bod \mathbf{p}_1 do bodu \mathbf{q}_1 atd.
- 3.10. Zjistí, zda existuje lineární funkce f splňující tyto podmínky:
- a) $f(1, 2) = 2, f(3, 4) = 3$.
 b) $f(1, 2) = 2, f(3, 4) = 3, f(5, 6) = 4$.
 c) $f(1, 0, 1) = -1, f(0, 1, 2) = 1, f(1, 1, 3) = 2$.
- 3.11. Máme podprostor $X \subseteq \mathbb{R}^3$ s bází tvořenou vektory $(1, 2, 3)$ a $(-1, 0, 1)$. Necht' $\mathbf{x} = (2, 2, 2)$. Platí $\mathbf{x} \in X$? Pokud ano, najděte souřadnice vektoru \mathbf{x} v této bázi.
- 3.12. Necht' \mathbf{A} má lineárně nezávislé sloupce. Ukažte, že každá báze podprostoru $\text{rng } \mathbf{A}$ je tvořena sloupci matice \mathbf{AB} pro nějakou regulární matici \mathbf{B} .
- 3.13. Dokažte, že pro libovolné dvě matice platí $\text{rank}(\mathbf{AB}) \leq \min\{\text{rank } \mathbf{A}, \text{rank } \mathbf{B}\}$.
- 3.14. Dokažte, že pro každou matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ hodnosti r existují matice $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{m \times r}$ a $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{r \times n}$ tak, že $\mathbf{A} = \mathbf{BC}$. Poznamenejme, že tomuto rozkladu se říká **rozklad matice podle hodnosti** (*rank factorization*). Jestliže $r \ll \min\{m, n\}$, můžeme tím v některých situacích ušetřit paměť nebo čas. Porovnejte velikost paměti potřebné pro uložení matice \mathbf{A} a matic \mathbf{B}, \mathbf{C} . Jak byste efektivně spočítali součin \mathbf{Ax} ?
- 3.15. (\star) Mějme vektory $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k$. Vektor \mathbf{x}_i nazveme *klíčový*, je-li lineárně nezávislý na předchozích vektorech $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{i-1}$. Dokažte, že množina klíčových vektorů je báze podprostoru $\text{span}\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k\}$. Všimněte si, že vlastně dokazujete třetí tvrzení Věty 3.2.
- 3.16. (\star) Máme lineárně nezávislé vektory $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m \in \mathbb{R}^n$ a hledáme vektory $\mathbf{a}_{m+1}, \dots, \mathbf{a}_n \in \mathbb{R}^n$ tak, aby vektory $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n$ byly lineárně nezávislé. Dokažte, že to jde udělat následovně. Necht' $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ je matice s řádky $\mathbf{a}_1^T, \dots, \mathbf{a}_m^T$. Vybereme množinu $J \subseteq \{1, \dots, n\}$ lineárně nezávislých sloupců matice \mathbf{A} (viz předchozí cvičení). Pak zvolíme vektory $\mathbf{a}_{m+1}, \dots, \mathbf{a}_n$ jako $n - m$ vektorů standardní báze $\mathbf{e}_j \in \mathbb{R}^n$ kde $j \in \{1, \dots, n\} \setminus J$. Všimněte si, že vlastně dokazujete čtvrté tvrzení Věty 3.2.
- 3.17. (\star) Dokažte Větu 3.14.

Nápověda a řešení

- 3.1.a) Lineární podprostor, dimenze $n - 1$ pro $\mathbf{a} \neq \mathbf{0}$ a n pro $\mathbf{a} = \mathbf{0}$.
 3.1.b) Afinní podprostor dimenze $n - 1$ pro $\mathbf{a} \neq \mathbf{0}$ a n pro $\mathbf{a} = \mathbf{0}, b = 0$. Pro $\mathbf{a} = \mathbf{0}, b \neq 0$ je množina prázdná (tedy není afinní podprostor).

3.1.c) Není lineární ani afinní podprostor (je to sféra).

3.1.d) Pro $n = 1$ a $\mathbf{a} \neq \mathbf{0}$ je množinou jediný bod, tedy afinní podprostor prostoru \mathbb{R} . Pro $n = 1$ a $\mathbf{a} = \mathbf{0}$ je množina prázdná (tedy není afinní podprostor). Pro $n > 1$ je množina také prázdná, protože soustava $\mathbf{ax}^T = \mathbf{I}$ nemá řešení pro žádné \mathbf{a}, \mathbf{x} (možný důkaz: je $\text{rank } \mathbf{I} = n$, ale $\text{rank}(\mathbf{ax}^T) \leq 1$).

3.1.e) Lineární podprostor dimenze $n - 1$.

3.2. Je lineární, $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & y_3 & -y_2 \\ -y_3 & 0 & y_1 \\ y_2 & -y_1 & 0 \end{bmatrix}$ je antisymetrická hodnosti 2 pro $\mathbf{y} \neq \mathbf{0}$.

3.3. Je afinní. Je $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{Ax} + \mathbf{b}$, kde $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 0 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$, $\mathbf{b} = (0, -1, 0) = \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}$, $\mathbf{x} = (x, y) = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$.

3.4. Např. $(1, -1, 2) + \text{span}\{(1, -1, 1)\} = \{(1 + \alpha, -1 - \alpha, 2 + \alpha) \mid \alpha \in \mathbb{R}\}$.

3.5.a) $\text{rng } \mathbf{A} = \mathbb{R}^2$ a tedy báze $\text{rng } \mathbf{A}$ je např. \mathbf{I}_2 . Báze $\text{null } \mathbf{A}$ je např. $(1, 1, 3)$.

3.5.b) Báze $\text{rng } \mathbf{A}$ je např. $(2, 1, 1), (1, -1, 2)$. Báze $\text{null } \mathbf{A}$ je např. $(0, 0)$.

3.6. $\text{rng } \mathbf{A} = \text{rng } \mathbf{B}$ je ekvivalentní $\text{rank } \mathbf{A} = \text{rank}[\mathbf{A} \ \mathbf{B}] = \text{rank } \mathbf{B}$.

3.9. Viz Příklad 3.10.

3.10.a) Je $f(x_1, x_2) = a_1x_1 + a_2x_2$. Rešíme soustavu $a_1 + 2a_2 = 2$, $3a_1 + 4a_2 = 3$. Tato soustava má řešení, tedy lineární funkce existuje.

3.10.b) Ano.

3.10.c) Ne.

3.13. Z Věty 3.6 je $\text{rank}(\mathbf{AB}) \leq \text{rank } \mathbf{A}$. Dle (2.2) je $\text{rank}(\mathbf{AB}) = \text{rank}((\mathbf{AB})^T) = \text{rank}(\mathbf{B}^T \mathbf{A}^T) \leq \text{rank}(\mathbf{B}^T) = \text{rank } \mathbf{B}$.

3.14. Necht' sloupce \mathbf{B} tvoří bázi podprostoru $\text{rng } \mathbf{A}$. Pak každý sloupec \mathbf{a}_j matice \mathbf{A} je lineární kombinací sloupců \mathbf{B} , tedy $\mathbf{a}_j = \mathbf{Bc}_j$. Vektory \mathbf{c}_j tvoří sloupce matice \mathbf{C} .

Kapitola 4

Ortogonalita

4.1 Standardní skalární součin

Na prostoru \mathbb{R}^n lze přirozeně definovat **standardní skalární součin**¹

$$\mathbf{x}^T \mathbf{y} = x_1 y_1 + \cdots + x_n y_n = \mathbf{y}^T \mathbf{x}.$$

Skalární součin splňuje **Cauchy-Schwarzovu nerovnost** $(\mathbf{x}^T \mathbf{y})^2 \leq (\mathbf{x}^T \mathbf{x})(\mathbf{y}^T \mathbf{y})$.

Standardní skalární součin indukuje **eukleidovskou normu**

$$\|\mathbf{x}\| = \sqrt{\mathbf{x}^T \mathbf{x}} = (x_1^2 + \cdots + x_n^2)^{1/2}, \quad (4.1)$$

Norma splňuje **trojúhelníkovou nerovnost** $\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|$. Ta snadno plyne z Cauchy-Schwarzovy nerovnosti (umocněte a roznásobte). Norma měří *délku* vektoru \mathbf{x} .

Úhel φ dvojice vektorů se spočítá jako

$$\cos \varphi = \frac{\mathbf{x}^T \mathbf{y}}{\|\mathbf{x}\| \|\mathbf{y}\|}. \quad (4.2)$$

Speciálně, vektory jsou **ortogonální** neboli **kolmé**, jestliže $\mathbf{x}^T \mathbf{y} = 0$, což značíme také $\mathbf{x} \perp \mathbf{y}$.

Eukleidovská norma indukuje **eukleidovskou metriku**

$$d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|, \quad (4.3)$$

která měří *vzdálenost* bodů \mathbf{x} a \mathbf{y} .

Protože pro $n = 3$ takto definované pojmy délky, úhlu a vzdálenosti dobře modelují prostor, ve kterém žijeme, prostoru \mathbb{R}^n se standardním skalárním součinem se často říká *Eukleidovský prostor*.

4.2 Ortogonální podprostory

Vektor $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ je **ortogonální** na podprostor $X \subseteq \mathbb{R}^n$ (což značíme $\mathbf{y} \perp X$ nebo $X \perp \mathbf{y}$), je-li $\mathbf{y} \perp \mathbf{x}$ pro každé $\mathbf{x} \in X$. Pro testování této podmínky stačí ověřit, že \mathbf{y} je kolmý na každý bázový vektor podprostoru X , neboť (dokažte!)

$$\mathbf{y} \perp \text{span}\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k\} \iff \mathbf{y} \perp \mathbf{x}_i, \dots, \mathbf{y} \perp \mathbf{x}_k. \quad (4.4)$$

¹Pro skalární součin prvků \mathbf{x}, \mathbf{y} z abstraktního vektorového prostoru se užívají značení $\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}$, $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle$ nebo (\mathbf{x}, \mathbf{y}) . Protože my ale máme $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$, vystačíme s maticovým zápisem $\mathbf{x}^T \mathbf{y}$.

Podprostory $X, Y \subseteq \mathbb{R}^n$ jsou **ortogonální** (značíme $X \perp Y$), je-li $\mathbf{x} \perp \mathbf{y}$ pro každé $\mathbf{x} \in X$ a $\mathbf{y} \in Y$, neboli $\mathbf{y} \perp X$ pro každé $\mathbf{y} \in Y$. Platí

$$X \perp Y \implies X \cap Y = \{\mathbf{0}\}, \quad (4.5)$$

nebot' jediný vektor kolmý sám na sebe je $\mathbf{0}$ (rozmyslete!).

Ortogonální doplněk podprostoru $X \subseteq \mathbb{R}^n$ je množina

$$X^\perp = \{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{y} \perp X\} \quad (4.6)$$

všech vektorů z \mathbb{R}^n kolmých na podprostor X . Množina (4.6) je podprostor \mathbb{R}^n (dokažte!).

Příklad 4.1. Dvě na sebe kolmé přímky v \mathbb{R}^3 procházející počátkem jsou ortogonální podprostory, jedna přímka není ale ortogonálním doplňkem druhé přímky. Ortogonální doplněk k přímce v \mathbb{R}^3 procházející počátkem je rovina procházející počátkem, která je na tuto přímku kolmá. \square

Příklad 4.2. Pozor, stěna místnosti není kolmá na podlahu. Opravdu, existuje dvojice vektorů, jeden z podlahy a jeden ze stěny, které nejsou na sebe kolmé (kde jsou?). \square

S ortogonálním doplňkem jsme se vlastně už setkali v §3.2.2: nulový prostor matice je tvořen všemi vektory kolmými na všechny řádky matice. Ale (dle (4.4)) vektor je kolmý na všechny řádky matice právě tehdy, je-li kolmý na lineární obal řádků matice. Tedy je-li $X = \text{rng}(\mathbf{A}^T)$, pak $X^\perp = \text{null } \mathbf{A}$. Krátce

$$(\text{rng}(\mathbf{A}^T))^\perp = \text{null } \mathbf{A}. \quad (4.7)$$

Příklad 4.3. Ortogonální doplněk podprostoru $X = \text{span}\{(1, 2, 3), (0, 1, -1)\}$ je množina všech vektorů (x_1, x_2, x_3) splňujících $x_1 + 2x_2 + 3x_3 = x_2 - x_3 = 0$, neboli $X^\perp = \text{null} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix}$. \square

Věta 4.1. Pro každé podprostory $X, Y \subseteq \mathbb{R}^n$ platí:

1. $\dim X + \dim X^\perp = n$,
2. $X \perp Y$ a $\dim X + \dim Y = n$ implikuje $Y = X^\perp$,
3. $(X^\perp)^\perp = X$.

Důkaz.

1. Tvrzení 1 je rovnost (3.17), kde $X = \text{rng}(\mathbf{A}^T)$ a $X^\perp = \text{null } \mathbf{A}$.
2. Platí $X \perp Y \Leftrightarrow Y \subseteq X^\perp$ (nebot' $Y \subseteq X^\perp$ znamená, že každý vektor z Y je kolmý na X). Dle tvrzení 1 tedy $\dim(X^\perp) = n - \dim X = \dim Y$. Dle Věty 3.3 proto $Y = X^\perp$.
3. Necht' $Y = X^\perp$. Z toho plyne $X \perp Y$ a $\dim X + \dim Y = n$. Z toho ale dle tvrzení 2 plyne $X = Y^\perp = (X^\perp)^\perp$. \square

Dle tvrzení 3 je $Y = X^\perp \Leftrightarrow X = Y^\perp$. Proto říkáme, že podprostory X a Y jsou *ortogonálním doplňkem jeden druhého*.

Zformulujme podrobněji naše pozorování výše, které vedlo k rovnosti (4.7). Pro každou matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ je jasné, že:

- $\text{rng } \mathbf{A} = \{\mathbf{Ax} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n\} \subseteq \mathbb{R}^m$ je lineární obal sloupců \mathbf{A} ,

- $\text{null } \mathbf{A} = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{0} \} \subseteq \mathbb{R}^n$ je prostor všech vektorů kolmých na řádky \mathbf{A} ,
- $\text{rng}(\mathbf{A}^T) = \{ \mathbf{A}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^m \} \subseteq \mathbb{R}^n$ je lineární obal řádků \mathbf{A} ,
- $\text{null}(\mathbf{A}^T) = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^m \mid \mathbf{A}^T \mathbf{x} = \mathbf{0} \} \subseteq \mathbb{R}^m$ je prostor všech vektorů kolmých na sloupce \mathbf{A} .

Rovnost (4.7) plyne z druhého a třetího výroku. Dále platí tato věta:

Věta 4.2. Pro každou matici \mathbf{A} platí

$$(\text{rng } \mathbf{A})^\perp = \text{null}(\mathbf{A}^T), \quad (4.8a)$$

$$(\text{null } \mathbf{A})^\perp = \text{rng}(\mathbf{A}^T). \quad (4.8b)$$

Důkaz. Rovnost (4.8a) plyne z prvního a čtvrtého pozorování výše. Je to vlastně rovnost (4.7) použitá na matici \mathbf{A}^T . Rovnost (4.8b) se získá použitím rovnosti (4.8a) na matici \mathbf{A}^T a rovnosti $(X^\perp)^\perp = X$. \square

4.3 Ortonormální množina vektorů

Vektor $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^m$ nazveme **normalizovaný**, pokud má jednotkovou délku ($\|\mathbf{u}\| = 1 = \mathbf{u}^T \mathbf{u}$). Množinu vektorů $\{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n\}$ nazveme² **ortonormální** (trochu nepřesně³ říkáme, že *vektory* $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n$ jsou ortonormální), jestliže každý vektor z této množiny je normalizovaný a každá dvojice vektorů z této množiny je ortogonální, tedy

$$\mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_j = \delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{když } i \neq j, \\ 1 & \text{když } i = j. \end{cases} \quad (4.9)$$

Věta 4.3. Ortonormální množina vektorů je lineárně nezávislá.

Důkaz. Vynásobme levou stranu implikace (3.2) skalárně vektorem \mathbf{u}_i , což dá

$$\alpha_i = \alpha_i \mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_i = \alpha_1 \mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_1 + \dots + \alpha_n \mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_n = \mathbf{u}_i^T \mathbf{0} = 0.$$

To platí pro každé i , tedy $\alpha_1 = \dots = \alpha_n = 0$. To je pravá strana implikace (3.2). \square

Věta 4.4. Necht' jsou vektory $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n$ ortonormální. Necht'

$$\mathbf{x} = \alpha_1 \mathbf{u}_1 + \dots + \alpha_n \mathbf{u}_n. \quad (4.10)$$

Pak $\alpha_i = \mathbf{u}_i^T \mathbf{x}$.

Důkaz. Vynásobením rovnice (4.10) zleva skalárně vektorem \mathbf{u}_i máme $\mathbf{u}_i^T \mathbf{x} = \mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_i \alpha_i = \alpha_i$. \square

Připomeňme (§3.1), že skaláry $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ jsou souřadnice vektoru \mathbf{x} v ortonormální bázi $\{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n\}$ podprostoru $\text{span}\{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n\}$. Ze střední školy víte (zopakujte a odvoďte!), že $\mathbf{u}_i^T \mathbf{x}$ je délka ortogonální projekce vektoru \mathbf{x} do (normalizovaného) vektoru \mathbf{u}_i . Uvědomte si rozdíl oproti situaci, kdy vektory $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n$ jsou lineárně nezávislé, ale ne ortonormální (Věta 3.1): v tom případě koeficienty α_i musíme počítat řešením lineární soustavy (4.10).

Dosazení $\alpha_i = \mathbf{u}_i^T \mathbf{x}$ do (4.10) ukáže, že pro každé $\mathbf{x} \in \text{span}\{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n\}$ máme

$$\mathbf{x} = (\mathbf{u}_1^T \mathbf{x}) \mathbf{u}_1 + \dots + (\mathbf{u}_n^T \mathbf{x}) \mathbf{u}_n. \quad (4.11)$$

Podotkněme, že ortonormální báze lineárního (pod)prostoru odpovídá tomu, co ze základní školy znáte pod pojmem 'kartézský souřadnicový systém'. Souřadnice bodu (pod)prostoru vůči jeho ortonormální bázi (viz §3.1) pak známe jako jeho 'kartézské souřadnice'.

²Pro vektory z ortonormální množiny je obvyklé používat písmena $\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{q}$ a ne $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{a}$, jak jsme zvyklí. Podobně, matice s ortonormálními sloupci (§4.4) je obvyklé značit $\mathbf{U}, \mathbf{V}, \mathbf{Q}$ místo \mathbf{A}, \mathbf{B} .

³Nepřesně proto, že ortonormalita není vlastnost jednoho vektoru, ale množiny vektorů.

4.4 Matice s ortonormálními sloupci

Necht' sloupce matice $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ tvoří ortonormální množinu vektorů. Dle Věty 4.3 jsou sloupce \mathbf{U} lineárně nezávislé, tedy nutně $m \geq n$ (tj. \mathbf{U} je čtvercová nebo úzká). Podmínku ortonormality (4.9) sloupců matice \mathbf{U} lze psát stručně jako (proč?)

$$\mathbf{U}^T \mathbf{U} = \mathbf{I}. \quad (4.12)$$

To také znamená, že \mathbf{U}^T je levá inverze matice \mathbf{U} a \mathbf{U} je pravá inverze matice \mathbf{U}^T (viz §2.4). Dle Věty 4.4 pro každé $\mathbf{x} \in \text{rng } \mathbf{U}$ platí $\mathbf{U} \mathbf{U}^T \mathbf{x} = \mathbf{x}$, což je rovnost (4.11) v maticovém tvaru.

Lineární zobrazení $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{U} \mathbf{x}$ (zobrazení z \mathbb{R}^n do \mathbb{R}^m) zachovává skalární součin, neboť

$$\mathbf{f}(\mathbf{x})^T \mathbf{f}(\mathbf{y}) = (\mathbf{U} \mathbf{x})^T (\mathbf{U} \mathbf{y}) = \mathbf{x}^T \mathbf{U}^T \mathbf{U} \mathbf{y} = \mathbf{x}^T \mathbf{y}. \quad (4.13)$$

Pro $\mathbf{x} = \mathbf{y}$ dostaneme $\|\mathbf{f}(\mathbf{x})\| = \|\mathbf{U} \mathbf{x}\| = \|\mathbf{x}\|$, neboli zobrazení zachovává také eukleidovskou normu. Zobrazení \mathbf{f} tedy zachovává délky a úhly. Taková zobrazení se nazývají **isometrie**⁴.

Věta 4.5. Pro každou čtvercovou matici \mathbf{U} platí

$$\mathbf{U}^T \mathbf{U} = \mathbf{I} \iff \mathbf{U}^T = \mathbf{U}^{-1} \iff \mathbf{U} \mathbf{U}^T = \mathbf{I}. \quad (4.14)$$

Důkaz. Necht' platí levá rovnost. Pak jsou sloupce \mathbf{U} ortonormální a tedy lineárně nezávislé. To ale znamená, že \mathbf{U} je regulární, protože je čtvercová. Vynásobením levé rovnice maticí \mathbf{U}^{-1} zprava získáme prostřední rovnici. Vynásobením prostřední rovnice maticí \mathbf{U} zleva získáme pravou rovnici. Zbylé implikace dokážeme podobně. \square

Věta říká, že má-li čtvercová matice ortonormální sloupce, má ortonormální i řádky, a inverze takové matice se spočítá jednoduše transpozicí. Čtvercové matici splňující podmínky (4.14) se říká **ortogonální matice**.

Zdůrazněme, že pokud \mathbf{U} je obdélníková s ortonormálními sloupci, neplatí $\mathbf{U} \mathbf{U}^T = \mathbf{I}$ (platí pouze $\mathbf{U} \mathbf{U}^T \mathbf{x} = \mathbf{x}$ pro každé $\mathbf{x} \in \text{rng } \mathbf{U}$). Dále, pokud má \mathbf{U} ortogonální (ne však ortonormální) sloupce, nemusí mít ortogonální řádky⁵.

Necht' \mathbf{U} je ortogonální matice. Vezmeme-li determinant obou stran rovnice $\mathbf{U}^T \mathbf{U} = \mathbf{I}$, máme $\det(\mathbf{U}^T \mathbf{U}) = \det(\mathbf{U}^T) \det \mathbf{U} = (\det \mathbf{U})^2 = 1$. Tedy $\det \mathbf{U} \in \{-1, 1\}$.

- Pokud $\det \mathbf{U} = 1$, matici se říká **speciální ortogonální** nebo také **rotační**, protože transformace $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{U} \mathbf{x}$ (zobrazení z \mathbb{R}^n do sebe) znamená *otočení* vektoru \mathbf{x} okolo počátku. Každou rotaci v prostoru \mathbb{R}^n lze jednoznačně reprezentovat rotační maticí.
- Pokud $\det \mathbf{U} = -1$, transformace \mathbf{f} je složením otočení a *zrcadlení* (reflexe) kolem nadroviny procházející počátkem.

Příklad 4.4. Všechny rotační matice 2×2 lze napsat jako

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{bmatrix}$$

pro nějaké φ . Násobení vektoru touto maticí odpovídá otočení vektoru v rovině o úhel φ . Zkontrolujte si, že $\mathbf{U}^T \mathbf{U} = \mathbf{I} = \mathbf{U} \mathbf{U}^T$ a $\det \mathbf{U} = 1$. \square

⁴Obecněji, *isometrie* je zobrazení mezi dvěma metrickými (ne nutně lineárními) prostory, které zachovává vzdálenosti. V našem případě bychom mohli přesněji mluvit o *lineární isometrii*, tedy o isometrii, která je zároveň lineární zobrazení.

⁵To je možná důvod, proč se čtvercové matici s ortonormálními sloupci (tedy i řádky) neříká 'ortonormální' ale 'ortogonální'. Obdélníková matice s ortonormálními sloupci a čtvercová matice s ortogonálními (ne však ortonormálními) sloupci zvláštní jména nemají.

Příklad 4.5. Zrcadlení (neboli reflexe) v \mathbb{R}^2 kolem přímky procházející počátkem a směrnici $\tan(\varphi/2)$ je reprezentováno ortogonální maticí

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ \sin \varphi & -\cos \varphi \end{bmatrix}. \quad \square$$

Příklad 4.6. Permutační matice je čtvercová matice, jejíž sloupce jsou permutované vektory standardní báze. Např.

$$[\mathbf{e}_3 \ \mathbf{e}_1 \ \mathbf{e}_2] = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Permutační matice je ortogonální (dokažte!) a její determinant je rovný znaménku permutace. \square

4.5 QR rozklad

Věta 4.6. Každou matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ lze rozložit na součin

$$\mathbf{A} = \mathbf{QR}, \quad (4.15)$$

kde matice $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ je ortogonální a matice $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ je horní trojúhelníková.

Rozkladu matice (4.15) se říká **QR rozklad** matice \mathbf{A} . QR rozklad se počítá (což zároveň dokáže Větu 4.6) pomocí algoritmů založených na *Gramm-Schmidtově ortogonalizaci*, *Householderových reflexích* nebo *Givensových rotacích* (tyto algoritmy neuvádíme). V Matlabu jej spočítáte příkazem `[Q,R]=qr(A)`.

Věta 4.6 popisuje tzv. *plnou* verzi QR rozkladu. Pokud $m > n$, je posledních $m - n$ řádků matice \mathbf{R} nulových (protože \mathbf{R} je horní trojúhelníková). Tyto řádky jsou násobeny posledními $m - n$ sloupci matice \mathbf{Q} . Vynecháme-li tedy z matice \mathbf{R} posledních $m - n$ řádků a z matice \mathbf{Q} posledních $m - n$ sloupců, součin \mathbf{QR} se nezmění. Pro $m > n$ lze tedy každou $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ rozložit jako $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$ kde $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ má ortonormální sloupce a $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je horní trojúhelníková. Toto je *redukovaná* verze QR rozkladu, v Matlabu `[Q,R]=qr(A,0)`. Pro $m \leq n$ obě verze splývají. Zkoumejte v Matlabu příkaz `help qr`!

Necht' $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$ je redukovaný QR rozklad. Dle Věty 3.6 je $\text{rng } \mathbf{A} = \text{rng}(\mathbf{QR}) \subseteq \text{rng } \mathbf{Q}$. Pokud $\text{rank } \mathbf{A} = n$ (např. \mathbf{A} má lineárně nezávislé sloupce), tak dle Věty 3.3 je $\text{rng } \mathbf{A} = \text{rng } \mathbf{Q}$. Takže sloupce matice \mathbf{Q} tvoří ortonormální bázi podprostoru $\text{rng } \mathbf{A}$. Z Věty 4.6 tedy plyne, že *každý podprostor má ortonormální bázi* (což je netriviální tvrzení!).

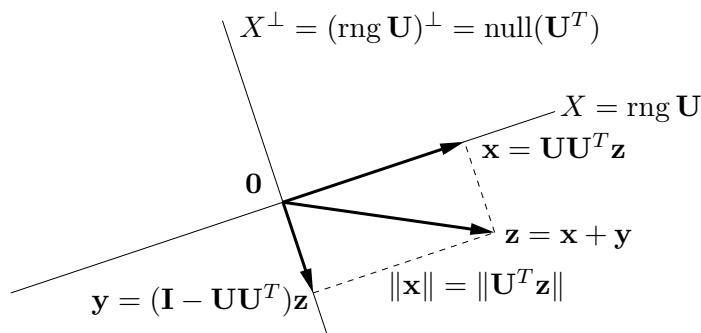
QR rozklad je velmi užitečný. Typické je jeho užití na řešení lineárních soustav. Řešíme-li soustavu $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, rozložíme $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$ a vynásobíme soustavu zleva \mathbf{Q}^T , což dá

$$\mathbf{Rx} = \mathbf{Q}^T \mathbf{b}. \quad (4.16)$$

Toto je ekvivalentní úprava, neboť \mathbf{Q} je regulární (v případě plného QR rozkladu). Ale protože je \mathbf{R} trojúhelníková, soustavu jsme velmi zjednodušili. Např. pokud je \mathbf{A} čtvercová regulární, jediné řešení soustavy (4.16) lze levně najít zpětnou substitucí.

4.6 Ortogonální projekce

Ortogonální projekce vektoru $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^m$ na podprostor $X \subseteq \mathbb{R}^m$ je vektor $\mathbf{x} \in X$ takový, že $(\mathbf{z} - \mathbf{x}) \perp X$. Viz obrázek:



Ukážeme, jak ortogonální projekci spočítat, je-li dána ortonormální báze podprostoru X , tedy je-li dána matice $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ taková, že $X = \text{rng } \mathbf{U}$ a $\mathbf{U}^T \mathbf{U} = \mathbf{I}$. Protože (viz §4.5) každý podprostor má ortonormální bázi, dokážeme tím zároveň i existenci a jednoznačnost ortogonální projekce. Případem, kdy podprostor X je zadán libovolnou (ne nutně ortonormální) bází, se budeme zabývat později v §5.1.1.

Věta 4.7. Necht' matice $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ se sloupci $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n \in \mathbb{R}^m$ splňuje $\mathbf{U}^T \mathbf{U} = \mathbf{I}$. Ortogonální projekce vektoru $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^m$ na podprostor $\text{rng } \mathbf{U}$ je vektor

$$\mathbf{x} = \mathbf{U} \mathbf{U}^T \mathbf{z} = (\mathbf{u}_1^T \mathbf{z}) \mathbf{u}_1 + \dots + (\mathbf{u}_n^T \mathbf{z}) \mathbf{u}_n. \quad (4.17)$$

Důkaz. Hledáme vektor $\mathbf{x} \in \text{rng } \mathbf{U}$ splňující $(\mathbf{z} - \mathbf{x}) \perp \text{rng } \mathbf{U}$. Dle (3.10) je $\mathbf{x} \in \text{rng } \mathbf{U}$ právě když $\mathbf{x} = \mathbf{U} \boldsymbol{\alpha}$ pro nějaké $\boldsymbol{\alpha}$. Podmínka $(\mathbf{z} - \mathbf{x}) \perp \text{rng } \mathbf{U}$ říká, že vektor $\mathbf{z} - \mathbf{x} = \mathbf{z} - \mathbf{U} \boldsymbol{\alpha}$ je kolmý na sloupce matice \mathbf{U} . To lze psát jako $\mathbf{U}^T (\mathbf{z} - \mathbf{U} \boldsymbol{\alpha}) = \mathbf{0}$ neboli $\mathbf{U}^T \mathbf{z} = \mathbf{U}^T \mathbf{U} \boldsymbol{\alpha}$. Protože $\mathbf{U}^T \mathbf{U} = \mathbf{I}$, tato rovnice má právě jedno řešení $\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{U}^T \mathbf{z}$. Po dosazení $\mathbf{x} = \mathbf{U} \boldsymbol{\alpha} = \mathbf{U} \mathbf{U}^T \mathbf{z}$.

Druhá rovnost v (4.17) je jen otázka značení. Uvědomíme si⁶, že $\mathbf{u} \mathbf{u}^T \mathbf{z} = (\mathbf{u}^T \mathbf{z}) \mathbf{u}$, a pak

$$\mathbf{U} \mathbf{U}^T \mathbf{z} = \mathbf{u}_1 \mathbf{u}_1^T \mathbf{z} + \dots + \mathbf{u}_n \mathbf{u}_n^T \mathbf{z} = (\mathbf{u}_1^T \mathbf{z}) \mathbf{u}_1 + \dots + (\mathbf{u}_n^T \mathbf{z}) \mathbf{u}_n. \quad \square$$

Poznámky k větě:

- Podle Věty 4.4 pro každé $\mathbf{z} \in \text{rng } \mathbf{U}$ máme $\mathbf{U} \mathbf{U}^T \mathbf{z} = \mathbf{z}$ (pozor: ve (4.11) máme \mathbf{x} místo \mathbf{z}).
- Skaláry $\alpha_i = \mathbf{u}_i^T \mathbf{z}$ v (4.17) jsou souřadnice vektoru \mathbf{x} v ortonormální bázi $\{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_k\}$ podprostoru X (srov. Věta 4.4). Řečeno maticově, $\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{U}^T \mathbf{z} \in \mathbb{R}^n$ jsou souřadnice vektoru $\mathbf{x} = \mathbf{U} \boldsymbol{\alpha}$ v ortonormální bázi tvořené sloupci \mathbf{U} .
- Přidáme-li k vektorům $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n$ vektory $\mathbf{u}_{n+1}, \dots, \mathbf{u}_m$ tak, aby množina $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_m$ byla ortonormální, dostaneme ortonormální bázi prostoru \mathbb{R}^m . Dle (4.11) tedy pro každé $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^m$ máme

$$\mathbf{z} = (\mathbf{u}_1^T \mathbf{z}) \mathbf{u}_1 + \dots + (\mathbf{u}_m^T \mathbf{z}) \mathbf{u}_m. \quad (4.18)$$

Vidíme, že (4.17) je vlastně 'zkrácená' suma (4.18), ze které jsme vzali jen prvních n členů.

⁶Pozor.: závorka ve výrazu $(\mathbf{u}^T \mathbf{z}) \mathbf{u}$ je nutná, protože součin výrazů $\mathbf{u}^T \mathbf{z}$ a \mathbf{u} není maticový součin, ale násobení vektoru skalárem (viz poznámka v §2.1). Oproti tomu, výraz $\mathbf{u} \mathbf{u}^T \mathbf{z}$ je maticový součin tří matic $\mathbf{u}, \mathbf{u}^T, \mathbf{z}$, takže závorky v něm být nemusí.

- Má-li matice \mathbf{U} jediný sloupec (označme ho $\mathbf{U} = \mathbf{u} \in \mathbb{R}^m$), pak

$$\mathbf{x} = \mathbf{u}\mathbf{u}^T\mathbf{z} = (\mathbf{u}^T\mathbf{z})\mathbf{u}. \quad (4.19)$$

To je tedy vzoreček pro projekci vektoru \mathbf{z} na přímku $X = \text{rng } \mathbf{u} = \text{span}\{\mathbf{u}\}$ procházející počátkem (kde $\|\mathbf{u}\| = 1$), který máte znát ze střední školy. Středoškolské odvození: skalární součin $\mathbf{u}^T\mathbf{z}$ je délka (se znaménkem) průmětu a (4.19) je vektor této délky ve směru \mathbf{u} .

Zobrazení dané vzorcem (4.17) (za předpokladu $\mathbf{U}^T\mathbf{U} = \mathbf{I}$) je lineární zobrazení reprezentované maticí

$$\mathbf{P} = \mathbf{U}\mathbf{U}^T, \quad (4.20)$$

které se proto říká **ortogonální projektor** (na podprostor $X = \text{rng } \mathbf{U}$). Z (4.20) ihned plynou (ověřte!) dvě vlastnosti ortogonálního projektoru:

$$\mathbf{P}^2 = \mathbf{P} = \mathbf{P}^T \quad (4.21)$$

(kde \mathbf{P}^2 je zkratka pro $\mathbf{P}\mathbf{P}$). Vlastnost $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}$ (říká se jí *idempotence* matice \mathbf{P}) říká očividnou věc: když vektor jednou promítneme na nějaký podprostor, tak opětovné promítnutí na tentýž podprostor ho už nezmění. Dá se ukázat (důkaz neuvádíme), že každá čtvercová matice s vlastnostmi (4.21) je ortogonální projektor (na nějaký podprostor).

4.6.1 Projekce na ortogonální doplněk

Pohled na ortogonální projekci se stane úplnější, zahrneme-li do něj kromě podprostoru X i jeho ortogonální doplněk X^\perp (viz obrázek výše). Vlastně jsme ukázali, že pro každý vektor $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^m$ existuje právě jedna dvojice vektorů $\mathbf{x} \in X$ a $\mathbf{y} \in X^\perp$ tak, že $\mathbf{x} + \mathbf{y} = \mathbf{z}$. Opravdu, podmínku $\mathbf{y} \in X^\perp$ lze psát jako $\mathbf{y} \perp X$ neboli $(\mathbf{z} - \mathbf{x}) \perp X$ (domyslete do konce!).

Co je prostorem obrazů a nulovým prostorem ortogonálního projektoru? Úvahou (Kam se promítne každý vektor? Které vektory se promítnou do počátku?) snadno vidíme, že

$$\text{rng } \mathbf{P} = X, \quad (4.22a)$$

$$\text{null } \mathbf{P} = X^\perp. \quad (4.22b)$$

Algebraicky to také plyne z Vět 3.6 a 3.8.

Dále z obrázku vidíme, že je-li \mathbf{P} projektor na X , tak $\mathbf{I} - \mathbf{P}$ je projektor na X^\perp . Vskutku:

$$\mathbf{y} = \mathbf{z} - \mathbf{x} = \mathbf{z} - \mathbf{U}\mathbf{U}^T\mathbf{z} = \mathbf{z} - \mathbf{P}\mathbf{z} = (\mathbf{I} - \mathbf{P})\mathbf{z}. \quad (4.23)$$

Rozved'me tuto myšlenku: zkoumejme ortogonální matici $[\mathbf{U} \ \mathbf{V}] \in \mathbb{R}^{m \times m}$, která je složená ze dvou bloků $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ a $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{m \times (m-n)}$. Z ortonormality sloupců máme $\mathbf{U}^T\mathbf{U} = \mathbf{I}$ a $\mathbf{V}^T\mathbf{V} = \mathbf{I}$, a dále $\mathbf{U}^T\mathbf{V} = \mathbf{0}$ neboli $\text{rng } \mathbf{U} \perp \text{rng } \mathbf{V}$. Platí ovšem dokonce

$$(\text{rng } \mathbf{U})^\perp = \text{rng } \mathbf{V}, \quad (4.24)$$

což plyne z Věty 4.1, neboť $\dim \text{rng } \mathbf{U} + \dim \text{rng } \mathbf{V} = n + (m - n) = m$. Vidíme, že rozdělení sloupců ortogonální matice do dvou bloků generuje rozklad prostoru na podprostor a jeho ortogonální doplněk. Navíc z Věty 4.5 máme

$$[\mathbf{U} \ \mathbf{V}] [\mathbf{U} \ \mathbf{V}]^T = \mathbf{U}\mathbf{U}^T + \mathbf{V}\mathbf{V}^T = \mathbf{I}, \quad (4.25)$$

jak ověříme roznásobením blokových matic (proved'te!). To souhlasí, protože projektor na podprostor X je $\mathbf{P} = \mathbf{U}\mathbf{U}^T$ a tedy projektor na podprostor X^\perp je $\mathbf{V}\mathbf{V}^T = \mathbf{I} - \mathbf{U}\mathbf{U}^T = \mathbf{I} - \mathbf{P}$.

4.6.2 Vzdálenost bodu od podprostoru

Z obrázku na začátku §4.6 je intuitivně jasné, že projekce $\mathbf{x} = \mathbf{P}\mathbf{z}$ je bod podprostoru X nejbližší bodu \mathbf{z} . Tato vlastnost ortogonální projekce je důležitá pro optimalizaci, využijeme ji např. v §5. Dokažme ji přesně:

Věta 4.8. *Je-li $\mathbf{x} \in X$ ortogonální projekce vektoru \mathbf{z} na podprostor X , pak pro každé $\mathbf{x}' \in X$ platí $\|\mathbf{z} - \mathbf{x}\| \leq \|\mathbf{z} - \mathbf{x}'\|$.*

Důkaz. Protože X je podprostor a $\mathbf{x}, \mathbf{x}' \in X$, je $\mathbf{x} - \mathbf{x}' \in X$. Protože $(\mathbf{z} - \mathbf{x}) \perp X$, platí $(\mathbf{z} - \mathbf{x}) \perp (\mathbf{x} - \mathbf{x}')$. Z Pythagorovy věty tedy $\|\mathbf{z} - \mathbf{x}'\|^2 = \|\mathbf{z} - \mathbf{x}\|^2 + \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|^2 \geq \|\mathbf{z} - \mathbf{x}\|^2$. \square

Z toho plyne, že vzdálenost bodu \mathbf{z} od podprostoru $X^\perp = (\text{rng } \mathbf{U})^\perp = \text{null}(\mathbf{U}^T)$ je rovna délce projekce bodu \mathbf{z} na podprostor $X = \text{rng } \mathbf{U}$, tedy

$$\|\mathbf{x}\| = \|\mathbf{U}\mathbf{U}^T\mathbf{z}\| = \|\mathbf{U}^T\mathbf{z}\|, \quad (4.26)$$

kde jsme použili, že zobrazení reprezentované maticí \mathbf{U} zachovává eukleidovskou normu (viz §4.4). Samozřejmě stále předpokládáme, že \mathbf{U} má ortonormální sloupce.

Jako v §4.6.1, doplníme matici \mathbf{U} na ortogonální matici $[\mathbf{U} \ \mathbf{V}]$, tedy $X^\perp = \text{rng } \mathbf{V}$. Pak vzdálenost bodu \mathbf{z} od podprostoru X je $\|\mathbf{y}\| = \|\mathbf{V}^T\mathbf{z}\|$. Z (4.25) máme

$$\|\mathbf{x}\|^2 + \|\mathbf{y}\|^2 = \|\mathbf{U}^T\mathbf{z}\|^2 + \|\mathbf{V}^T\mathbf{z}\|^2 = \mathbf{z}^T\mathbf{U}\mathbf{U}^T\mathbf{z} + \mathbf{z}^T\mathbf{V}\mathbf{V}^T\mathbf{z} = \mathbf{z}^T(\mathbf{U}\mathbf{U}^T + \mathbf{V}\mathbf{V}^T)\mathbf{z} = \mathbf{z}^T\mathbf{z} = \|\mathbf{z}\|^2. \quad (4.27)$$

To není nic jiného než Pythagorova věta.

Vzorec (4.26) počítá vzdálenost bodu od lineárního podprostoru $X^\perp = \text{null}(\mathbf{U}^T)$, tj. tento podprostor je tvořen řešeními homogenní soustavy $\mathbf{U}^T\mathbf{x} = \mathbf{0}$. Často potřebujeme spočítat vzdálenost bodu od afinního podprostoru. Jak to uděláme? Reprezentujme tento afinní podprostor, $A \subseteq \mathbb{R}^m$, množinou řešení lineární soustavy $\mathbf{U}^T\mathbf{x} = \mathbf{b}$ (viz Věta 3.13), tedy

$$A = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m \mid \mathbf{U}^T\mathbf{x} = \mathbf{b}\} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m \mid \mathbf{U}^T(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = \mathbf{0}\} = X^\perp + \mathbf{x}_0, \quad (4.28)$$

kde \mathbf{x}_0 je libovolný bod splňující $\mathbf{U}^T\mathbf{x}_0 = \mathbf{b}$. Vidíme, že vzdálenost bodu \mathbf{z} od afinního podprostoru A je rovna vzdálenosti bodu $\mathbf{z} - \mathbf{x}_0$ od lineárního podprostoru X^\perp , což je

$$\|\mathbf{U}^T(\mathbf{z} - \mathbf{x}_0)\| = \|\mathbf{U}^T\mathbf{z} - \mathbf{b}\|. \quad (4.29)$$

Speciálně, necht' náš afinní podprostor je nadrovina $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{a}^T\mathbf{x} = b\}$, kde předpokládáme $\mathbf{a} \neq \mathbf{0}$ (jinak by podprostor nebyl nadrovinou, tj. neměl by dimenzi $n - 1$). Jestliže $\|\mathbf{a}\| = 1$, vzdálenost bodu \mathbf{z} od nadroviny je rovna $|\mathbf{a}^T\mathbf{z} - b|$. Obecně je tato vzdálenost rovna $|\mathbf{a}^T\mathbf{z} - b|/\|\mathbf{a}\|$. Vidíme zde geometrický význam vektoru \mathbf{a} a čísla b : \mathbf{a} je normálový vektor nadroviny a $|b|/\|\mathbf{a}\|$ je vzdálenost nadroviny od počátku.

4.7 Cvičení

4.1. Máme vektory $\mathbf{x} = (1, 2, 3)$ a $\mathbf{y} = (-1, 0, 1)$. Spočítejte (a) délku vektoru \mathbf{x} , (b) vzdálenost bodů \mathbf{x} a \mathbf{y} , (c) úhel mezi vektory \mathbf{x} a \mathbf{y} .

4.2. Najděte bázi ortogonálního doplnku prostoru $\text{span}\{(0, 1, 1), (1, 2, 3)\}$.

- 4.3. Najděte ortonormální bázi podprostoru $\text{span}\{(1, 1, 1, -1), (2, -1, -1, 1), (-1, 2, 2, 1)\}$ pomocí QR rozkladu (použijte Matlab).
- 4.4. Dokažte, že součin ortogonálních matic je ortogonální matice.
- 4.5. Pro jaké n je matice $\text{diag}(-\mathbf{1}_n)$ (tedy diagonální matice se samými mínus jedničkami na diagonále) rotační?
- 4.6. Počet nezávislých parametrů (“stupňů volnosti”) ortogonální matice $n \times n$ se získá jako rozdíl počtu prvků matice (n^2) a počtu nezávislých (v našem případě různých) rovnic v podmínce $\mathbf{U}^T \mathbf{U} = \mathbf{I}$. Neformálně řečeno udává, kolika ‘knoflíky’ můžeme nezávisle ‘kroutit’ při rotaci v n -rozměrném prostoru. Jaké je toto číslo pro $n = 2, 3, 4$? Najděte vzorec pro obecné n .
- 4.7. Pokud $\|\mathbf{x}\| = \|\mathbf{y}\|$, dokažte, že $(\mathbf{x} + \mathbf{y}) \perp (\mathbf{x} - \mathbf{y})$. V prostoru \mathbb{R}^2 nakreslete vektory $\mathbf{x} + \mathbf{y}$ a $\mathbf{x} - \mathbf{y}$.
- 4.8. Máme vektory $\mathbf{x}_1 = (1, -1, 0, 2)$, $\mathbf{x}_2 = (1, 1, 1, 0)$, $\mathbf{x}_3 = (-1, -1, 2, 0)$.
- Ověřte, že vektory $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3$ jsou po dvojicích ortogonální.
 - Najděte libovolnou bázi podprostoru $\text{span}\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3\}^\perp$.
 - Najděte ortogonální projektor na podprostory $\text{span}\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3\}$ a $\text{span}\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3\}^\perp$.
- 4.9. Najděte dva ortogonální vektory \mathbf{x}, \mathbf{y} takové, že $\text{span}\{\mathbf{x}, \mathbf{y}\} = \text{span}\{(0, 1, 1), (1, 2, 3)\}$.
- 4.10. Spočtěte co nejjednodušším způsobem inverzi matice $\frac{1}{3} \begin{bmatrix} -1 & 2 & 2 \\ 2 & -1 & 2 \\ 2 & 2 & -1 \end{bmatrix}$. Je tato matice ortogonální projektor?
- 4.11. (★) Necht’ X, Y jsou podprostory \mathbb{R}^n . Definujme $X + Y = \{\mathbf{x} + \mathbf{y} \mid \mathbf{x} \in X, \mathbf{y} \in Y\}$. Dokažte:
- $X \subseteq Y \Rightarrow X^\perp \supseteq Y^\perp$.
 - $X + Y$ je generován sjednocením libovolné báze X a libovolné báze Y . Tedy je-li $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k\}$ báze X a $\{\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_l\}$ báze Y , pak $X + Y = \text{span}\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k, \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_l\}$.
 - $(X + Y)^\perp = X^\perp \cap Y^\perp$.
 - $(X \cap Y)^\perp = X^\perp + Y^\perp$
- 4.12. Jak byste levně spočítali absolutní hodnotu determinantu matice z jejího QR rozkladu?
- 4.13. Pro $\mathbf{U}^T \mathbf{U} = \mathbf{I}$ reprezentuje matice $\mathbf{H} = \mathbf{I} - 2\mathbf{U}\mathbf{U}^T$ zrcadlení (reflexi) vzhledem k podprostoru $X = (\text{rng } \mathbf{U})^\perp$, proto této matici budeme říkat *reflektor*.
- Odvoďte vzorec pro reflektor geometrickou úvahou, podobnou jako pro projektor.
 - Dokažte, že $\mathbf{H}^{-1} = \mathbf{H} = \mathbf{H}^T$ (srov. s (4.21)).
 - Co je $\mathbf{H}\mathbf{x}$ když $\mathbf{x} \in X$? Ukažte algebraicky a odůvodněte geometricky.
 - Co je $\mathbf{H}\mathbf{x}$ když $\mathbf{x} \perp X$? Ukažte algebraicky a odůvodněte geometricky.
- Poznamenejme, že známější je případ, kdy \mathbf{U} má jediný sloupec, tedy $\mathbf{H} = \mathbf{I} - 2\mathbf{u}\mathbf{u}^T$ kde $\mathbf{u}^T \mathbf{u} = 1$. Tato matice reprezentuje zrcadlení kolem nadroviny s normálovým vektorem \mathbf{u} a je známa jako *elementární reflektor* nebo *Householderova matice*.
- 4.14. (★) *RQ rozklad* rozloží matici $\mathbf{A} = \mathbf{R}\mathbf{Q}$, kde \mathbf{R} je horní trojúhelníková a \mathbf{Q} je ortogonální. Jak byste spočítali RQ rozklad z QR rozkladu?

- 4.15. Existuje isometrie $\mathbf{f}: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^4$ taková, že $\mathbf{f}(1, -1, 2) = (1, 2, -1, 1)$ a $\mathbf{f}(1, 1, 0) = (0, 1, -1, 0)$?
- 4.16. Dokažte: Jestliže sloupce matice \mathbf{U} tvoří ortonormální bázi nějakého podprostoru, pak sloupce matice $\mathbf{V} = \mathbf{UC}$ tvoří ortonormální bázi téhož podprostoru pro každou ortogonální matici \mathbf{C} .
- 4.17. Necht' $\mathbf{U}^T\mathbf{U} = \mathbf{I}$. Najděte co nejjednodušší vzorec pro
- vzdálenost bodu \mathbf{x} od podprostoru $\text{rng } \mathbf{U}$,
 - vzdálenost bodu \mathbf{x} od podprostoru $\text{null}(\mathbf{U}^T) = \{ \mathbf{x} \mid \mathbf{U}^T\mathbf{x} = \mathbf{0} \}$,
 - vzdálenost počátku $\mathbf{0}$ od afinního podprostoru $\{ \mathbf{x} \mid \mathbf{U}^T\mathbf{x} = \mathbf{b} \}$,
 - vzdálenost bodu \mathbf{x} od afinního podprostoru $\{ \mathbf{x} \mid \mathbf{U}^T\mathbf{x} = \mathbf{b} \}$.
- 4.18. Necht' $X, Y \subseteq \mathbb{R}^n$ jsou podprostory takové, že $X \subseteq Y$. Tvrdíme, že když vektor ortogonálně promítneme nejdříve na Y a potom na X , dostaneme stejný výsledek, jako když ho ortogonálně promítneme rovnou na X . Dokažte toto tvrzení algebraicky nebo ho vyvrát'ete.
- 4.19. Necht' $\mathbf{U}^T\mathbf{U} = \mathbf{I}$. Dokažte, že
- Prvky matice \mathbf{U} splňují $|u_{ij}| \leq 1$.
 - Pro každý řádek \mathbf{u}^T matice \mathbf{U} platí $\|\mathbf{u}\| \leq 1$.
- 4.20. Necht' \mathbf{P} je ortogonální projektor (na nějaký podprostor). Dokažte, že
- Prvky matice \mathbf{P} splňují $|p_{ij}| \leq 1$.
 - Diagonální prvky matice \mathbf{P} jsou nezáporné.
- 4.21. Obecnou *projekcí* se v lineární algebře rozumí každé lineární zobrazení $\mathbf{f}(\mathbf{z}) = \mathbf{Pz}$, které je idempotentní, tedy $\mathbf{f}(\mathbf{f}(\mathbf{z})) = \mathbf{f}(\mathbf{z})$ neboli $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}$. Projekce nemusí být ortogonální, může být šikmá – pak promítáme ve směru podprostoru $\text{null } \mathbf{P}$ na podprostor $\text{rng } \mathbf{P}$.
- Dokažte, že pro každý vektor \mathbf{z} platí $\mathbf{z} - \mathbf{Pz} \in \text{null } \mathbf{P}$.
 - Projekce je ortogonální, právě když $\mathbf{P}^T = \mathbf{P}$. Dokažte, že potom $(\text{rng } \mathbf{P})^\perp = \text{null } \mathbf{P}$.
- 4.22. Necht' \mathbf{A}, \mathbf{B} jsou libovolné matice splňující $\mathbf{AB} = \mathbf{I}$ (tedy \mathbf{A} je levá inverze \mathbf{B} a \mathbf{B} je pravá inverze \mathbf{A} , viz §2.4). Dokažte, že:
- $\mathbf{P} = \mathbf{BA}$ je (obecný) projektor dle Cvičení 4.21, tedy platí $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}$.
 - $\text{null } \mathbf{P} = \text{null } \mathbf{A}$ a $\text{rng } \mathbf{P} = \text{rng } \mathbf{B}$.
 - Co jsou matice \mathbf{A}, \mathbf{B} v případě ortogonální projekce?
- 4.23. Pro jaké vektory \mathbf{x}, \mathbf{y} platí trojúhelníková nerovnost $\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|$ s rovností?
- 4.24. Dokažte Pythagorovu větu: $\mathbf{x} \perp \mathbf{y} \Rightarrow \|\mathbf{x} + \mathbf{y}\|^2 = \|\mathbf{x}\|^2 + \|\mathbf{y}\|^2$. Dokažte její zobecnění: jsou-li vektory $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k$ po dvojicích ortogonální, pak $\|\mathbf{x}_1 + \dots + \mathbf{x}_k\|^2 = \|\mathbf{x}_1\|^2 + \dots + \|\mathbf{x}_k\|^2$.
- 4.25. Zobrazení $\mathbf{F}: \mathbb{R}^{n \times n} \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}$ je dané vzorcem $\mathbf{F}(\mathbf{A}) = (\mathbf{I} - \mathbf{A})(\mathbf{I} + \mathbf{A})^{-1}$. Předpokládejte, že \mathbf{A} je taková, že $\mathbf{I} + \mathbf{A}$ je regulární. Dokažte, že:
- Pro každou \mathbf{A} je $(\mathbf{I} - \mathbf{A})(\mathbf{I} + \mathbf{A}) = (\mathbf{I} + \mathbf{A})(\mathbf{I} - \mathbf{A})$.
 - Pro každou \mathbf{A} je $(\mathbf{I} - \mathbf{A})(\mathbf{I} + \mathbf{A})^{-1} = (\mathbf{I} + \mathbf{A})^{-1}(\mathbf{I} - \mathbf{A})$.
 - Pro každou antisymetrickou \mathbf{A} je $\mathbf{F}(\mathbf{A})$ ortogonální.
 - Pro každou ortogonální \mathbf{A} je $\mathbf{F}(\mathbf{A})$ antisymetrická.
 - Zobrazení \mathbf{F} je inverzí sama sebe, tedy $\mathbf{F}(\mathbf{F}(\mathbf{A})) = \mathbf{A}$ pro každé \mathbf{A} .

Před důkazy na papíře se přesvědčte v Matlabu, že tvrzení platí pro náhodné matice.

Nápověda a řešení

- 4.2. Např. $(1, 1, -1)$
- 4.3. Báze je $\{(1, 1, 1, -1)/2, (3, -1, -1, 1)/\sqrt{12}, (0, 1, 1, 2)/\sqrt{6}\}$
- 4.5. Musí být $\det \text{diag}(-\mathbf{1}_n) = (-1)^n > 0$, tedy pro sudá n .
- 4.6. Podmínka $\mathbf{U}^T \mathbf{U} = \mathbf{I}$ je soustava rovnic $\mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_j = \delta_{ij}$ pro $i, j = 1, \dots, n$, kde $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n$ jsou sloupce matice \mathbf{U} . Tato soustava obsahuje jen $\binom{n}{2} + n$ různých rovnic (napište si ji např. pro $n = 4$). Tedy počet stupňů volnosti je $n^2 - \binom{n}{2} - n = \binom{n}{2} = n(n-1)/2$.
- 4.9. Zvolíme $\mathbf{y} = (1, 2, 3) - r\mathbf{x}$, kde $r \in \mathbb{R}$ spočítáme z $\mathbf{x}^T \mathbf{y} = 0$. Tedy $r = \frac{5}{2}$ a $\mathbf{y} = (1, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$. (V duchu Gram-Smidtovy ortogonalizace, jestli ji znáte.)
- 4.10. Není matice náhodou ortogonální? Ort. projektor to není, protože nesplňuje $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}$.
- 4.11.c) Plyne z (b).
- 4.11.d) Plyne z (c) s použitím $(X^\perp)^\perp = X$.
- 4.13.c) Je $\mathbf{x} \in X = (\text{rng } \mathbf{U})^\perp = \text{null}(\mathbf{U}^T)$, tedy $\mathbf{U}^T \mathbf{x} = \mathbf{0}$, tedy $\mathbf{H}\mathbf{x} = \mathbf{x}$. Geometricky to znamená, že když vektor leží v rovině zrcadlení, tak ho zrcadlení nezmění.
- 4.13.d) $\mathbf{x} \perp X$ je to samé jako $\mathbf{x} \in X^\perp = ((\text{rng } \mathbf{U})^\perp)^\perp = \text{rng } \mathbf{U}$, tedy $\mathbf{x} = \mathbf{U}\boldsymbol{\alpha}$ pro nějaké $\boldsymbol{\alpha}$. Tedy $\mathbf{U}\mathbf{U}^T \mathbf{x} = \mathbf{U}\mathbf{U}^T \mathbf{U}\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{U}\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{x}$ (taky to lze vidět z (4.22a), protože $\mathbf{U}\mathbf{U}^T$ je projektor na X). Tedy $\mathbf{H}\mathbf{x} = -\mathbf{x}$. Geometricky: zrcadlení vektoru kolmého k rovině zrcadlení vektoru obrátí orientaci.
- 4.15. Ne, protože isometrie zachovává eukleidovskou normu, ale $\|(1, -1, 2)\| \neq \|(1, 2, -1)\|$.
- 4.16. Víme, že $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ a $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, kde $m \geq n$, a $\mathbf{U}^T \mathbf{U} = \mathbf{I}$, $\mathbf{C}^T \mathbf{C} = \mathbf{I} = \mathbf{C}\mathbf{C}^T$. Sloupce matic \mathbf{U} a \mathbf{V} tvoří báze stejného podprostoru, neboť dle Věty 3.6 je $\text{rng } \mathbf{U} = \text{rng } \mathbf{V}$ (\mathbf{C} je matice přechodu k jiné bázi). Sloupce matice \mathbf{V} jsou ortonormální, neboť $\mathbf{V}^T \mathbf{V} = \mathbf{C}^T \mathbf{U}^T \mathbf{U} \mathbf{C} = \mathbf{C}^T \mathbf{C} = \mathbf{I}$.
- 4.17.a) $\|(\mathbf{I} - \mathbf{U}\mathbf{U}^T)\mathbf{x}\|$, víc to už zjednodušit nejde.
- 4.17.b) $\|\mathbf{U}^T \mathbf{x}\|$, viz §4.6.2.
- 4.17.c) $\|\mathbf{b}\|$, viz §4.6.2.
- 4.17.d) $\|\mathbf{U}^T \mathbf{x} - \mathbf{b}\|$, viz §4.6.2.
- 4.18. Je pravdivé. Důkaz: Necht' $[\mathbf{U} \ \mathbf{V}]$ je matice s ortonormálními sloupci taková, že $X = \text{rng } \mathbf{U}$ a $Y = \text{rng } [\mathbf{U} \ \mathbf{V}]$. Z toho plyne $X \subseteq Y$. Všimněte si (použijeme později), že $\mathbf{U}^T \mathbf{U} = \mathbf{I}$ a $\mathbf{U}^T \mathbf{V} = \mathbf{0}$. Označme $\mathbf{P} = \mathbf{U}\mathbf{U}^T$ projektor na X a $\mathbf{Q} = [\mathbf{U} \ \mathbf{V}] [\mathbf{U} \ \mathbf{V}]^T$ projektor na Y . Máme dokázat, že pro každé \mathbf{z} platí $\mathbf{P}\mathbf{Q}\mathbf{z} = \mathbf{P}\mathbf{z}$, neboli $\mathbf{P}\mathbf{Q} = \mathbf{P}$. Platí $\mathbf{P}\mathbf{Q} = \mathbf{U}\mathbf{U}^T [\mathbf{U} \ \mathbf{V}] [\mathbf{U} \ \mathbf{V}]^T = \mathbf{U} [\mathbf{U}^T \mathbf{U} \ \mathbf{U}^T \mathbf{V}] [\mathbf{U} \ \mathbf{V}]^T = \mathbf{U} [\mathbf{I} \ \mathbf{0}] [\mathbf{U} \ \mathbf{V}]^T = \mathbf{U}\mathbf{U}^T = \mathbf{P}$.
- 4.19.b) Doplňme matici \mathbf{U} na ortogonální matici $\mathbf{W} = [\mathbf{U} \ \mathbf{V}]$. Řádek této matice je $\mathbf{w}^T = [\mathbf{u}^T \ \mathbf{v}^T]$. Z ortogonality \mathbf{W} je však $\mathbf{w}^T \mathbf{w} = \mathbf{u}^T \mathbf{u} + \mathbf{v}^T \mathbf{v} = 1$. Z toho $\mathbf{u}^T \mathbf{u} \leq 1$.
- 4.20.a) Z $\mathbf{P} = \mathbf{U}\mathbf{U}^T$ máme $p_{ij} = \mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_j$, kde \mathbf{u}_i je i -tý řádek \mathbf{U} . Protože $\|\mathbf{u}_i\| \leq 1$, musí být $|\mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_j| \leq 1$.
- 4.20.b) Máme $p_{ii} = \mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_i \geq 0$
- 4.21.a) $\mathbf{z} - \mathbf{P}\mathbf{z} \in \text{null } \mathbf{P}$ znamená $\mathbf{P}(\mathbf{z} - \mathbf{P}\mathbf{z}) = \mathbf{P}(\mathbf{I} - \mathbf{P})\mathbf{z} = \mathbf{0}$. Ale $\mathbf{P}(\mathbf{I} - \mathbf{P}) = \mathbf{P} - \mathbf{P}^2 = \mathbf{P} - \mathbf{P} = \mathbf{0}$.
- 4.21.b) Dle (4.8a) je $(\text{rng } \mathbf{P})^\perp = \text{null}(\mathbf{P}^T) = \text{null } \mathbf{P}$. Srov. s Cvičením 5.16.
- 4.22.a) $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}\mathbf{P} = \mathbf{B}\mathbf{A}\mathbf{B}\mathbf{A} = \mathbf{B}\mathbf{A} = \mathbf{P}$
- 4.22.b) \mathbf{B} má levou inverzi a tedy dle Věty 3.7 má l.n. sloupce. Dle Věty 3.8 tedy $\text{null } \mathbf{P} = \text{null}(\mathbf{B}\mathbf{A}) = \text{null } \mathbf{A}$. $\text{rng } \mathbf{P} = \text{rng } \mathbf{B}$ dokážeme podobně z Vět 3.5 a 3.6.
- 4.22.c) $\mathbf{A} = \mathbf{U}$ a $\mathbf{B} = \mathbf{U}^T$, kde \mathbf{U} má ortonormální sloupce.

Kapitola 5

Nehomogenní lineární soustavy

Mějme soustavu m lineárních rovnic o n neznámých

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \tag{5.1}$$

kde $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$. Soustava má (aspoň jedno) řešení, právě když $\mathbf{b} \in \text{rng } \mathbf{A}$ (tedy \mathbf{b} je lineární kombinací sloupců \mathbf{A}), což lze psát také jako $\text{rank}[\mathbf{A} \ \mathbf{b}] = \text{rank } \mathbf{A}$ (Frobeniova věta). Pokud je množina řešení soustavy neprázdná, je to afinní podprostor \mathbb{R}^n (dle Věty 3.13).

V této kapitole se zaměříme pouze na nehomogenní soustavy (tj. $\mathbf{b} \neq \mathbf{0}$). Rozlišme tři případy:

- Soustava nemá řešení. To nastane právě tehdy, když $\mathbf{b} \notin \text{rng } \mathbf{A}$. Taková soustava se nazývá **přeurčená**. V tom případě můžeme chtít řešit soustavu přibližně, což je tématem §5.1.
- Soustava má právě jedno řešení. To nastane právě tehdy, když $\mathbf{b} \in \text{rng } \mathbf{A}$ a matice \mathbf{A} má lineárně nezávislé sloupce (tedy její nulový prostor je triviální).
- Soustava má nekonečně mnoho řešení. To nastane právě tehdy, když $\mathbf{b} \in \text{rng } \mathbf{A}$ a matice \mathbf{A} má lineárně závislé sloupce. Taková soustava se nazývá **nedourčená**. V tom případě můžeme chtít z množiny řešení vybrat jediné, čímž se budeme zabývat v §5.2.

5.1 Přibližné řešení ve smyslu nejmenších čtverců

Pokud soustava (5.1) nemá řešení, řešme ji přibližně (což můžeme značit $\mathbf{Ax} \approx \mathbf{b}$). Hledejme takové \mathbf{x} , aby eukleidovská norma vektoru $\mathbf{r} = \mathbf{b} - \mathbf{Ax}$ zbytků (neboli *reziduí*) byla co nejmenší. Úloha se nezmění (proč?), když místo eukleidovské normy budeme minimalizovat její čtverec $\|\mathbf{r}\|^2 = \mathbf{r}^T \mathbf{r} = r_1^2 + \dots + r_m^2$. Tedy řešíme úlohu

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|^2. \tag{5.2}$$

Protože minimalizujeme součet čtverců reziduí, mluvíme o přibližném řešení soustavy **ve smyslu nejmenších čtverců** (*least squares solution*)¹.

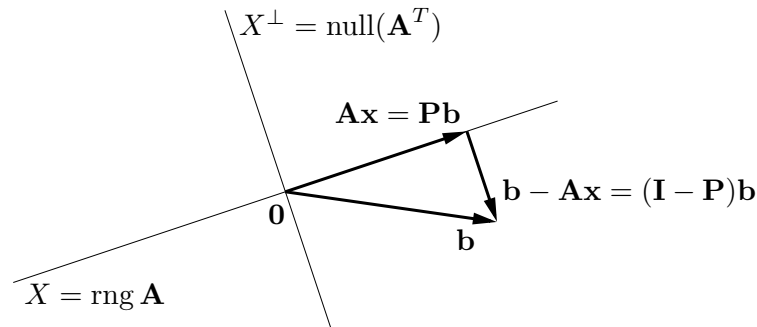
Příklad 5.1. Soustava třech rovnic o dvou neznámých

$$\begin{aligned} x + 2y &= 6 \\ -x + y &= 3 \\ x + y &= 4 \end{aligned}$$

¹Přesně by se mělo říkat *least sum of squares*, protože je i metoda založená na *least median of squares*.

je přeúčřená. Její přibližné řešení ve smyslu nejmenších čtverců znamená najít taková čísla x, y , která minimalizují číslo $(x + 2y - 6)^2 + (-x + y - 3)^2 + (x + y - 4)^2$. \square

Úlohu (5.2) vyřešíme následující úvahou, patrnou z obrázku:



Pokud vzdálenost $\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|$ bodů \mathbf{Ax} a \mathbf{b} má být minimální, musí být vektor $\mathbf{b} - \mathbf{Ax}$ kolmý na podprostor $\text{rng } \mathbf{A}$. To je intuitivně jasné a přesně jsme to dokázali ve Větě 4.8. To ale znamená (viz (4.4)), že vektor $\mathbf{b} - \mathbf{Ax}$ musí být kolmý na každý sloupec matice \mathbf{A} . Tuto podmínku lze zapsat jako $\mathbf{A}^T(\mathbf{Ax} - \mathbf{b}) = \mathbf{0}$, tedy

$$\mathbf{A}^T \mathbf{Ax} = \mathbf{A}^T \mathbf{b}. \quad (5.3)$$

Tedy máme tento výsledek: \mathbf{x} je optimální řešení optimalizační úlohy (5.2) právě tehdy, když \mathbf{x} je řešením soustavy (5.3). Soustava (5.3) se nazývá **normální rovnice** (protože normála = kolmice). Je to soustava n rovnic o n neznámých. Abychom mohli zkoumat její řešitelnost, uvedeme následující větu.

Věta 5.1. Pro každou matici \mathbf{A} platí²

$$\text{rng}(\mathbf{A}^T \mathbf{A}) = \text{rng}(\mathbf{A}^T), \quad (5.4a)$$

$$\text{null}(\mathbf{A}^T \mathbf{A}) = \text{null } \mathbf{A}. \quad (5.4b)$$

Důkaz. Dokažme nejprve rovnost (5.4b), tj. $\mathbf{A}^T \mathbf{Ax} = \mathbf{0} \Leftrightarrow \mathbf{Ax} = \mathbf{0}$. Implikace \Leftarrow je jasná, vynásobením $\mathbf{Ax} = \mathbf{0}$ zleva maticí \mathbf{A}^T . Implikace \Rightarrow se dokáže takto:

$$\mathbf{A}^T \mathbf{Ax} = \mathbf{0} \implies \mathbf{x}^T \mathbf{A}^T \mathbf{Ax} = (\mathbf{Ax})^T (\mathbf{Ax}) = 0 \implies \mathbf{Ax} = \mathbf{0},$$

neboť pro libovolný vektor \mathbf{y} platí $\mathbf{y}^T \mathbf{y} = 0 \Rightarrow \mathbf{y} = \mathbf{0}$ (proč?).

Dokažme (5.4a). Z definice (3.10) je jasné (viz Věta 3.6), že $\text{rng}(\mathbf{A}^T \mathbf{A}) \subseteq \text{rng}(\mathbf{A}^T)$. Nyní použijeme Větu 3.11 jednou na matici \mathbf{A} a jednou na matici $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$:

$$\dim \text{rng } \mathbf{A} + \dim \text{null } \mathbf{A} = n = \dim \text{rng}(\mathbf{A}^T \mathbf{A}) + \dim \text{null}(\mathbf{A}^T \mathbf{A}).$$

Díky (5.4b) z toho máme $\dim \text{rng}(\mathbf{A}^T \mathbf{A}) = \dim \text{rng } \mathbf{A} = \dim \text{rng}(\mathbf{A}^T)$, kde druhá rovnost je (2.2). Ale pokud je podprostor podmnožinou jiného podprostoru a oba mají stejnou dimenzi, jsou stejné (dle Věty 3.3). \square

²Maticе tvaru $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ či $\mathbf{A} \mathbf{A}^T$ se objevují v různých situacích. Označme jako $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n \in \mathbb{R}^m$ sloupce matice \mathbf{A} . Matici $\mathbf{A}^T \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ se říká *Gramova matice* vektorů $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n$ a její prvky jsou skalární součiny $\mathbf{a}_i^T \mathbf{a}_j$ (viz (2.8)). Matici $\mathbf{A} \mathbf{A}^T \in \mathbb{R}^{m \times m}$ lze zase vidět (až na skalární násobek) jako empirickou kovarianční matici n pozorování $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n$ m -tice náhodných proměnných.

Soustava (5.3) má řešení, právě když $\mathbf{A}^T \mathbf{b} \in \text{rng}(\mathbf{A}^T \mathbf{A})$. Ale z (5.4a) je $\text{rng}(\mathbf{A}^T) = \text{rng}(\mathbf{A}^T \mathbf{A})$. Protože $\mathbf{A}^T \mathbf{b} \in \text{rng}(\mathbf{A}^T)$ pro libovolné \mathbf{A}, \mathbf{b} , vidíme, že soustava má *vždy* řešení. Je zajímavé, že pro důkaz tohoto tvrzení jsme potřebovali rovnost (5.4a), jejíž důkaz není snadný (používá Větu 3.11). Zdá-li se vám, že musí existovat elementárnější důkaz, schválně ho zkuste najít!

Zkombinujeme-li (5.4a) (použité jednou na matici \mathbf{A} a jednou na matici \mathbf{A}^T) a (2.2), máme

$$\text{rank}(\mathbf{A}\mathbf{A}^T) = \text{rank} \mathbf{A} = \text{rank}(\mathbf{A}^T) = \text{rank}(\mathbf{A}^T \mathbf{A}). \quad (5.5)$$

Dle (5.5) je matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ regulární, právě když \mathbf{A} má lineárně nezávislé sloupce. V tom případě můžeme soustavu (5.3) řešit pomocí inverze. Řešením je vektor $\mathbf{x} = \mathbf{A}^+ \mathbf{b}$, kde

$$\mathbf{A}^+ = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T. \quad (5.6)$$

Matice (5.6) se nazývá **pseudoinverze** matice \mathbf{A} s lineárně nezávislými sloupci. Je to jedna z levých inverzí matice \mathbf{A} , neboť $\mathbf{A}^+ \mathbf{A} = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{I}$.

Má-li matice \mathbf{A} lineárně závislé sloupce, vzorec (5.6) nelze použít (zkrátka proto, že matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ nemá inverzi). V tom případě soustava (5.3), a tedy i úloha (5.2), mají nekonečně mnoho (afinní podprostor) řešení (pozor, to je něco jiného, než že soustava (5.1) má nekonečně mnoho řešení!).

5.1.1 Ortogonální projekce na podprostor daný obecnou bází

Pokud \mathbf{x} je řešení normální rovnice, vektor $\mathbf{A}\mathbf{x}$ je ortogonální projekcí vektoru \mathbf{b} na podprostor $X = \text{rng} \mathbf{A}$ (viz obrázek výše). Pokud \mathbf{A} má lineárně nezávislé sloupce (tj. tyto sloupce tvoří bázi podprostoru X), z (5.6) máme $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{P}\mathbf{b}$, kde

$$\mathbf{P} = \mathbf{A}\mathbf{A}^+ = \mathbf{A}(\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T. \quad (5.7)$$

Toto je tedy projektor na podprostor X s bází (ne nutně ortonormální) tvořenou sloupci matice \mathbf{A} . Zdůrazněme, že projektor (5.7) vyjde stejný pro libovolnou bázi podprostoru X (viz Cvičení 5.11). Pokud je báze ortonormální, je $\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{I}$ a (5.7) se redukuje na (4.20).

Projekce na X^\perp má přirozenou úlohu v problému (5.2): hodnota jeho minima je $\|\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}\|^2 = \|\mathbf{b} - \mathbf{P}\mathbf{b}\|^2 = \|(\mathbf{I} - \mathbf{P})\mathbf{b}\|^2$.

5.1.2 Řešení pomocí QR rozkladu

I když má matice \mathbf{A} lineárně nezávislé sloupce, řešení pomocí pseudoinverze (5.6) nemusí být vhodné pro numerické výpočty, kdy nezbytně používáme aritmetiku s konečnou přesností.

Příklad 5.2. Řešme soustavu $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ pro

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 3 & 6 \\ 1 & 2.01 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 9 \\ 3.01 \end{bmatrix}.$$

Matice \mathbf{A} je regulární. Dejme tomu, že používáme aritmetiku s pohyblivou řádovou čárkou s přesností na 3 platné cifry. Gaussova eliminace najde přesné řešení soustavy $\mathbf{x} = (1, 1)$. Pokud ovšem v této aritmetice zformulujeme normální rovnici $\mathbf{A}^T \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{A}^T \mathbf{b}$, dostaneme

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 10 & 20 \\ 20 & 40 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A}^T \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 30 \\ 60.1 \end{bmatrix}.$$

I když v přesné aritmetice je matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ regulární, v naší přibližné aritmetice došlo v součinu $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ k zaokrouhlení a výsledná matice je singulární. Tedy soustava $\mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{A}^T \mathbf{b}$ nemá řešení. \square

Numericky vhodnější způsob je řešit normální rovnici *bez* explicitního výpočtu součinu $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$. To lze udělat pomocí redukovaného QR rozkladu $\mathbf{A} = \mathbf{Q} \mathbf{R}$. Po dosazení do normální rovnice máme $\mathbf{R}^T \mathbf{Q}^T \mathbf{Q} \mathbf{R} \mathbf{x} = \mathbf{R}^T \mathbf{Q}^T \mathbf{b}$ neboli $\mathbf{R}^T \mathbf{R} \mathbf{x} = \mathbf{R}^T \mathbf{Q}^T \mathbf{b}$. Jestliže \mathbf{A} má lineárně nezávislé sloupce, matice \mathbf{R} je regulární. Vynásobením maticí \mathbf{R}^{-T} zleva (což je tedy ekvivalentní úprava) máme

$$\mathbf{R} \mathbf{x} = \mathbf{Q}^T \mathbf{b}. \quad (5.8)$$

Zdůraněme, že pokud \mathbf{A} není čtvercová, pak soustava (5.8) není ekvivalentní původní soustavě $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$.

Jestliže sloupce \mathbf{A} jsou lineárně závislé, postup je trochu složitější, ale také stojí na QR rozkladu. V Matlabu je řešení nehomogenní lineární soustavy implementováno v operátoru `\` (*zpětné lomítko*). Pokud je soustava přeúřčená, výsledkem je přibližné řešení ve smyslu nejmenších čtverců, přičemž použitý algoritmus používá QR rozklad. Pochopte všechny funkce operátorů *lomítko* a *zpětné lomítko* pomocí studia příkazů `help mrdivide` a `help mldivide`!

5.1.3 Lineární regrese

Regrese je modelování funkční závislosti nějaké proměnné na jiné proměnné. Modelujeme závislost proměnné $y \in \mathbb{R}$ na proměnné $x \in X$ (kde X je libovolná množina) regresní funkcí

$$y = f(x, \boldsymbol{\theta}),$$

která je známa až na parametry $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^n$. Je dán soubor dvojic (x_i, y_i) , $i = 1, \dots, m$, kde měření $y_i \in \mathbb{R}$ jsou zatížena chybou. Úkolem je najít parametry $\boldsymbol{\theta}$, aby $y_i \approx f(x_i, \boldsymbol{\theta})$ pro všechna i . Minimalizujeme součet čtverců reziduí, tedy řešíme úlohu

$$\min_{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^n} \sum_{i=1}^m (y_i - f(x_i, \boldsymbol{\theta}))^2. \quad (5.9)$$

Často je regresní funkce taková, že pro každé x je lineární funkcí parametrů $\boldsymbol{\theta}$. V tom případě mluvíme o **lineární regresi**. Taková funkce jde vždy napsat jako lineární kombinace

$$f(x, \boldsymbol{\theta}) = \theta_1 \varphi_1(x) + \dots + \theta_n \varphi_n(x) = \boldsymbol{\varphi}(x)^T \boldsymbol{\theta} \quad (5.10)$$

nějakých daných funkcí³ $\varphi_j: X \rightarrow \mathbb{R}$. Pak

$$\sum_{i=1}^m (y_i - f(x_i, \boldsymbol{\theta}))^2 = \|\mathbf{y} - \mathbf{A} \boldsymbol{\theta}\|^2,$$

kde $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_m)$ a prvky matice $\mathbf{A} = [a_{ij}] \in \mathbb{R}^{m \times n}$ jsou $a_{ij} = \varphi_j(x_i)$ (odvod'te!). Tedy vyjádřili jsme úlohu (5.9) ve tvaru (5.2).

Příklad 5.3. Nejjednodušší případ je pro $n = 1$ a konstantní funkci $\varphi_i(x) = 1$. Funkce (5.10) je tedy $f(x, \theta) = \theta$. Úloha (5.9) zní $\min_{\theta \in \mathbb{R}} \sum_i (y_i - \theta)^2$. Snadno spočítáme (udělejte!), že řešením je aritmetický průměr $\theta = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m y_i$ čísel y_1, \dots, y_m . \square

³Funkce φ_j se často nazývají *bázové funkce* (pokud jsou ovšem lineárně nezávislé).

Příklad 5.4. *Proložení bodů polynomem*⁴. Necht' $X = \mathbb{R}$ a $\varphi_j(x) = x^{j-1}$. Pak regresní funkce

$$f(x, \boldsymbol{\theta}) = \theta_1 + \theta_2 x + \theta_3 x^2 + \cdots + \theta_n x^{n-1}$$

je polynom stupně $n - 1$ proměnné x . Matice

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^{n-1} \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \cdots & x_2^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_m & x_m^2 & \cdots & x_m^{n-1} \end{bmatrix}$$

je známá jako *Vandermondova matice*.

Tento případ jde snadno zobecnit na polynomy více proměnných: máme $T = \mathbb{R}^d$ a bázové funkce jsou monomy proměnných x_1, \dots, x_d (viz §6) až do nějakého stupně. \square

5.1.4 Statistické odůvodnění kritéria nejmenších čtverců

Možná se ptáte, proč se má nalezení přibližného řešení přeuročené soustavy formulovat zrovna jako (5.2). Uvedeme statistický důvod, odkud se kritérium nejmenšího součtu čtverců vzalo.

Odhadujme skryté parametry \mathbf{x} nějakého systému z měření \mathbf{b} na systému. Budiž vázány známou lineární závislostí $\mathbf{b} = \mathbf{A}\mathbf{x}$. Měření jsou zatížena chybami, které jsou způsobeny šumem senzorů, nepřesnostmi měření, nedokonalou znalostí modelu, apod. Tedy

$$\mathbf{b} = \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{r}, \tag{5.11}$$

kde $\mathbf{r} = (r_1, \dots, r_m)$ jsou náhodné proměnné modelující chyby měření $\mathbf{b} = (b_1, \dots, b_m)$. Metoda nejmenších čtverců říká, že máme minimalizovat $\|\mathbf{r}\|_2^2 = \sum_{i=1}^m r_i^2$, ale neříká proč.

Důvod odvodíme statistickou úvahou. Metoda činí dva předpoklady:

- Náhodné proměnné r_i mají normální (neboli Gaussovo) rozdělení s nulovou střední hodnotou a směrodatnou odchylkou σ , s hustotou pravděpodobnosti

$$p(r_i) = c e^{-r_i^2/(2\sigma^2)},$$

kde $c = (\sigma\sqrt{2\pi})^{-1}$ je normalizační konstanta.

- Náhodné proměnné r_1, \dots, r_m jsou na sobě nezávislé. Tedy sdružená hustota pravděpodobnosti je rovna součinu

$$p(\mathbf{r}) = p(r_1, \dots, r_m) = \prod_{i=1}^m p(r_i) = \prod_{i=1}^m c e^{-r_i^2/(2\sigma^2)}. \tag{5.12}$$

Dále použijeme *princip maxima věrohodnosti*. Ten říká, že parametry \mathbf{x} se mají najít tak, aby $p(\mathbf{r}) = p(\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x})$ bylo maximální. Je pohodlnější minimalizovat záporný logaritmus

$$-\log p(r_1, \dots, r_m) = -\sum_{i=1}^m \log p(r_i) = \sum_{i=1}^m \left(\frac{r_i^2}{2\sigma^2} - \log c \right).$$

Jelikož σ je konstanta, je to totéž jako minimalizovat $\sum_i r_i^2$.

⁴Nedejte se zmást tím, že polynom není lineární funkce a přesto jde o lineární regresi. Důležité je, že regresní funkce (5.10) je lineární v parametrech $\boldsymbol{\theta}$.

5.1.5 Vícekriteriální nejmenší čtverce, regularizace

V některých úlohách se hodí minimalizovat více kritérií tvaru $\|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|$ ‘současně’. K tomu se dá přistoupit tak, že minimalizujeme (nezáporně) vážený součet kritérií⁵, tedy funkci⁶

$$\mu_1 \|\mathbf{A}_1 \mathbf{x} - \mathbf{b}_1\|^2 + \cdots + \mu_k \|\mathbf{A}_k \mathbf{x} - \mathbf{b}_k\|^2 \quad (5.13)$$

kde $\mu_i \geq 0$, $\mathbf{A}_i \in \mathbb{R}^{m_i \times n}$ a $\mathbf{b}_i \in \mathbb{R}^{m_i}$. Minimalizace této funkce není nic nového pod sluncem, protože se dá převést na tvar (5.2). Opravdu, výraz (5.13) je roven (viz Cvičení 5.18)

$$\left\| \begin{bmatrix} \sqrt{\mu_1}(\mathbf{A}_1 \mathbf{x} - \mathbf{b}_1) \\ \vdots \\ \sqrt{\mu_k}(\mathbf{A}_k \mathbf{x} - \mathbf{b}_k) \end{bmatrix} \right\|^2 = \left\| \begin{bmatrix} \sqrt{\mu_1} \mathbf{A}_1 \\ \vdots \\ \sqrt{\mu_k} \mathbf{A}_k \end{bmatrix} \mathbf{x} - \begin{bmatrix} \sqrt{\mu_1} \mathbf{b}_1 \\ \vdots \\ \sqrt{\mu_k} \mathbf{b}_k \end{bmatrix} \right\|^2 = \|\mathbf{A}' \mathbf{x} - \mathbf{b}'\|^2, \quad (5.14)$$

kde $\mathbf{A}' \in \mathbb{R}^{m' \times n}$ a $\mathbf{b}' \in \mathbb{R}^{m'}$ kde $m' = m_1 + \cdots + m_k$. Jestliže jsou sloupce matice \mathbf{A}' lineárně nezávislé, optimální \mathbf{x} je rovno (ověřte roznásobením blokových matic!)

$$\mathbf{x} = (\mathbf{A}'^T \mathbf{A}')^{-1} \mathbf{A}'^T \mathbf{b}' = (\mu_1 \mathbf{A}_1^T \mathbf{A}_1 + \cdots + \mu_k \mathbf{A}_k^T \mathbf{A}_k)^{-1} (\mu_1 \mathbf{A}_1^T \mathbf{b}_1 + \cdots + \mu_k \mathbf{A}_k^T \mathbf{b}_k). \quad (5.15)$$

Speciálně, někdy chceme přibližně řešit soustavu $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ a zároveň chceme, aby norma řešení \mathbf{x} nebyla moc velká. To lze formulovat jako

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} (\|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2 + \mu \|\mathbf{x}\|^2). \quad (5.16)$$

pro zvolenou váhu $\mu > 0$. Přidání členu $\mu \|\mathbf{x}\|^2$ se říká (Tichonovova) **regularizace** úlohy (5.2). Dosazením do vzorečku (5.15) ukážeme (proved'te!), že optimální řešení je rovno $\mathbf{x} = \mathbf{A}_\mu^+ \mathbf{b}$ kde

$$\mathbf{A}_\mu^+ = (\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \mu \mathbf{I})^{-1} \mathbf{A}^T \quad (5.17)$$

je ‘regularizovaná pseudoinverze’⁷ matice \mathbf{A} . Důležité je, že matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \mu \mathbf{I}$ regulární pro každé $\mu > 0$ a $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ (viz Cvičení 5.19), tedy \mathbf{A}_μ^+ je vždy definována. Viz také Cvičení 5.20.

5.2 Řešení s nejmenší normou

Předpokládejme nyní, že soustava (5.1) je nedourčená, neboli má nekonečně mnoho řešení. Je často užitečné z této množiny řešení vybrat jediné podle nějakého kritéria. Přirozeným kritériem je minimalizovat eukleidovskou normu (tedy vzdálenost od počátku) řešení, což vede na úlohu

$$\min \{ \|\mathbf{x}\|^2 \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \}. \quad (5.18)$$

Místo normy $\|\mathbf{x}\|$ opět minimalizujeme její čtverec. Tato úloha je známa jako řešení nehomogenní lineární soustavy **s nejmenší normou** (*least norm solution*). Podotkneme, že někdy je vhodné použít jiná kritéria než nejmenší eukleidovskou normu, viz např. Cvičení ??.

⁵Minimalizací více kritérií současně se zabývá obor *vícekriteriální optimalizace* (*multiobjective optimization*).

⁶Matematicky elegantnější by samozřejmě bylo ‘schovat’ skaláry μ_i do matic \mathbf{A}_i a vektorů \mathbf{b}_i a tedy je tam nepsat. Odvození minima funkce (5.13) by pak bylo kratší.

⁷Symbol \mathbf{A}_μ^+ zde neoznačuje pseudoinverzi nějaké matice \mathbf{A}_μ , taková matice \mathbf{A}_μ totiž neexistuje.

Příklad 5.5. Soustava dvou rovnic o třech neznámých

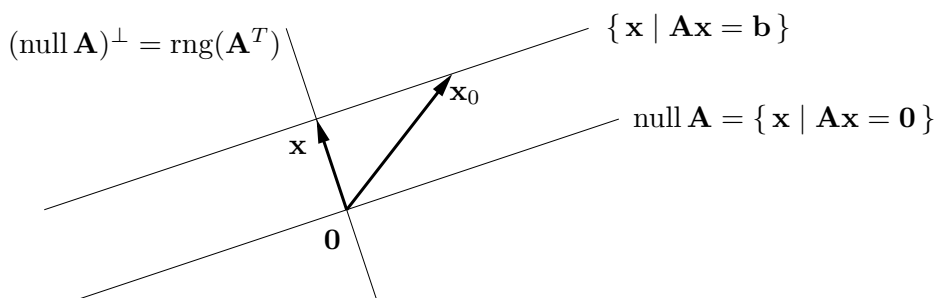
$$\begin{aligned}x + 2y + z &= 1 \\ -x + y + 2z &= 2\end{aligned}$$

je nedourčená, tj. má nekonečně mnoho řešení. Její řešení s nejmenší normou je takové řešení, které minimalizuje číslo $x^2 + y^2 + z^2$. \square

Množinu řešení soustavy (5.1) lze psát (viz důkaz Věty 3.13) jako

$$\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}\} = \text{null } \mathbf{A} + \mathbf{x}_0, \quad (5.19)$$

kde \mathbf{x}_0 je libovolné (partikulární) řešení soustavy, tedy $\mathbf{A}\mathbf{x}_0 = \mathbf{b}$. Množina (5.19) je afinní podprostor \mathbb{R}^n , je to lineární podprostor $\text{null } \mathbf{A}$ posunutý o \mathbf{x}_0 . Viz obrázek:



Vektory \mathbf{x} a \mathbf{x}_0 jsou dvě různá řešení soustavy, ale pouze \mathbf{x} má nejmenší normu. Řešení \mathbf{x} má nejmenší normu právě tehdy, když $\mathbf{x} \perp \text{null } \mathbf{A}$, neboli $\mathbf{x} \in (\text{null } \mathbf{A})^\perp = \text{rng}(\mathbf{A}^T)$, kde poslední rovnost je (4.8b). Neboli musí existovat vektor $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$ tak, že $\mathbf{x} = \mathbf{A}^T\mathbf{y}$. Pro vyřešení úlohy (5.18) tedy musíme vyřešit soustavu rovnic

$$\mathbf{A}^T\mathbf{y} = \mathbf{x}, \quad (5.20a)$$

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}. \quad (5.20b)$$

To je soustava $m + n$ rovnic o $m + n$ neznámých (\mathbf{x}, \mathbf{y}) .

Vyřešíme tuto soustavu. Dosazením \mathbf{x} do druhé rovnice obdržíme $\mathbf{A}\mathbf{A}^T\mathbf{y} = \mathbf{b}$. Tato soustava má vždy řešení, protože $\mathbf{b} \in \text{rng } \mathbf{A} = \text{rng}(\mathbf{A}\mathbf{A}^T)$. Předpokládejme, že matice $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$ má plnou hodnotu, což dle (5.5) nastane právě když \mathbf{A} má lineárně nezávislé řádky. Potom $\mathbf{y} = (\mathbf{A}\mathbf{A}^T)^{-1}\mathbf{b}$. Dosazením do první rovnice dostaneme $\mathbf{x} = \mathbf{A}^+\mathbf{b}$, kde

$$\mathbf{A}^+ = \mathbf{A}^T(\mathbf{A}\mathbf{A}^T)^{-1} \quad (5.21)$$

se nazývá **pseudoinverze** matice \mathbf{A} s lineárně nezávislými řádky. Je to jedna z pravých inverzí matice \mathbf{A} (ověřte!).

Je poučné odvodit tento výsledek i trochu jinou úvahou. Z obrázku je patrné, že řešení \mathbf{x} má nejmenší normu právě tehdy, když je ortogonální projekcí vektoru \mathbf{x}_0 na podprostor $(\text{null } \mathbf{A})^\perp = \text{rng}(\mathbf{A}^T)$. Ortogonální projektor na podprostor reprezentovaný svou bází je dán vztahem (5.7), zde ovšem promítáme na $\text{rng}(\mathbf{A}^T)$ a tedy musíme vzorec použít s \mathbf{A}^T místo s \mathbf{A} . Tedy

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^T(\mathbf{A}\mathbf{A}^T)^{-1}\mathbf{A}\mathbf{x}_0 = \mathbf{A}^T(\mathbf{A}\mathbf{A}^T)^{-1}\mathbf{b} = \mathbf{A}^+\mathbf{b}. \quad (5.22)$$

Vzorce (5.6) a (5.21) dohromady definují pseudoinverzi libovolné matice (čtvercové, úzké nebo široké) s plnou hodnotou (tedy $\text{rank } \mathbf{A} = \min\{m, n\}$).

5.3 (★) Pseudoinverze obecné matice

Zatím jsme odděleně diskutovali případy, kdy soustava má žádné, jedno, nebo nekonečně mnoho řešení. Překvapivě, tyto tři případy lze spojit do jediné formulace. Zopakujme, že optimální řešení úlohy (5.2) jsou právě řešení soustavy normálních rovnic (5.3). Co když je ale sama soustava (5.3) nedourčená? Pak můžeme hledat její řešení s nejmenší normou, tj. řešit úlohu

$$\min\{\|\mathbf{x}\|^2 \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{A}^T \mathbf{b}\}. \quad (5.23)$$

Protože úloha (5.18) má pro každou matici \mathbf{A} právě jedno optimální řešení, má i úloha (5.23) pro každou \mathbf{A} právě jedno optimální řešení. Toto řešení, \mathbf{x}^* , má tedy následující vlastnosti:

- Pokud soustava $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$ má jediné řešení, \mathbf{x}^* je toto řešení.
- Pokud soustava $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$ nemá řešení, \mathbf{x}^* je její přibližné řešení ve smyslu nejmenších čtverců, tj. řešení problému (5.2). Pokud ovšem problém (5.2) má více než jedno (tedy nekonečně mnoho) řešení, \mathbf{x}^* je řešení problému (5.2) s nejmenší normou.
- Pokud soustava $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$ má nekonečně mnoho řešení, \mathbf{x}^* je řešení této soustavy s nejmenší normou, tj. řešení problému (5.18).

Lze ukázat, že řešení úlohy (5.23) lze opět psát jako $\mathbf{x} = \mathbf{A}^+ \mathbf{b}$ kde matici \mathbf{A}^+ nazýváme **pseudoinverze** (přesněji *Moore-Penroseova pseudoinverze*) matice \mathbf{A} . Když \mathbf{A} má lineárně nezávislé sloupce, pseudoinverze je rovna (5.6). Když \mathbf{A} má lineárně nezávislé řádky, pseudoinverze je rovna (5.21). Když ovšem \mathbf{A} nemá plnou hodnost, pseudoinverzi je nutno počítat jinak. Elegantně se to udělá pomocí SVD, což neuvádíme.

Je několik jiných způsobů, jak definovat pseudoinverzi obecné matice. Zmíníme ještě jeden zajímavý. Všiměte si, že úloha (5.16) je ‘něco mezi’ úlohami (5.2) a (5.18). Neformálně, (5.18) je minimalizace $\|\mathbf{x}\|^2 + \mu \|\mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2$ pro velmi velké μ . To je ale totéž jako (5.16) pro velmi malé (kladné) μ . Lze ukázat, že pseudoinverze obecné matice je rovna

$$\mathbf{A}^+ = \lim_{\mu \rightarrow 0^+} \mathbf{A}_\mu^+. \quad (5.24)$$

5.4 Cvičení

5.1. Máme soustavu $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$, kde $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ a $\mathbf{b} \neq \mathbf{0}$. Jsou tyto výroky pravdivé? Odpovědi dokažte.

- Pokud $m < n$, pak soustava má vždy řešení.
- Pokud $m > n$, pak soustava nemá nikdy řešení.
- Pokud $m < n$ a \mathbf{A} má plnou hodnost, pak soustava má vždy nekonečně mnoho řešení.

5.2. Vyřešte (možno použít počítač) soustavu

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & -3 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

přibližně ve smyslu nejmenších čtverců pomocí (a) pseudoinverze, (b) QR rozkladu.

5.3. Formulujte jako přibližné řešení soustavy $\mathbf{P}\mathbf{u} = \mathbf{q}$ ve smyslu nejmenších čtverců, tedy jako úlohu $\min_{\mathbf{u}} \|\mathbf{P}\mathbf{u} - \mathbf{q}\|^2$. Jako výsledek napište matice $\mathbf{P}, \mathbf{q}, \mathbf{u}$. Pokud existuje jednoduchý vzorec pro řešení (jak pro optimální hodnotu tak optimální argument), napište je.

- Příklad 1.14.
- Hledá se vzdálenost bodu $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ od přímky $\{\mathbf{a} + t\mathbf{s} \mid t \in \mathbb{R}\}$ kde $\mathbf{a}, \mathbf{s} \in \mathbb{R}^n$.
- Příklad 1.11.
- Máme množinu m přímek v \mathbb{R}^n , kde i -tá přímka je množina $\{\mathbf{a}_i + t\mathbf{s}_i \mid t \in \mathbb{R}\}$ pro dané $\mathbf{a}_i, \mathbf{s}_i \in \mathbb{R}^n$. Hledá se bod $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$, jehož součet čtverců vzdáleností k přímkám je minimální.
- Máme m nadrovin v prostoru \mathbb{R}^n , kde i -tá nadrovina má rovnici $\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} = b_i$ pro dané $\mathbf{a}_i \in \mathbb{R}^n$ a $b_i \in \mathbb{R}$. Hledá se bod $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$, který minimalizuje součet čtverců vzdáleností od jednotlivých nadrovin.
- V prknu je n děr o souřadnicích $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}$, všechny v jedné přímce. Naměříme metrem vzdálenosti $d_{ij} = x_j - x_i$ pro vybrané dvojice $(i, j) \in E$, kde množina $E \subseteq \{1, \dots, n\} \times \{1, \dots, n\}$ je dána. Přitom dvojice jsou vybrané tak, že vždy $x_j > x_i$. Ze vzdáleností d_{ij} chceme spočítat souřadnice x_1, \dots, x_n . Odpovězte dále na otázky:
 - Kolik řešení má soustava $\mathbf{P}\mathbf{u} = \mathbf{q}$? Odpověď dokažte a interpretujte.
 - Jsou sloupce \mathbf{P} lineárně nezávislé?

Diskutujte obě otázky pro případ, že měření jsou přesná, a pro případ, že měření jsou zatížená nepřesnostmi.

- Závislost výkonu P kotle na průtoku G plynu a průřezu S díry na přívod vzduchu je modelována funkcí $\hat{P}(G, S) = G(a_1 + a_2S + a_310^{G+S} + a_410^{-S})$. Odhadujeme koeficienty a_1, \dots, a_4 z naměřených trojic $(G_1, S_1, P_1), \dots, (G_n, S_n, P_n)$.
 - Známý průběh ceny akcie jisté firmy po dnech je daný posloupností p_1, \dots, p_k . Chceme předpovídat cenu akcie den dopředu. Tuto cenu modelujeme *autoregresní funkcí* $\hat{p}_{t+1} = \beta_1 + \beta_2 p_t + \beta_3 p_{t-1}$. Odhadněte koeficienty β_i tak, aby celková chyba predikce $\sum_{t=3}^k (p_t - \hat{p}_t)^2$ byla na onom známém průběhu ceny minimální.
- 5.4. V problému *vážených nejmenších čtverců* chceme najít $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ minimalizující funkci

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m w_i \left(\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j - b_i \right)^2$$

kde w_i jsou nezáporné váhy. Napište funkci v maticovém tvaru, k čemuž zaved'te diagonální matici $\mathbf{W} = \text{diag}(w_1, \dots, w_m)$. Napište normální rovnici a pseudoinverzi pro tento případ.

- 5.5. Máme vektory $\mathbf{u} = (2, 1, -3)$ a $\mathbf{v} = (1, -1, 1)$. Najdi ortogonální projekci vektoru $(2, 0, 1)$ na podprostor (a) $\text{span}\{\mathbf{u}\}$, (b) $(\text{span}\{\mathbf{u}\})^\perp$, (c) $\text{span}\{\mathbf{u}, \mathbf{v}\}$, (d) $(\text{span}\{\mathbf{u}, \mathbf{v}\})^\perp$.
- 5.6. Necht' $X = \text{span}\left\{ \left(-\frac{3}{5}, 0, \frac{4}{5}, 0\right), (0, 0, 0, 1), \left(\frac{4}{5}, 0, \frac{3}{5}, 0\right) \right\}$. Najdi projektory na podprostor X a podprostor X^\perp .

- 5.7. Máme $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 2 & 4 & 1 \\ 1 & 2 & 0 \end{bmatrix}$. Najdi ortogonální projekci vektoru $(1, 1, 1)$ na podprostory (a) $\text{rng } \mathbf{A}$, (b) $\text{null } \mathbf{A}$, (c) $\text{rng}(\mathbf{A}^T)$, (d) $\text{null}(\mathbf{A}^T)$.

- 5.8. Nulový prostor projektoru je typicky netriviální, tedy projektor \mathbf{P} je singularní matice. Kdy je \mathbf{P} regulární? Jaká je v tom případě matice \mathbf{A} ve vzorci (5.7) a podprostor $X = \text{rng } \mathbf{A}$? Jaký je geometrický význam této situace?
- 5.9. Dokažte následující vlastnosti pseudoinverze ze vztahů (5.6) a (5.21) pro libovolné (úzké, široké nebo čtvercové) matice plné hodnosti:
- $\mathbf{A}^+ = \mathbf{A}^{-1}$ když \mathbf{A} je čtvercová
 - $(\mathbf{A}^+)^+ = \mathbf{A}$
 - $(\mathbf{A}^T)^+ = (\mathbf{A}^+)^T$
 - $\mathbf{A}\mathbf{A}^+\mathbf{A} = \mathbf{A}$, $\mathbf{A}^+\mathbf{A}\mathbf{A}^+ = \mathbf{A}^+$
 - $(\mathbf{A}\mathbf{A}^+)^T = \mathbf{A}\mathbf{A}^+$, $(\mathbf{A}^+\mathbf{A})^T = \mathbf{A}^+\mathbf{A}$
 - $\mathbf{A}^T = \mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{A}^+ = \mathbf{A}^+\mathbf{A}\mathbf{A}^T$
 - $(\mathbf{A}^T\mathbf{A})^+ = \mathbf{A}^+(\mathbf{A}^T)^+$, $(\mathbf{A}\mathbf{A}^T)^+ = (\mathbf{A}^T)^+\mathbf{A}^+$
- 5.10. Spočítejte pseudoinverzi nenulového skaláru (tj. matice s jedním řádkem a jedním sloupcem), nenulového sloupcového vektoru (tj. matice s jedním sloupcem) a nenulového řádkového vektoru (tj. matice s jedním řádkem).
- 5.11. Uvažujme projektor (5.7). Báze podprostoru X , na který promítáme, je tvořena sloupci matice \mathbf{A} . Projektor \mathbf{P} se nesmí změnit, vezmeme-li jinou bázi podprostoru. Různé báze podprostoru jsou dány sloupci matice $\mathbf{A}\mathbf{C}$ pro různé regulární matice $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ (tedy \mathbf{C} je matice přechodu k jiné bázi), viz Cvičení 3.12.
- 5.12. Jaké bude řešení normálních rovnic (5.3) v případě, že \mathbf{A} má lineárně nezávislé sloupce a $\mathbf{b} \perp \text{rng } \mathbf{A}$? Vyřešte geometrickou úvahou (vzpomeňte si na ortogonální projekci a koukejte na obrázek v §5.1!) a pak zkuste dokázat algebraicky.
- 5.13. Dokažte, že pokud $\mathbf{A}^T\mathbf{A} = \mathbf{B}^T\mathbf{B}$, pak existuje \mathbf{C} tak, že $\mathbf{A} = \mathbf{C}\mathbf{B}$.
- 5.14. Najděte co nejjednodušší vzorec pro
- vzdálenost počátku $\mathbf{0}$ od nadroviny $\{\mathbf{x} \mid \mathbf{a}^T\mathbf{x} = b\}$,
 - vzdálenost počátku $\mathbf{0}$ od afinního podprostoru $\{\mathbf{x} \mid \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}\}$ (kde \mathbf{A} má lineárně nezávislé řádky),
 - vzdálenost bodu \mathbf{x} od nadroviny $\{\mathbf{x} \mid \mathbf{a}^T\mathbf{x} = b\}$.
- 5.15. Neformálně je jasné, že nedourčená soustava bude mít vždy jen jedno řešení s nejmenší normou. Dokažte toto formálně, tj. dokažte, že jestliže soustava $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ má alespoň jedno řešení pak soustava (5.20) má právě jedno řešení.
- 5.16. Čtvercová matice \mathbf{A} se nazývá *normální*, když $\mathbf{A}^T\mathbf{A} = \mathbf{A}\mathbf{A}^T$. Příkladem je symetrická nebo antisymetrická matice. Dokažte, že pro normální matice platí $(\text{rng } \mathbf{A})^\perp = \text{null } \mathbf{A}$.
- 5.17. Ukázali jsme (viz §4.6), že ortogonální projektor (4.20) na podprostor reprezentovaný ortonormální bází splňuje $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P} = \mathbf{P}^T$. Dokažte tyto rovnosti i pro ortogonální projektor (5.7) na podprostor reprezentovaný obecnou bází.
- 5.18. Pro vektory $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ ukažte, že $\left\| \begin{bmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \end{bmatrix} \right\|^2 = \|\mathbf{a}\|^2 + \|\mathbf{b}\|^2$.
- 5.19. Dokažte, že matice $\mathbf{A}^T\mathbf{A} + \mu\mathbf{I}$ je regulární pro každou matici \mathbf{A} a každé $\mu > 0$.
- 5.20. Uvažujme ‘regularizovanou pseudoinverzi’ (5.24). Dokažte, že pro každou matici \mathbf{A} a každé $\mu > 0$ platí $(\mathbf{A}^T\mathbf{A} + \mu\mathbf{I})^{-1}\mathbf{A}^T = \mathbf{A}^T(\mathbf{A}\mathbf{A}^T + \mu\mathbf{I})^{-1}$. Dumejte nad významem této rovnosti.

5.21. (*) Dokažte, že pro každé matice \mathbf{A}, \mathbf{B} takové, že matice $[\mathbf{A} \ \mathbf{B}]$ je čtvercová regulární a $\mathbf{A}^T \mathbf{B} = \mathbf{0}$, platí $\mathbf{A}(\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T + \mathbf{B}(\mathbf{B}^T \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^T = \mathbf{I}$. Vysvětlete rozdíl oproti (4.25).

Nápověda a řešení

5.1.a) Neplatí. Příklad: $m = 1, n = 2, \mathbf{A} = [0 \ 0], \mathbf{b} = 1$.

5.1.b) Neplatí. Příklad: $m = 2, n = 1, \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$.

5.1.c) Platí. Matice \mathbf{A} má hodnost m , tedy lineárně nezávislé řádky, tedy $\text{rng } \mathbf{A} = \mathbb{R}^m$, tedy soustava má řešení. Navíc má \mathbf{A} netriviální nulový prostor, tedy má nekonečně mnoho řešení.

5.2. $(x_1, x_2, x_3) = (2, 1, 0)/3$

5.3.a) Zbývá napsat funkci (1.14) ve tvaru $f(\mathbf{u}) = \|\mathbf{P}\mathbf{u} - \mathbf{q}\|^2$. To je snadné (srov. s (5.14)): máme

$$\sum_{i=1}^m \|\mathbf{x} - \mathbf{a}_i\|^2 = \left\| \begin{bmatrix} \mathbf{x} - \mathbf{a}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{x} - \mathbf{a}_m \end{bmatrix} \right\|^2 = \left\| \begin{bmatrix} \mathbf{I}_n \\ \vdots \\ \mathbf{I}_n \end{bmatrix} \mathbf{x} - \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{a}_m \end{bmatrix} \right\|^2, \text{ tedy } \mathbf{u} = \mathbf{x}, \mathbf{P} = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_n \\ \vdots \\ \mathbf{I}_n \end{bmatrix}, \mathbf{q} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{a}_m \end{bmatrix}$$

5.3.c) Zbývá napsat funkci (1.13) ve tvaru $f(\mathbf{u}) = \|\mathbf{P}\mathbf{u} - \mathbf{q}\|^2$. To je opět snadné: $\mathbf{u} = (\alpha_1, \alpha_2)$, $\mathbf{P} = [\mathbf{b}_1 - \mathbf{a}_1 \ \mathbf{a}_2 - \mathbf{b}_2], \mathbf{q} = \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2$.

5.3.d) Minimalizujte přes proměnné $\mathbf{y}, t_1, \dots, t_m$.

5.3.e) Nejprve si vzpomeňte či odvod'te, jak se spočítá vzdálenost bodu \mathbf{y} od nadroviny $\mathbf{a}^T \mathbf{x} = b$.

5.4. $f(\mathbf{x}) = (\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b})^T \mathbf{W}(\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}) = \|\mathbf{W}^{1/2} \mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{W}^{1/2} \mathbf{b}\|^2$.

5.5. (a) $(2, 1, -3)/14$, (b) $(26, -1, 17)/14$, (c) $(62, -35, 17)/38$, (d) $(14, 35, 21)/38$

5.6. Nejsou náhodou vektory ortonormální?

5.6. Projektor na X je $\mathbf{P} = \text{diag}(1, 0, 1, 1)$. Projektor na X^\perp je $\mathbf{P} = \text{diag}(0, 1, 0, 0)$.

5.7. (a) $(1, 1, 1)$, (b) $(0.4, -0.2, 0)$, (c) $(0.6, 1.2, 1)$, (d) $(0, 0, 0)$. Pozor, \mathbf{A} nemá plnou hodnost.

5.8. \mathbf{A} je regulární, tedy $X = \mathbb{R}^m$. Projektor je identita.

5.9.b) Když \mathbf{A} má l.n. sloupce, dle (5.6) je $\mathbf{A}^+ = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T$. Protože $(\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1}$ je regulární, \mathbf{A}^+ má l.n. řádky. Dle (5.21) tedy $\mathbf{A}^{++} = \mathbf{A}^{+T} (\mathbf{A}^+ \mathbf{A}^{+T})^{-1} = \mathbf{A} (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-T} [(\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{A} (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-T}]^{-1} = \mathbf{A} (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-T} [(\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-T}]^{-1} = \mathbf{A} (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-T} (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^T = \mathbf{A}$. Když \mathbf{A} má l.n. řádky, udělá se to podobně.

5.11. $\tilde{\mathbf{A}} (\tilde{\mathbf{A}}^T \tilde{\mathbf{A}})^{-1} \tilde{\mathbf{A}}^T = \mathbf{A} \mathbf{C} (\mathbf{C}^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{C})^{-1} \mathbf{C}^T \mathbf{A}^T = \mathbf{A} \mathbf{C} \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{C}^{-T} \mathbf{C}^T \mathbf{A}^T = \mathbf{A} (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T$

5.12. $\mathbf{x} = \mathbf{0}$

5.13. Dle (5.4a) je $\text{rng}(\mathbf{A}^T) = \text{rng}(\mathbf{B}^T)$. Tedy každý řádek \mathbf{A} je lineární kombinací řádků \mathbf{B} . Dle Cvičení 3.14 to jde napsat jako $\mathbf{A} = \mathbf{C}\mathbf{B}$ pro nějaké \mathbf{C} .

5.14.a) $|b|/\|\mathbf{a}\|$

5.14.b) Čtverec vzdálenosti je roven optimální hodnotě úlohy (5.18), tedy

$$(\mathbf{A}^+ \mathbf{b})^T (\mathbf{A}^+ \mathbf{b}) = \mathbf{b}^T (\mathbf{A} \mathbf{A}^T)^{-T} \mathbf{A} \mathbf{A}^T (\mathbf{A} \mathbf{A}^T)^{-1} \mathbf{b} = \mathbf{b}^T (\mathbf{A} \mathbf{A}^T)^{-1} \mathbf{b}.$$

5.14.c) $|\mathbf{a}^T \mathbf{x} - b|/\|\mathbf{a}\|$

5.16. Dle (4.8a) a (5.4b) je $(\text{rng } \mathbf{A})^\perp = \text{null}(\mathbf{A}^T) = \text{null}(\mathbf{A} \mathbf{A}^T) = \text{null}(\mathbf{A}^T \mathbf{A}) = \text{null } \mathbf{A}$.

5.17. Ihned plyne z toho, že každý podprostor má ortonormální bázi (což jsme řekli v §4.5), tedy stačí rovnosti dokázat pro (4.20). Ale můžeme také dokázat přímým dosazením:

$$\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}\mathbf{P} = \mathbf{A} (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{A} (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T = \mathbf{A} (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T,$$

$$\mathbf{P}^T = [\mathbf{A} (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T]^T = \mathbf{A} (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-T} \mathbf{A}^T = \mathbf{A} (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T.$$

5.19. Je $\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \mu \mathbf{I} = \mathbf{B}^T \mathbf{B}$, kde $\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \mathbf{A} \\ \mu^{1/2} \mathbf{I} \end{bmatrix}$. Matice \mathbf{B} má l.n. sloupce, protože už matice $\mu^{1/2} \mathbf{I}$ je má. Tedy dle (5.5) má $\mathbf{B}^T \mathbf{B}$ plnou hodnot, tedy je regulární.

5.20. Rovnici vynásobte zleva maticí $\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \mu \mathbf{I}$ a zprava maticí $\mathbf{A} \mathbf{A}^T + \mu \mathbf{I}$ a pak roznásobte závorky.

$$\begin{aligned}
 5.21. \quad \mathbf{I} &= [\mathbf{A} \quad \mathbf{B}] [\mathbf{A} \quad \mathbf{B}]^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{A}^T \\ \mathbf{B}^T \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{A}^T \\ \mathbf{B}^T \end{bmatrix} = [\mathbf{A} \quad \mathbf{B}] \left(\begin{bmatrix} \mathbf{A}^T \\ \mathbf{B}^T \end{bmatrix} [\mathbf{A} \quad \mathbf{B}] \right)^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{A}^T \\ \mathbf{B}^T \end{bmatrix} \\
 &= [\mathbf{A} \quad \mathbf{B}] \begin{bmatrix} \mathbf{A}^T \mathbf{A} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{B}^T \mathbf{B} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{A}^T \\ \mathbf{B}^T \end{bmatrix} = [\mathbf{A} \quad \mathbf{B}] \begin{bmatrix} (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & (\mathbf{B}^T \mathbf{B})^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{A}^T \\ \mathbf{B}^T \end{bmatrix} \\
 &= \mathbf{A} (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T + \mathbf{B} (\mathbf{B}^T \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^T.
 \end{aligned}$$

Význam: $[\mathbf{A} \quad \mathbf{B}]$ regulární a $\mathbf{A}^T \mathbf{B} = \mathbf{0}$ implikuje $\text{rng } \mathbf{B} = (\text{rng } \mathbf{A})^\perp$. To souhlasí s tím, že $\mathbf{A} (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T$ je ort. projektor na $\text{rng } \mathbf{A}$ a $\mathbf{B} (\mathbf{B}^T \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^T$ je ort. projektor na $\text{rng } \mathbf{B} = (\text{rng } \mathbf{A})^\perp$.

Kapitola 6

Spektrální rozklad a kvadratické funkce

Ze základní školy znáte polynomy jedné proměnné, co jsou ale polynomy více proměnných? **Monom** (angl. *monomial*) k -tého stupně n proměnných je výraz

$$x_1^{k_1} \cdots x_n^{k_n},$$

kde $k_1, \dots, k_n \in \{0, \dots, k\}$ splňují $k_1 + \dots + k_n = k$. **Polynom** (angl. *polynomial*) n proměnných je lineární kombinace monomů, přičemž **stupeň polynomu** je stupeň jeho monomu (s nenulovým koeficientem) nejvyššího stupně. Např. funkce

$$f(x, y) = x^2y + xy - 2x + 1 \quad (6.1)$$

je polynom dvou proměnných třetího stupně, kde např. x^2y je monom třetího stupně a xy je monom druhého stupně. Polynom je **homogenní**, pokud stupně všech jeho monomů jsou stejné. Polynom (6.1) není homogenní, ale např. $f(x, y) = x^2y - 5y^3$ je homogenní stupně tři.

Vidíme, že afinní funkce (3.23) je jen jiný název pro polynom prvního stupně a lineární funkce (3.6) (také zvaná lineární forma) je jiný název pro homogenní polynom prvního stupně¹. Polynom druhého stupně se nazývá *kvadratická funkce* a homogenní polynom druhého stupně *kvadratická forma*². Cílem této kapitoly je porozumět extrémům kvadratických forem a funkcí.

6.1 Vlastní čísla a vektory

Necht' pro čtvercovou matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, nenulový vektor $\mathbf{v} \in \mathbb{C}^n$ a skalár $\lambda \in \mathbb{C}$ platí

$$\mathbf{A}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}. \quad (6.2)$$

Pak λ se nazývá **vlastní číslo** matice a \mathbf{v} **vlastní vektor** matice příslušný vlastnímu číslu λ . Vlastní čísla a vektory mohou být obecně komplexní.

Rovnici (6.2) lze přepsat jako

$$(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})\mathbf{v} = \mathbf{0}. \quad (6.3)$$

Pokud je λ známé, je to soustava homogenních lineárních rovnic pro \mathbf{v} . Ta má netriviální (tj. nenulové) řešení právě tehdy, když matice $\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}$ je singulární. Tedy vlastní čísla splňují

$$p_{\mathbf{A}}(\lambda) = \det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}) = 0, \quad (6.4)$$

¹Tohle platí jen pro funkce na vektorovém prostoru \mathbb{R}^n . I když polynomy lze definovat (i když složitějším způsobem) na abstraktním (tedy definovaným axiomy) vektorovém prostoru, obvykle se jim tak neříká.

²Názvosloví není zcela konzistentní, což je opět dáno tím, že některá jména pocházejí z lineární algebry a některá z matematické analýzy.

kde funkce $p_A: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ se nazývá **charakteristický polynom** matice \mathbf{A} .

Vlastní vektory příslušné vlastnímu číslu λ pak spočítáme ze soustavy (6.3). Vlastní vektor není svým vlastním číslem určen jednoznačně, vlastní vektory příslušné vlastnímu číslu λ tvoří celý podprostor $\text{null}(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})$ (kromě počátku $\mathbf{0}$). Speciálně, velikost vlastních vektorů nehraje roli a je proto zvykem je normalizovat, $\|\mathbf{v}\| = 1$.

Příklad 6.1. Vlastní čísla matice $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}$ jsou řešeními rovnice

$$\det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}) = \det \begin{bmatrix} 1 - \lambda & 2 \\ 3 & 4 - \lambda \end{bmatrix} = (1 - \lambda)(4 - \lambda) - 3 \cdot 2 = \lambda^2 - 5\lambda - 2 = 0.$$

Tato kvadratická rovnice má dva kořeny $\lambda = (5 \pm \sqrt{33})/2$, což jsou tedy vlastní čísla matice \mathbf{A} . Vlastní vektory příslušné každému λ najdeme řešením homogenní lineární soustavy

$$\begin{bmatrix} 1 - \lambda & 2 \\ 3 & 4 - \lambda \end{bmatrix} \mathbf{v} = \mathbf{0}. \quad \square$$

Z definice determinantu (2.6) plyne (promyslete!), že charakteristický polynom má stupeň n . Podle *základní věty algebry* má tedy právě n komplexních kořenů, počítáme-li k -násobný kořen k -krát. Označíme-li kořeny $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, je tedy

$$p_{\mathbf{A}}(\lambda) = \prod_{i=1}^n (\lambda_i - \lambda).$$

V tomto smyslu má matice právě n vlastních čísel, z nichž některá mohou být stejná kvůli násobnosti. Tomuto seznamu vlastních čísel se říká **spektrum** matice.

Nechť $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ jsou vlastní čísla matice a $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n$ jim příslušné vlastní vektory. Rovnice

$$\mathbf{A}\mathbf{v}_i = \lambda_i\mathbf{v}_i, \quad i = 1, \dots, n$$

můžeme napsat jako jedinou maticovou rovnici (rozmyslete!)

$$\mathbf{A}\mathbf{V} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}, \quad (6.5)$$

kde diagonální matice $\mathbf{\Lambda} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ má na diagonále vlastní čísla a sloupce čtvercové matice $\mathbf{V} = [\mathbf{v}_1 \ \dots \ \mathbf{v}_n] \in \mathbb{R}^{n \times n}$ jsou vlastní vektory.

Různé podmnožiny vlastních vektorů mohou být lineárně závislé. Otázka, kdy se tak stane a co to znamená, není jednoduchá a podrobně ji zde diskutovat nepotřebujeme. Řekneme jen, že existuje dobrý důvod vlastní vektory vybrat tak, aby hodnota matice \mathbf{V} byla co možná největší.

Jak se počítají vlastní čísla a vektory? Charakteristický polynom je hlavně teoretický nástroj a přímé hledání jeho kořenů není vhodné pro numerický výpočet³. Pro větší matice se používají numerické iterační algoritmy, přičemž pro matice různého typu jsou vhodné různé algoritmy. Zásadní rozdíl oproti např. QR rozkladu je v tom, že vlastní čísla (jakožto kořeny polynomu n -tého stupně) obecně nejdou přesně spočítat konečným počtem operací $\{+, -, \times, /, k\text{-tá odmocnina}\}$. Matlabská funkce `[V,D]=eig(A)` spočítá matice \mathbf{V} a $\mathbf{\Lambda}$ splňující (6.5).

³Naopak, hledání kořenů libovolného polynomu lze převést na hledání vlastních čísel matice, která se nazývá *doprovodná matice (companion matrix)* polynomu.

6.1.1 Spektrální rozklad

Pokud je \mathbf{V} regulární (tj. matice \mathbf{A} má n lineárně nezávislých vlastních vektorů), je invertovatelná a (6.5) lze psát jako

$$\mathbf{A} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^{-1}. \quad (6.6)$$

Vztahu (6.6) se pak říká **rozklad matice podle vlastních čísel** nebo **spektrální rozklad**. V tom případě je matice \mathbf{A} podobná⁴ diagonální matici (neboli **diagonalizovatelná**), protože z (6.6) plyne $\mathbf{V}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{V} = \mathbf{\Lambda}$.

Věta 6.1. *Necht' $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Následující dvě tvrzení jsou ekvivalentní:*

- Matice \mathbf{A} je symetrická.
- Všechna vlastní čísla matice \mathbf{A} jsou reálná a \mathbf{A} má n vlastních vektorů které tvoří ortonormální množinu.

Důkaz věty neuvádíme. Větě 6.1 se někdy říká **spektrální věta**. Podle ní pro každou symetrickou \mathbf{A} je v (6.5) matice $\mathbf{\Lambda}$ reálná a \mathbf{V} může být zvolena ortogonální ($\mathbf{V}^{-1} = \mathbf{V}^T$). Tedy

$$\mathbf{A} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^T = \lambda_1 \mathbf{v}_1 \mathbf{v}_1^T + \dots + \lambda_n \mathbf{v}_n \mathbf{v}_n^T. \quad (6.7)$$

Zároveň jsme vpravo uvedli i druhou formu rozkladu jako součet dyád (viz §2.6) (přesvědčte se roznásobením součinu $\mathbf{V}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^T$ dle pravidel z §2.7, že druhá rovnost v (6.7) platí!).

Všimněme si, že (např. dle Věty 3.6, použité dvakrát na výraz $\mathbf{V}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^T$) máme

$$\text{rank } \mathbf{\Lambda} = \text{rank } \mathbf{A}. \quad (6.8)$$

Ale hodnost diagonální matice $\mathbf{\Lambda}$ je jednoduše počet jejích nenulových prvků, tedy počet nenulových vlastních čísel. Když $\text{rank } \mathbf{A} < n$, některá vlastní čísla jsou nulová a můžeme vynechat jim odpovídající sloupce+řádky matice $\mathbf{\Lambda}$ a sloupce matice \mathbf{V} . To znamená vynechání nulových sčítanců v sumě dyád v (6.7).

Příklad 6.2. Zde je spektrální rozklad matice 3×3 hodnosti 2:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} 2 & 3 & -2 \\ 3 & 2 & 2 \\ -2 & 2 & -8 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{18} & -2/3 \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{18} & 2/3 \\ 0 & 4/\sqrt{18} & 1/3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & -9 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 1/\sqrt{18} & -1/\sqrt{18} & 4/\sqrt{18} \\ -2/3 & 2/3 & 1/3 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{18} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{18} \\ 0 & 4/\sqrt{18} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5 & 0 \\ 0 & -9 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 1/\sqrt{18} & -1/\sqrt{18} & 4/\sqrt{18} \end{bmatrix} \\ &= 5 \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 \end{bmatrix} - 9 \begin{bmatrix} 1/\sqrt{18} \\ -1/\sqrt{18} \\ 4/\sqrt{18} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/\sqrt{18} & -1/\sqrt{18} & 4/\sqrt{18} \end{bmatrix} \quad \square \end{aligned}$$

Vlastní čísla a vektory jsou rozsáhlé téma, které jsme zde zdaleka nevyčerpali. To ale není ani třeba, protože dále budeme potřebovat jen spektrální rozklad symetrické matice.

⁴Matice \mathbf{A} a \mathbf{B} jsou si podobné, pokud existuje regulární matice \mathbf{C} tak, že $\mathbf{B} = \mathbf{C}\mathbf{A}\mathbf{C}^{-1}$. To máte znát z lineární algebry.

6.2 Kvadratická forma

Kvadratická forma na \mathbb{R}^n je homogenní polynom $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ druhého stupně. Je pohodlné ji zapsat v maticovém tvaru

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n a_{ij} x_i x_j \quad (6.9)$$

pro nějakou matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Protože $x_i x_j = x_j x_i$ (násobení čísel je komutativní), máme

$$\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n a_{ij} x_i x_j = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n (a_{ij} + a_{ji}) x_i x_j = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T (\mathbf{A} + \mathbf{A}^T) \mathbf{x}. \quad (6.10)$$

Vidíme, že funkce f závisí jen na součtech $a_{ij} + a_{ji}$. Je proto zvykem předpokládat $a_{ij} = a_{ji}$, neboli že matice \mathbf{A} je symetrická ($\mathbf{A}^T = \mathbf{A}$). V tom případě tedy $\frac{1}{2}(\mathbf{A} + \mathbf{A}^T) = \mathbf{A}$.

Abychom si procvičili maticovou algebru, dokážeme rovnost (6.10) i jinak. Každou čtvercovou matici lze jednoznačně napsat jako součet symetrické a antisymetrické části (viz Cvičení 2.11):

$$\mathbf{A} = \underbrace{\frac{1}{2}(\mathbf{A} + \mathbf{A}^T)}_{\text{symetrická}} + \underbrace{\frac{1}{2}(\mathbf{A} - \mathbf{A}^T)}_{\text{antisymetrická}}.$$

Ale pro každé \mathbf{x} máme

$$\mathbf{x}^T (\mathbf{A} - \mathbf{A}^T) \mathbf{x} = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{x}^T \mathbf{A}^T \mathbf{x} = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} - (\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x})^T = 0,$$

kde jsme použili skutečnost, že transpozice skaláru je tentýž skalár. Tedy když \mathbf{A} není symetrická, můžeme ji nahradit její symetrickou částí a kvadratická forma se nezmění.

Příklad 6.3. Příkladem kvadratické formy dvou proměnných je funkce

$$f(x, y) = 2x^2 - 2xy + y^2 = \begin{bmatrix} x & y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & -2 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x & y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}.$$

Všimněte si, že první matice není symetrická a druhá ano. □

6.2.1 Definitnost kvadratické formy / její matice

Čtvercovou matici \mathbf{A} nazýváme

- **pozitivně [negativně] semidefinitní**, když pro každé \mathbf{x} platí $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \geq 0$ [$\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \leq 0$],
- **pozitivně [negativně] definitní**, když pro každé $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ platí $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} > 0$ [$\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} < 0$],
- **indefinitní**, když existuje \mathbf{x} a \mathbf{y} tak, že $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} > 0$ a $\mathbf{y}^T \mathbf{A} \mathbf{y} < 0$.

Matice může mít i několik těchto vlastností najednou. Např. pozitivně definitní matice je zároveň pozitivně semidefinitní. Nulová matice je zároveň pozitivně i negativně semidefinitní.

I když definice dává smysl pro libovolné čtvercové matice, obvykle je zvykem hovořit o těchto vlastnostech jen pro symetrické matice. Někdy se tyto vlastnosti definují ne pro matici, ale abstraktněji pro kvadratickou formu.

Z definice je jasné, má-li kvadratická forma extrém a případně jaký:

Věta 6.2. Necht' funkce f je dána jako $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$.

- Je-li \mathbf{A} pozitivně [negativně] semidefinitní, pak f v bodě $\mathbf{0}$ nabývá minimum [maximum].
- Je-li \mathbf{A} pozitivně [negativně] definitní, pak f v bodě $\mathbf{0}$ nabývá ostré minimum [maximum].
- Je-li \mathbf{A} indefinitní, pak f nemá minimum ani maximum.

Důkaz. Je-li \mathbf{A} pozitivně semidefinitní, funkce f není nikde záporná a zároveň pro $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ je nulová, proto v bodě $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ (i když možná i jinde) nabývá svého minima. Je-li \mathbf{A} pozitivně definitní, je forma nulová jen v počátku a všude jinde kladná, tedy počátek je ostré minimum. Je-li \mathbf{A} indefinitní a např. $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} > 0$, bod \mathbf{x} nemůže být maximum protože $(2\mathbf{x})^T \mathbf{A} (2\mathbf{x}) > \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$, a zároveň \mathbf{x} nemůže být minimum protože pro nějaké \mathbf{y} je $\mathbf{y}^T \mathbf{A} \mathbf{y} < 0$. \square

6.2.2 Definitnost ze znamének hlavních minorů

Uvedeme kritérium, které určí definitnost matice podle znamének determinantů jistých jejich podmatic. Pro matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ a neprázdnou množinu $I \subseteq \{1, \dots, n\}$, symbol $\mathbf{A}_I = [a_{ij}]_{i,j \in I} \in \mathbb{R}^{|I| \times |I|}$ označuje matici vytvořenou z prvků matice \mathbf{A} v řádcích a sloupcích s indexy I .

- **Hlavní minor** matice \mathbf{A} je číslo $\det \mathbf{A}_I$ pro nějakou neprázdnou $I \subseteq \{1, \dots, n\}$.
- **Vůdčí hlavní minor** matice \mathbf{A} je její hlavní minor pro nějaké $I = \{1, \dots, k\}$ a $1 \leq k \leq n$.

Věta 6.3. Symetrická matice je

- pozitivně definitní, právě když všechny její vůdčí hlavní minory jsou kladné,
- pozitivně semidefinitní, právě když všechny její hlavní minory jsou nezáporné.

Větu nebudeme dokazovat. První tvrzení věty je známé *Sylvestrovo kritérium*. Všimněte si, že druhé tvrzení je prakticky použitelné jen pro malé matice, protože počet všech hlavních minorů matice $n \times n$ je $2^n - 1$. Tato tvrzení dovolí testovat i negativní [semi]definitnost (matice \mathbf{A} je negativně [semi]definitní, právě když matice $(-\mathbf{A})$ je pozitivně [semi]definitní) a indefinitnost (není-li matice ani pozitivně semidefinitní ani negativně semidefinitní, pak je indefinitní).

6.2.3 Diagonalizace kvadratické formy

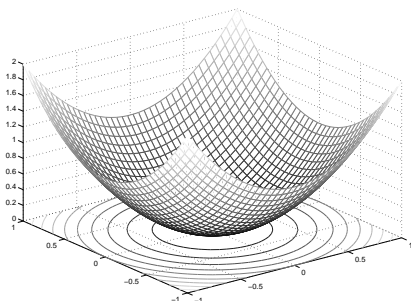
Definitnost matice lze ovšem také snadno určit pomocí jejích vlastních čísel. Ze spektrálního rozkladu (6.7) máme

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{x}^T \mathbf{V} \mathbf{\Lambda} \mathbf{V}^T \mathbf{x} = \mathbf{y}^T \mathbf{\Lambda} \mathbf{y} = \lambda_1 y_1^2 + \dots + \lambda_n y_n^2 = g(\mathbf{y}) = g(\mathbf{v}^T \mathbf{x}). \quad (6.11)$$

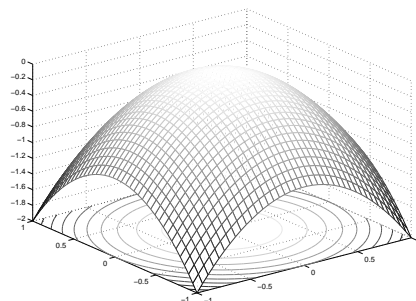
Vidíme, že substituce $\mathbf{x} = \mathbf{V} \mathbf{y}$ (tj. $\mathbf{y} = \mathbf{V}^T \mathbf{x}$) diagonalizovala matici kvadratické formy. Protože matice \mathbf{V} je ortogonální (a proto regulární), transformace $\mathbf{x} = \mathbf{V} \mathbf{y}$ je isometrie a navíc vzájemně jednoznačná (neboli bijekce, viz §1.1.2). Tedy funkce f a g se liší jen otočením příp. zrcadlením. Totéž můžeme říct i v jazyce bází: zatímco ve standardní (ortonormální) bázi (tvořené sloupcečky jednotkové matice \mathbf{I}) má kvadratická forma matici \mathbf{A} , v ortonormální bázi tvořené sloupcečky matice \mathbf{V} má forma diagonální matici $\mathbf{\Lambda}$.

Vlastnosti kvadratické formy jsou mnohem lépe patrné z jejího diagonálního tvaru g než z původního f . 'Kvalitativní' tvar grafu funkce g je dán vektorem znamének vlastních čísel. Např. pro $n = 2$ si grafy a vrstevnice funkce g (kde bez ztráty obecnosti bereme vrstevnici výšky 1, tj. množinu řešení rovnice $\mathbf{y}^T \mathbf{\Lambda} \mathbf{y} = 1$) snadno představíme:

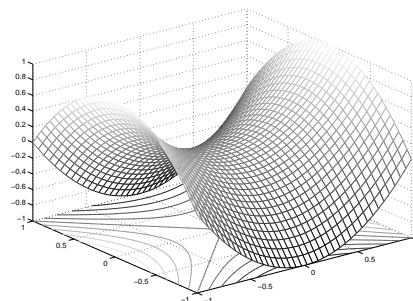
- Je-li $\lambda_1, \lambda_2 > 0$, graf vypadá jako ‘dolík’ a každá vrstevnice výšky 1 je elipsa (střed má v počátku a její hlavní osy jsou souřadnicové osy).
- Je-li $\lambda_1, \lambda_2 < 0$, graf vypadá jako ‘kopec’ a vrstevnice výšky 1 je prázdná množina.
- Je-li $\lambda_1 \lambda_2 < 0$, graf je ‘sedlo’ a vrstevnice výšky 1 je hyperbola.



$$g(y_1, y_2) = y_1^2 + y_2^2$$

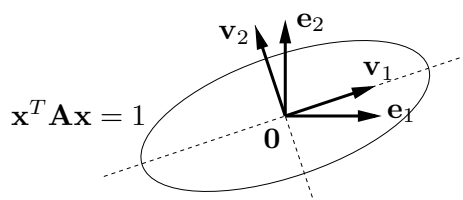


$$g(y_1, y_2) = -y_1^2 - y_2^2$$



$$g(y_1, y_2) = y_1^2 - y_2^2$$

Vrstevnice výšky 1 obecně (tj. ne nutně diagonální) kvadratické formy (tj. množina řešení $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} = 1$) s oběma vlastními čísly kladnými je elipsa se středem v počátku, směry jejíchž hlavních os jsou vlastní vektory:



Věta 6.4. Symetrická matice je

- *pozitivně [negativně] semidefinitní, právě když má všechna vlastní čísla nezáporná [nekladná]*
- *pozitivně [negativně] definitní, právě když má všechna vlastní čísla kladná [záporná]*
- *indefinitní, právě když má alespoň jedno kladné a alespoň jedno záporné vlastní číslo.*

Důkaz. To je snadný důsledek diagonalizace (6.11). Protože transformace $\mathbf{x} = \mathbf{V} \mathbf{y}$ je bijekce, platí např. (promyslete!)

$$(\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \geq 0 \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n) \iff (\mathbf{y}^T \mathbf{\Lambda} \mathbf{y} \geq 0 \forall \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n).$$

Tedy definitnost matice \mathbf{A} je stejná jako definitnost matice $\mathbf{\Lambda}$. Ale definitnost diagonální matice $\mathbf{\Lambda}$ je okamžitě patrná ze znamének čísel λ_i . Např. výraz (6.11) je nezáporný pro každé \mathbf{y} , právě když všechna λ_i jsou nezáporná. \square

6.3 Kvadratická funkce

Kvadratická funkce je polynom (ne nutně homogenní) druhého stupně. Lze jej psát v maticovém tvaru⁵

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c, \tag{6.12}$$

⁵Jak už jsme zmínili v §2.8 pro afinní zobrazení, kvadratickou funkci nemusíme vždy dostat zadanou přímo ve tvaru (6.12). Příkladem jsou funkce $f(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{y}^T (\mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b})$ či $f(\mathbf{X}) = \text{tr}((\mathbf{A} \mathbf{X} + \mathbf{B})^T (\mathbf{A} \mathbf{X} + \mathbf{B}))$. Převést takové funkce do tvaru (6.12) může stát dost práce a umu.

kde $\mathbf{A}^T = \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ a $c \in \mathbb{R}$. Oproti⁶ kvadratické formě tedy přibyl lineární a konstantní člen. Všimněte si, že pro $n = 1$ je (6.12) známá kvadratická funkce jedné proměnné $f(x) = ax^2 + bx + c$.

Jak nalézt extrémy kvadratické funkce? Extrémy lze hledat mechanicky pomocí derivací, to však ukážeme až v pozdější kapitole. Jiný způsob je převést kvadratickou funkci na kvadratickou formu posunutím počátku. Tento způsob popíšeme nyní.

Někdy lze najít $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$ a $y_0 \in \mathbb{R}$ takové, že

$$\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c = (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^T \mathbf{A} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + y_0. \quad (6.13)$$

Výraz na pravé straně je kvadratická forma s počátkem posunutým do bodu \mathbf{x}_0 , plus konstanta. Této úpravě se říká **doplnění na čtverec**. Znáte ji pro případ $n = 1$, neboť tak se na základní škole odvozuje vzorec pro kořeny kvadratické rovnice jedné proměnné. Zkusme spočít \mathbf{x}_0, y_0 z daných $\mathbf{A}, \mathbf{b}, c$. Roznásobením pravé strany dostaneme

$$\begin{aligned} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^T \mathbf{A} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + y_0 &= \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_0^T \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{x}_0^T \mathbf{A} \mathbf{x}_0 + y_0 \\ &= \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} - 2\mathbf{x}_0^T \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{x}_0^T \mathbf{A} \mathbf{x}_0 + y_0 \end{aligned}$$

(kde jsme použili, že $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}_0 = (\mathbf{x}_0^T \mathbf{A} \mathbf{x})^T = \mathbf{x}_0^T \mathbf{A}^T \mathbf{x} = \mathbf{x}_0^T \mathbf{A} \mathbf{x}$). Porovnáním členů stejného stupně máme

$$\mathbf{b} = -2\mathbf{A}\mathbf{x}_0, \quad (6.14a)$$

$$c = \mathbf{x}_0^T \mathbf{A} \mathbf{x}_0 + y_0, \quad (6.14b)$$

Pokud soustava (6.14a) má řešení, spočítáme z ní \mathbf{x}_0 a pak z druhé rovnice y_0 . Pokud soustava (6.14a) nemá řešení, doplnění na čtverec není možné.

Pokud je doplnění na čtverec možné, vyšetření extrémů kvadratické funkce se neliší od vyšetření extrémů kvadratické formy, protože rozdíl je jen v posunutí \mathbf{x}_0 . Pokud doplnění na čtverec možné není, kvadratická funkce extrém nemá (toto tvrzení zde uvádíme bez důkazu, dokázalo by se snadno pomocí derivací). Extrémy kvadratických funkcí lze také hledat pomocí derivací, ale to si ukážeme až později.

Příklad 6.4. Máme kvadratickou funkci

$$f(x, y) = 2x^2 - 2xy + y^2 - 2y + 3 = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ -2 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} + 3.$$

Její doplnění na čtverec je

$$f(x, y) = 2(x - 1)^2 - 2(x - 1)(y - 2) + (y - 2)^2 + 1 = \begin{bmatrix} x - 1 \\ y - 2 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x - 1 \\ y - 2 \end{bmatrix} + 1,$$

tedy máme $\mathbf{x}_0 = (1, 2)$, $y_0 = 1$. Jelikož matice \mathbf{A} je pozitivně definitní (ověřte!), má kvadratická funkce minimum v bodě \mathbf{x}_0 . \square

Příklad 6.5. Kvadratická funkce

$$f(x, y) = x^2 - y = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

doplnit na čtverec nejde. Funkce tedy nemá na \mathbb{R}^2 extrém. \square

⁶Pro $\mathbf{A} = \mathbf{0}$ bude f pouhá afinní funkce. Je větší konvence, zda afinní funkci máme nazývat kvadratickou či nikoliv, tedy zda máme zakázat případ $\mathbf{A} = \mathbf{0}$.

Příklad 6.6. Řešme znovu úlohu (5.2). Účelová funkce této úlohy je kvadratická, je totiž

$$\begin{aligned}\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|^2 &= (\mathbf{Ax} - \mathbf{b})^T (\mathbf{Ax} - \mathbf{b}) \\ &= (\mathbf{x}^T \mathbf{A}^T - \mathbf{b}^T) (\mathbf{Ax} - \mathbf{b}) \\ &= \mathbf{x}^T \mathbf{A}^T \mathbf{Ax} - \mathbf{x}^T \mathbf{A}^T \mathbf{b} - \mathbf{b}^T \mathbf{Ax} + \mathbf{b}^T \mathbf{b} \\ &= \mathbf{x}^T \mathbf{A}^T \mathbf{Ax} - 2\mathbf{b}^T \mathbf{Ax} + \mathbf{b}^T \mathbf{b},\end{aligned}\tag{6.15}$$

kde jsme použili rovnost $\mathbf{b}^T \mathbf{Ax} = (\mathbf{b}^T \mathbf{Ax})^T = \mathbf{x}^T \mathbf{A}^T \mathbf{b}$ (neboť skalár je roven své transpozici). Extrém této kvadratické funkce můžeme najít doplněním na čtverec (viz §6.3). Soustava (6.14a) bude mít tvar $\mathbf{A}^T \mathbf{Ax}_0 = \mathbf{A}^T \mathbf{b}$ (\mathbf{A}, \mathbf{b} zde samozřejmě označuje něco jiného než v (6.14a)), tedy dostali jsme normální rovnici (5.3). Zároveň je jasné, že matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ je pozitivně semidefinitní, neboť pro každé $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ máme

$$\mathbf{x}^T \mathbf{A}^T \mathbf{Ax} = (\mathbf{Ax})^T \mathbf{Ax} = \|\mathbf{Ax}\|^2 \geq 0.\tag{6.16}$$

Tedy v bodě \mathbf{x}_0 bude minimum. □

6.3.1 Kvadrika

Vrstevnice kvadratické funkce se nazývá **kvadrika**. Tedy kvadrika je množina⁷

$$\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{x}^T \mathbf{Ax} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c = 0\}\tag{6.17}$$

všech řešení kvadratické rovnice, neboli množina všech kořenů kvadratické funkce.

Když $\mathbf{b} = \mathbf{0}$, množina (6.17) je vrstevnice kvadratické formy a kvadrika má tedy střed v počátku. Když \mathbf{A} je diagonální, kvadrika má osy rovnoběžné se souřadnicovými osami. Když $\mathbf{A} = \mathbf{0}$, množina (6.17) je pouhá nadrovina. Když \mathbf{A} nemá plnou hodnotu, kvadrika je degenerovaná. Množina (6.17) může být i prázdná.

Jestliže kvadratická funkce dovoluje doplnění na čtverec, můžeme množinu (6.17) psát jako

$$\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^T \mathbf{A}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + y_0 = 0\},\tag{6.18}$$

což je vrstevnice kvadratické formy posunuté o \mathbf{x}_0 . V tom případě je *typ kvadriky* určen jednoduše znaménky vlastních čísel matice \mathbf{A} . Speciálně, když všechna vlastní čísla jsou kladná (tedy \mathbf{A} je pozitivně definitní), jde o povrch **elipsoidu**⁸. Když některá vlastní čísla jsou nulová (tedy \mathbf{A} nemá plnou hodnotu), kvadrika je degenerovaná. Toto ale nevyčerpává všechny typy degenerace: další typy degenerace nastanou, když \mathbf{A} nemá plnou hodnotu a funkce nedovoluje doplnění na čtverec.

Předpokládejme, že y_0 je takové, že množina (6.18) obsahuje nekonečný počet bodů. Pro $n = 2$ se pak kvadrika nazývá **kuželosečka** (angl. *conic*). Je-li matice \mathbf{A} pozitivně či negativně definitní maticí, kuželosečka je *elipsa* (speciálně, pokud $\lambda_1 = \lambda_2$ pak je to kružnice), je-li \mathbf{A} indefinitní, je to *hyperbola*.

⁷Bez ztráty obecnosti uvažujeme vrstevnici výšky nula (tj. množina kořenů) kvadratické funkce (6.12), neboť c můžeme zvolit libovolně.

⁸Někteří autoři myslí elipsoidem množinu i s vnitřkem, někteří jen její hranici. Rozdíl je stejný jako mezi sférou a koulí.

6.4 Cvičení

- 6.1. Pro každou z těchto funkcí určete, zda je to polynom. Pokud ano, určete počet proměnných a stupeň polynomu a rozhodněte, jestli je polynom homogenní.
- a) $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}, f(x, y) = (x^2 + y^2)(x - y) + xy - x - y$
 - b) $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, f(\mathbf{x}) = \mathbf{a}^T \mathbf{x}$ kde \mathbf{a} je dáno
 - c) $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|$
 - d) $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b}\|^2$ kde \mathbf{A}, \mathbf{b} jsou dány
 - e) $f: \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R}, f(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{x}^T \mathbf{y}$
 - f) $f: \mathbb{R}^{n \times n} \rightarrow \mathbb{R}, f(\mathbf{X}) = \mathbf{a}^T \mathbf{X} \mathbf{b}$ kde \mathbf{a}, \mathbf{b} jsou dány
 - g) $f: \mathbb{R}^{n \times n} \rightarrow \mathbb{R}, f(\mathbf{X}) = \det \mathbf{X}$
- 6.2. Spočítejte vlastní čísla a vlastní vektory matic $\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ -1 & -3 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$.
- 6.3. Napište rovnici, jejímiž kořeny jsou vlastní čísla matice $\begin{bmatrix} 2 & 0 & 3 \\ 0 & -2 & -1 \\ 3 & -1 & 2 \end{bmatrix}$.
- 6.4. Jaká jsou vlastní čísla a vlastní vektory (a) nulové, (b) jednotkové, (c) diagonální matice? Jaká jsou vlastní čísla trojúhelníkové matice?
- 6.5. Známe vlastní čísla a vektory matice \mathbf{A} . Jaká jsou vlastní čísla a vektory matice $\mathbf{A} + \alpha \mathbf{I}$?
- 6.6. Necht' $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ a $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times m}$. Dokažte, že nenulová vlastní čísla matic \mathbf{AB} a \mathbf{BA} jsou stejná. Jaký je vztah jejich vlastních vektorů?
- 6.7. Určete definitnost těchto symetrických matic. Pro všechny matice udělejte pomocí znamének (vůdčích) hlavních minorů, pro matice 2×2 také pomocí vlastních čísel.
- $\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 3 & -2 & 1 \\ -2 & 3 & 0 \\ 1 & 0 & 3 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} -2 & 0 & 1 \\ 0 & 3 & -1 \\ 1 & -1 & -2 \end{bmatrix}$
- 6.8. Mějme matici $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & -3 \\ 2 & -4 \end{bmatrix}$. Která z následujících tvrzení jsou pravdivá?
- a) Výraz $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$ je nezáporný pro každé $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$.
 - b) Výraz $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$ je nekladný pro každé $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$.
 - c) Funkce $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$ má v bodě $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ extrém.
- 6.9. Máme kvadratickou formu dvou proměnných $f(x, y) = 3x^2 + 2xy + 3y^2$.
- a) Napište ji ve tvaru $f(x, y) = \begin{bmatrix} x & y \end{bmatrix} \mathbf{A} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$ se symetrickou \mathbf{A} .
 - b) Najděte $a, b \in \mathbb{R}$ a ortogonální \mathbf{U} tak, že $f(x, y) = au^2 + bv^2$, kde $\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = \mathbf{U} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$.
 - c) Nakreslete množinu bodů (u, v) splňujících $au^2 + bv^2 = 1$.
 - d) Transformujte tuto množinu do souřadnic (x, y) a nakreslete.
- 6.10. Je množina $\{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid x^2 - 3xy + y^2 = 1\}$ elipsa nebo hyperbola? Odůvodněte.

- 6.11. (*) Napište v Matlabu funkci `ellipse(A)`, která vykreslí elipsu s rovnicí $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} = 1$ pro pozitivně definitní \mathbf{A} . Zamyslete se, jak byste postupovali při návrhu funkce `conic(Q)`, která vykreslí kuželosečku $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} = 1$ pro \mathbf{A} libovolné definitnosti (nezapomeňte, že obecná kuželosečka může být neomezená, tedy je nutno ji oříznout do daného obdélníku).
- 6.12. Ukažte, že je-li $\mathbf{A} = \mathbf{V} \mathbf{\Lambda} \mathbf{V}^T$ spektrální rozklad symetrické matice \mathbf{A} , platí $\mathbf{A}^n = \mathbf{V} \mathbf{\Lambda}^n \mathbf{V}^T$.
- 6.13. Následující kvadratické funkce napište ve tvaru (6.12) se symetrickou \mathbf{A} . Pak najděte jejich extrémy a určete typ každého extrému (použijte doplnění na čtverec).

a) $f(x, y) = x^2 + 4xy - 2y^2 + 3x - 6y + 5$

b) $f(x, y) = x^2 + 2y^2 - 2xy + 2x - y$

- 6.14. Máme neorientovaný graf (V, E) s množinou vrcholů $V = \{1, \dots, n\}$ a množinou hran⁹. $E \subseteq \binom{V}{2}$ Každému vrcholu $i \in V$ je přiřazeno číslo $x_i \in \mathbb{R}$, tato čísla tvoří vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$. Je dána funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ vzorcem

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{\{i,j\} \in E} (x_i - x_j)^2.$$

- a) Ukažte, že f je kvadratická forma.
- b) Jaká je definitnost této kvadratické formy?
- c) Pro jaká \mathbf{x} platí $f(\mathbf{x}) = 0$?
- d) Necht' je graf zadán maticí sousednosti $\mathbf{A} \in \{0, 1\}^{n \times n}$ tak, že $a_{ij} = 1$ právě když $\{i, j\} \in E$. Najděte matici $\mathbf{L} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ tak, že $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{L} \mathbf{x}$. Hledejte co nejjednodušší vztah pro \mathbf{L} . Použijte přitom kromě matice \mathbf{A} také diagonální matici $\mathbf{D} = \text{diag}(\mathbf{A}\mathbf{1})$. Co jsou diagonální prvky matice \mathbf{D} v termínech grafu (V, E) ?
- e) Necht' $\mathbf{B} \in \{-1, 0, 1\}^{n \times m}$ (kde $m = |E|$) je incidenční matice orientovaného grafu vytvořeného tak, že pro každou hranu neorientovaného grafu (V, E) zvolíme orientaci. Ukažte, že $f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{B}^T \mathbf{x}\|^2$, tedy $\mathbf{L} = \mathbf{B} \mathbf{B}^T$, kde tyto výrazy výraz nezávisí na zvolených orientacích hran.

Poznamenejme, že funkci f (příp. matici \mathbf{L}) se říká *Laplacián* grafu (V, E) .

- 6.15. Musí mít pozitivně semidefinitní matice na diagonále nezáporné prvky? Odpověď dokažte.
- 6.16. Dokažte, že matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \mu \mathbf{I}$ je pozitivně definitní pro každou matici \mathbf{A} a každé $\mu > 0$.
- 6.17. Dokažte, že symetrická matice je pozitivně definitní, právě když je pozitivně semidefinitní a invertovatelná.
- 6.18. Dokažte, že každá symetrická pozitivně definitní matice je invertovatelná a její inverze je také pozitivně definitní. Dokažte
- a) s použitím spektrálního rozkladu,
- b) bez použití spektrálního rozkladu.

- 6.19. Dokažte:

- a) Pro každou matici \mathbf{A} je matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ pozitivně semidefinitní.
- b) Matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ je pozitivně definitní, právě když matice \mathbf{A} má lineárně nezávislé sloupce,
- c) Pro každou pozitivně semidefinitní matici \mathbf{B} existuje matice \mathbf{A} tak, že $\mathbf{B} = \mathbf{A}^T \mathbf{A}$.

⁹ $\binom{V}{k}$ značí množinu všech k -prvkových podmnožin množiny V .

- d) Pro každou pozitivně definitní matici \mathbf{B} existuje regulární matice \mathbf{A} tak, že $\mathbf{B} = \mathbf{A}^T \mathbf{A}$.
- 6.20. (★) Positivně semidefinitní symetrické matice lze vnímat jako zobecnění nezáporných čísel. Proto se někdy pozitivní semidefinitnost značí $\mathbf{A} \succeq \mathbf{0}$. Zápis $\mathbf{A} \preceq \mathbf{B}$ je pak zkratkou $\mathbf{B} - \mathbf{A} \succeq \mathbf{0}$. Dokažte, že relace \preceq je částečné uspořádání (tj. reflexivní, tranzitivní a antisymetrická) na množině symetrických matic $n \times n$.
- 6.21. (★) Na základě podobnosti relace \preceq z předchozího cvičení a relace \leq na množině \mathbb{R} bychom očekávali, že:
- Pokud $\mathbf{A} \preceq \mathbf{B}$ a $\mathbf{C} \preceq \mathbf{D}$, potom $\mathbf{A} + \mathbf{C} \preceq \mathbf{B} + \mathbf{D}$.
 - Pokud $\mathbf{A} \succeq \mathbf{0}$ a $\alpha \geq 0$, potom $\alpha \mathbf{A} \succeq \mathbf{0}$.
 - Pokud $\mathbf{A} \succeq \mathbf{0}$, potom $\mathbf{A}^2 \succeq \mathbf{0}$.
 - Pokud $\mathbf{A} \succeq \mathbf{0}$ a $\mathbf{B} \succeq \mathbf{0}$, potom $\mathbf{AB} \succeq \mathbf{0}$.
 - Pokud $\mathbf{A} \succeq \mathbf{0}$ a $\mathbf{B} \succeq \mathbf{0}$, potom $\mathbf{ABA} \succeq \mathbf{0}$.

Které z těchto tvrzení platí a která neplatí? Odpovědi dokažte.

- 6.22. Najděte všechna vlastní čísla projektoru. Odpověď nalezněte algebraicky z idempotence projektoru a poté odůvoděte geometrickou úvahou.
- 6.23. Geometrickou úvahou najděte aspoň dva vlastní vektory a příslušná vlastní čísla Householderovy matice ze Cvičení 4.13.
- 6.24. Je známo, že libovolnou rotaci ve třírozměrném prostoru lze realizovat jako rotaci kolem jisté přímky (jdoucí počátkem) o jistý úhel. Geometrickou úvahou zjistěte co nejvíce o vlastních číslech a vektorech rotační matice rozměru 3×3 .
- 6.25. Dokažte, že ortogonální projektor (tj. matice reprezentující ortogonální projekci) je pozitivně semidefinitní. Jaký to má geometrický význam?
- 6.26. Na wikipedii vyhledejte hesla *kuželosečka (conic section)* a *kvadrika (quadric surface)*. Všechny typy kuželoseček a kvadrik (nedegenerovaných i degenerovaných) tam uvedené zkuste napsat jako vrstevnici vhodné kvadratické formy nebo funkce.

Nápověda a řešení

- 6.5. Vlastní čísla se zvětší o α . Vlastní vektory jsou stejné.
- 6.6. Necht' $\mathbf{ABv} = \lambda \mathbf{v} \neq \mathbf{0}$. Z toho plyne $\mathbf{BABv} = \lambda \mathbf{Bv}$, tedy $\mathbf{BAu} = \lambda \mathbf{u}$ kde $\mathbf{u} = \mathbf{Bv}$. Zároveň $\mathbf{u} \neq \mathbf{0}$ protože jinak by bylo $\lambda \mathbf{v} = \mathbf{0}$.
- 6.7. indefinitní, pozitivně definitní, indefinitní, pozitivně semidefinitní, indefinitní, pozitivně definitní, indefinitní
- 6.8. Matice \mathbf{A} není symetrická. Musíme ji nejdříve symetrizovat, tj. vzít matici $\frac{1}{2}(\mathbf{A} + \mathbf{A}^T)$, a pak teprv počítat vlastní čísla. Tím zjistíme, že žádné tvrzení neplatí.
- 6.9.a) $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix}$
- 6.9.b) $a = 2, b = 4, \mathbf{U} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$
- 6.10. Hyperbola, neboť \mathbf{A} má nenulová vlastní čísla opačných znamének.
- 6.13.a) Převod na tvar (6.12): $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$, $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & -2 \end{bmatrix}$, $\mathbf{b} = \begin{bmatrix} 3 \\ -6 \end{bmatrix}$, $c = 5$. Doplnění na čtverec existuje (protože \mathbf{A} je regulární). Funkce nemá extrém (protože \mathbf{A} je indefinitní), má sedlo v bodě $(\frac{1}{2}, -1)$.

6.13.b) Má minimum v bodě $-(3, 1)/2$.

6.14.a) Je $(x_i - x_j)^2 = x_i^2 - 2x_i x_j + x_j^2$. Tedy f je homogenní polynom stupně dva, což je kvadratická forma.

6.14.b) Funkce je součet čtverců (druhých mocnin), tedy $f(\mathbf{x}) \geq 0$ pro všechna $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, tedy f je pozitivně semidefinitní. Zároveň $f(\mathbf{x}) = 0$ když všechny složky x_i jsou stejné (tedy $\mathbf{x} = \alpha \mathbf{1}$ pro libovolné $\alpha \in \mathbb{R}$), tedy není pozitivně definitní.

6.14.c) Zjevně $f(\mathbf{x}) = 0$ právě když $x_i = x_j$ pro všechna $\{i, j\} \in E$. Když graf je souvislý, nastane to právě když všechna x_i jsou stejná. Jinak to nastane právě když jsou x_i stejná v každé komponentě grafu.

6.14.d) Prvek d_{ii} matice \mathbf{D} je stupeň (tedy počet incidentních hran) vrcholu i . Je $\mathbf{L} = \mathbf{D} - \mathbf{A}$, neboť

$$\sum_{\{i,j\}} (x_i - x_j)^2 = \frac{1}{2} \sum_{\{i,j\}} x_i^2 - \sum_{\{i,j\}} x_i x_j + \frac{1}{2} \sum_{\{i,j\}} x_j^2 = \sum_{\{i,j\}} x_i^2 - \sum_{\{i,j\}} x_i x_j = \mathbf{x}^T \mathbf{D} \mathbf{x} - \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}.$$

6.15. Musí. Stačí vzít $\mathbf{x} = \mathbf{e}_i$ vektory standardní báze.

6.16. $\mathbf{x}^T (\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \mu \mathbf{I}) \mathbf{x} = \mathbf{x}^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + \mu \mathbf{x}^T \mathbf{I} \mathbf{x} = \|\mathbf{A} \mathbf{x}\|^2 + \mu \|\mathbf{x}\|^2 > 0$ pro každé $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$.

6.17. Necht' $\mathbf{A} = \mathbf{V} \mathbf{\Lambda} \mathbf{V}^T$. Matice \mathbf{A} je pozitivně semidefinitní, právě když jsou všechny diagonální prvky matice $\mathbf{\Lambda}$ (což jsou vlastní čísla matice \mathbf{A}) nezáporné. Dle (6.8) je \mathbf{A} invertovatelná, právě když $\mathbf{\Lambda}$ je invertovatelná, neboli $\mathbf{\Lambda}$ má na diagonále nenulové prvky. Ale \mathbf{A} je pozitivně definitní, právě když její vl. čísla jsou kladná, tj. nezáporná a nenulová.

6.18.a) Je $\mathbf{A}^{-1} = (\mathbf{V} \mathbf{\Lambda} \mathbf{V}^T)^{-1} = \mathbf{V} \mathbf{\Lambda}^{-1} \mathbf{V}^T$. Ale definitnost matice \mathbf{A} je stejná jako definitnost matice $\mathbf{\Lambda}$. Je jasné, že pokud diagonální prvky λ_i matice $\mathbf{\Lambda}$ jsou kladné, pak jsou kladné i diagonální prvky $1/\lambda_i$ matice $\mathbf{\Lambda}^{-1}$.

6.18.b) Necht' \mathbf{A} je pozitivně definitní, tedy $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} > 0$ pro každé $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$. Kdyby \mathbf{A} nebyla invertovatelná (tj. regulární), dle Věty 3.7 by měla netriviální nulový prostor, tedy $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{0}$ pro nějaké $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$. Ale to nelze, protože pak by také $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} = 0$.

Necht' \mathbf{A} je invertovatelná. Položme $\mathbf{y} = \mathbf{A} \mathbf{x}$ a $\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{y}$. Víme, že $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} > 0$ pro každé $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$. Z toho $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{y}^T \mathbf{A}^{-T} \mathbf{A} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{y} = \mathbf{y}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{y} > 0$. Protože zobrazení $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{A} \mathbf{x}$ je bijekce, je $\mathbf{y}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{y} > 0$ pro každé $\mathbf{y} \neq \mathbf{0}$.

6.19.a) $\mathbf{x}^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{x} = (\mathbf{A} \mathbf{x})^T \mathbf{A} \mathbf{x} = \|\mathbf{A} \mathbf{x}\|^2 \geq 0$

6.19.b) Víme, že $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ je p.s.d. pro každou \mathbf{A} . Tedy stačí dokázat, že $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ je invertovatelná, právě když \mathbf{A} má l.n. sloupce. To jsme dokázali v (5.5).

6.19.c) Ve spektrálním rozkladu $\mathbf{B} = \mathbf{V} \mathbf{\Lambda} \mathbf{V}^T$ má $\mathbf{\Lambda}$ nezáporné diagonální prvky. Položme $\mathbf{A} = \mathbf{\Lambda}^{1/2} \mathbf{V}^T$.

6.19.d) Ve spektrálním rozkladu $\mathbf{B} = \mathbf{V} \mathbf{\Lambda} \mathbf{V}^T$ má $\mathbf{\Lambda}$ kladné diagonální prvky. Položme $\mathbf{A} = \mathbf{\Lambda}^{1/2} \mathbf{V}^T$.

6.20. Relace je reflexivní, když $\mathbf{A} \preceq \mathbf{A}$ pro každou \mathbf{A} , neboli $\mathbf{A} - \mathbf{A} \succeq \mathbf{0}$, což platí.

Pro další si všimněte, že $\mathbf{A} \preceq \mathbf{B}$ znamená $(\forall \mathbf{x})(\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \leq \mathbf{x}^T \mathbf{B} \mathbf{x})$. Relace je antisymetrická, když $\mathbf{A} \preceq \mathbf{B} \preceq \mathbf{A} \Rightarrow \mathbf{A} = \mathbf{B}$. Ale $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \leq \mathbf{x}^T \mathbf{B} \mathbf{x} \leq \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$ implikuje $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{x}^T \mathbf{B} \mathbf{x}$. To platí pro všechna \mathbf{x} , protože \mathbf{A}, \mathbf{B} jsou symetrické.

Relace je tranzitivní, když $\mathbf{A} \preceq \mathbf{B} \preceq \mathbf{C} \Rightarrow \mathbf{A} \preceq \mathbf{C}$. To platí, neboť $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \leq \mathbf{x}^T \mathbf{B} \mathbf{x} \leq \mathbf{x}^T \mathbf{C} \mathbf{x} \Rightarrow \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \leq \mathbf{x}^T \mathbf{C} \mathbf{x}$.

6.22. Algebraicky: Projektor \mathbf{P} splňuje $\mathbf{P} \mathbf{P} = \mathbf{P}$ (idempotence). Tedy z $\mathbf{P} \mathbf{v} = \lambda \mathbf{v}$ plyne (násobením maticí \mathbf{P}) $\mathbf{P} \mathbf{v} = \lambda \mathbf{P} \mathbf{v}$. To může platit jen pro $\lambda = 1$ nebo pro $\mathbf{P} \mathbf{v} = \mathbf{0}$. Ale když $\mathbf{P} \mathbf{v} = \mathbf{0}$, tak z rovnice $\mathbf{P} \mathbf{v} = \lambda \mathbf{v}$ musí být $\lambda = 0$. Tedy vlastní čísla projektoru mohou být buď 1 nebo 0.

Úvaha: Projekce na podprostor $X = \text{rng } \mathbf{P}$ promítne každý vektor $\mathbf{x} \in X$ na sebe, tedy $\mathbf{P} \mathbf{x} = \mathbf{x}$. Každý vektor $\mathbf{x} \in X^\perp$ se promítne do $\mathbf{0}$, tedy $\mathbf{P} \mathbf{x} = \mathbf{0}$. Každý vektor $\mathbf{x} \notin X \cup X^\perp$ se promítne do

vektoru, který není rovnoběžný s \mathbf{x} . Shrnuto, \mathbf{P} má jen dvě vlastní čísla 1 a 0 (předpokládáme nyní, že $X^\perp \neq \{\mathbf{0}\}$, neboli \mathbf{P} není regulární). Vlastní vektory příslušné číslu 1 tvoří podprostor X , vlastní vektory příslušné číslu 0 tvoří podprostor X^\perp .

- 6.23. Transformace $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{H}\mathbf{x}$ je zrcadlení okolo nadroviny s normálovým vektorem \mathbf{v} . Tedy $\mathbf{H}\mathbf{x} = \mathbf{x}$ pro všechna \mathbf{x} ležící v této nadrovině, neboli $\mathbf{v}^T \mathbf{x} = 0$. Dále je $\mathbf{H}\mathbf{v} = -\mathbf{v}$, neboť normála nadroviny zrcadlením změnila orientaci.
- 6.25. Projektor \mathbf{P} splňuje $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}$ a $\mathbf{P}^T = \mathbf{P}$ (viz §4.6 a Cvičení 5.17), z čehož plyne $\mathbf{P} = \mathbf{P}^T \mathbf{P}$. Nyní $\mathbf{z}^T \mathbf{P}\mathbf{z} = \mathbf{z}^T \mathbf{P}^T \mathbf{P}\mathbf{z} = \|\mathbf{P}\mathbf{z}\|^2 \geq 0$ (viz Cvičení 6.19). Geometrický význam je takový, že libovolný vektor \mathbf{z} svírá se svou ortogonální projekcí $\mathbf{x} = \mathbf{P}\mathbf{z}$ ostrý úhel nebo jsou na sebe kolmé (když $\mathbf{z} = \mathbf{0}$ nebo $\mathbf{x} = \mathbf{0}$), tedy $\mathbf{z}^T \mathbf{x} = \mathbf{z}^T \mathbf{P}\mathbf{z} \geq 0$.

Kapitola 7

Použití spektrálního rozkladu v optimalizaci

7.1 Stopa matice

Stopa (angl. *trace*) čtvercové matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je součet jejích diagonálních prvků, značí se

$$\operatorname{tr} \mathbf{A} = a_{11} + \cdots + a_{nn}. \quad (7.1)$$

Vlastnosti (dokažte!):

- $\operatorname{tr}(\mathbf{A} + \mathbf{B}) = \operatorname{tr} \mathbf{A} + \operatorname{tr} \mathbf{B}$
- $\operatorname{tr}(\alpha \mathbf{A}) = \alpha \operatorname{tr} \mathbf{A}$
- $\operatorname{tr}(\mathbf{A}^T) = \operatorname{tr} \mathbf{A}$
- $\operatorname{tr}(\mathbf{AB}) = \operatorname{tr}(\mathbf{BA})$ pro každé $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ a $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times m}$ (tzv. *cykličnost stopy*)

Z poslední rovnosti plyne např. $\operatorname{tr}(\mathbf{ABC}) = \operatorname{tr}(\mathbf{CAB})$, protože $\operatorname{tr}(\mathbf{DC}) = \operatorname{tr}(\mathbf{CD})$ kde $\mathbf{D} = \mathbf{AB}$. Podobně např. $\operatorname{tr}(\mathbf{ABCD}) = \operatorname{tr}(\mathbf{CDAB})$. Ale neplatí např. $\operatorname{tr}(\mathbf{ABC}) = \operatorname{tr}(\mathbf{CBA})$.

Každá čtvercová matice splňuje

$$\operatorname{tr} \mathbf{A} = \lambda_1 + \cdots + \lambda_n, \quad (7.2)$$

kde $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ jsou vlastní čísla matice. Pro diagonalizovatelné matice lze rovnost dokázat ze spektrálního rozkladu a cykličnosti stopy (proved'te!). Pro nediagonalizovatelné matice důkaz neuvádíme.

7.2 Skalární součin a norma matic

Je přirozené definovat **skalární součin matic** $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ jako

$$\langle \mathbf{A}, \mathbf{B} \rangle = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n a_{ij} b_{ij}, \quad (7.3)$$

což je vlastně skalární součin vektorů vytvořených přerovnáním prvků každé matice do vektoru. Zjevně $\langle \mathbf{A}, \mathbf{B} \rangle = \langle \mathbf{B}, \mathbf{A} \rangle = \langle \mathbf{A}^T, \mathbf{B}^T \rangle = \langle \mathbf{B}^T, \mathbf{A}^T \rangle$. Jsou-li $\mathbf{a}_i, \mathbf{b}_i \in \mathbb{R}^m$ sloupce matic \mathbf{A}, \mathbf{B} , skalární součin jde také napsat jako

$$\langle \mathbf{A}, \mathbf{B} \rangle = \mathbf{a}_1^T \mathbf{b}_1 + \cdots + \mathbf{a}_n^T \mathbf{b}_n \quad (7.4)$$

(totéž lze napsat pro řádky). Platí také

$$\langle \mathbf{A}, \mathbf{B} \rangle = \text{tr}(\mathbf{A}^T \mathbf{B}) = \text{tr}(\mathbf{B}^T \mathbf{A}) = \text{tr}(\mathbf{A} \mathbf{B}^T) = \text{tr}(\mathbf{B} \mathbf{A}^T), \quad (7.5)$$

kde první rovnost plyne snadno např. ze vzorců (7.4) a (2.8) ostatní rovnosti z vlastností stopy (ověřte!). Obráceně, stopu lze napsat pomocí skalárního součinu jako

$$\text{tr} \mathbf{A} = \langle \mathbf{I}, \mathbf{A} \rangle. \quad (7.6)$$

Skalární součin (7.3) indukuje **normu matice** $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ jako

$$\|\mathbf{A}\| = \sqrt{\langle \mathbf{A}, \mathbf{A} \rangle} = \sqrt{\text{tr}(\mathbf{A}^T \mathbf{A})} = \sqrt{\text{tr}(\mathbf{A} \mathbf{A}^T)} = \left(\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n a_{ij}^2 \right)^{1/2}. \quad (7.7)$$

Podobně jako pro vektory (viz §4.4), skalární součin matic je invariantní vůči transformaci isometrií: jsou-li \mathbf{U}, \mathbf{V} matice s ortonormálními sloupci, je

$$\langle \mathbf{U} \mathbf{A} \mathbf{V}^T, \mathbf{U} \mathbf{B} \mathbf{V}^T \rangle = \text{tr}(\mathbf{V} \mathbf{A}^T \mathbf{U}^T \mathbf{U} \mathbf{B} \mathbf{V}^T) = \text{tr}(\mathbf{V} \mathbf{A}^T \mathbf{B} \mathbf{V}^T) = \text{tr}(\mathbf{A}^T \mathbf{B} \mathbf{V}^T \mathbf{V}) = \text{tr}(\mathbf{A}^T \mathbf{B}) = \langle \mathbf{A}, \mathbf{B} \rangle,$$

kde jsme použili cykličnost stopy. Tedy i norma (7.7) je invariantní vůči isometrii,

$$\|\mathbf{U} \mathbf{A} \mathbf{V}^T\| = \|\mathbf{A}\|. \quad (7.8)$$

Existují i jiné maticové normy. Maticová norma (7.7) se nazývá **Frobeniova norma** a pokud ji chceme odlišit od jiných norem, značíme ji $\|\cdot\|_F$.

7.3 Úloha na nejmenší stopu

Necht' $\mathbf{A} = \mathbf{V} \mathbf{\Lambda} \mathbf{V}^T$ je spektrální rozklad symetrické matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, tedy matice $\mathbf{\Lambda} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ je diagonální a $\mathbf{V} = [\mathbf{v}_1 \ \dots \ \mathbf{v}_n]$ je ortogonální. Předpokládáme přitom, že vlastní čísla jsou vzestupně seřazena, $\lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_n$, což lze vždy zařídit vhodnou permutací sloupců matice \mathbf{V} a diagonálních prvků matice $\mathbf{\Lambda}$.

Věta 7.1. *Platí*

$$\min\{ \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{x}^T \mathbf{x} = 1 \} = \lambda_1 \quad (7.9)$$

a minimální hodnota se nabývá pro $\mathbf{x} = \mathbf{v}_1$ (tedy pro normalizovaný vlastní vektor příslušný nejmenšímu vlastnímu číslu λ_1).

Důkaz. Pohleďme na rovnost (6.11). Protože \mathbf{V} je ortogonální a $\mathbf{y} = \mathbf{V}^T \mathbf{x}$, je $\mathbf{y}^T \mathbf{y} = \mathbf{x}^T \mathbf{V} \mathbf{V}^T \mathbf{x} = \mathbf{x}^T \mathbf{x}$ a tedy podmínka $\mathbf{x}^T \mathbf{x} = 1$ je ekvivalentní podmínce $\mathbf{y}^T \mathbf{y} = 1$. Tedy úloha (7.9) má stejnou minimální hodnotu jako úloha

$$\min\{ \mathbf{y}^T \mathbf{\Lambda} \mathbf{y} \mid \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{y}^T \mathbf{y} = 1 \} = \min\{ \lambda_1 y_1^2 + \dots + \lambda_n y_n^2 \mid y_1, \dots, y_n \in \mathbb{R}, y_1^2 + \dots + y_n^2 = 1 \}. \quad (7.10)$$

Je jasné (viz Cvičení 7.1), že minimum nastane když $y_1 = 1$ (tedy $y_2 = \dots = y_n = 0$), tj. pro $\mathbf{y} = \mathbf{e}_1$ (první vektor standardní báze). To odpovídá $\mathbf{x} = \mathbf{V} \mathbf{e}_1 = \mathbf{v}_1$ a $\mathbf{y}^T \mathbf{\Lambda} \mathbf{y} = \lambda_1$. \square

Všimněte si: Věta 7.1 netvrdí, že se minimum úlohy (7.9) nabývá vždy *pouze* ve vektoru \mathbf{v}_1 . Je-li vlastní číslo λ_1 násobné, nabývá se ve více bodech.

Rovnost (7.9) ukazuje, že nejmenší vlastní číslo lze získat řešením optimalizační úlohy. Zobecněním této úlohy lze postupně získat všechna vlastní čísla:

Věta 7.2. Necht' $k < n$. Platí

$$\min\{\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{x}^T \mathbf{x} = 1, \mathbf{v}_1^T \mathbf{x} = \dots = \mathbf{v}_k^T \mathbf{x} = 0\} = \lambda_{k+1} \quad (7.11)$$

a minimální hodnota se nabývá pro $\mathbf{x} = \mathbf{v}_{k+1}$.

Důkaz. Protože $\mathbf{v}_i = \mathbf{V} \mathbf{e}_i$, přechodem k souřadnicím $\mathbf{y} = \mathbf{V}^T \mathbf{x}$ úlohu převedeme na

$$\min\{\mathbf{y}^T \mathbf{\Lambda} \mathbf{y} \mid \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{y}^T \mathbf{y} = 1, \mathbf{e}_1^T \mathbf{y} = \dots = \mathbf{e}_k^T \mathbf{y} = 0\}.$$

Ale $\mathbf{e}_k^T \mathbf{y} = y_k$, tedy dodatečná podmínka říká $y_1 = \dots = y_k = 0$. Proto minimum nastane když $y_{k+1} = 1$, tedy pro $\mathbf{y} = \mathbf{e}_{k+1}$. To odpovídá $\mathbf{x} = \mathbf{V} \mathbf{e}_{k+1} = \mathbf{v}_{k+1}$ a $\mathbf{y}^T \mathbf{\Lambda} \mathbf{y} = \lambda_{k+1}$. \square

Úlohu (7.9) lze ale zobecnit i jiným způsobem:

Věta 7.3. Necht' $k \leq n$. Platí¹

$$\min\{\text{tr}(\mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X}) \mid \mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times k}, \mathbf{X}^T \mathbf{X} = \mathbf{I}\} = \lambda_1 + \dots + \lambda_k \quad (7.12)$$

a minimum se nabývá pro $\mathbf{X} = [\mathbf{v}_1 \ \dots \ \mathbf{v}_k]$.

Důkaz. (*) Máme $\text{tr}(\mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X}) = \text{tr}(\mathbf{X}^T \mathbf{V} \mathbf{\Lambda} \mathbf{V}^T \mathbf{X}) = \text{tr}(\mathbf{Y}^T \mathbf{\Lambda} \mathbf{Y})$, kde $\mathbf{X} = \mathbf{V} \mathbf{Y}$. Protože \mathbf{V} je ortogonální, $\mathbf{X}^T \mathbf{X} = \mathbf{I}$ platí právě když $\mathbf{Y}^T \mathbf{V}^T \mathbf{V} \mathbf{Y} = \mathbf{Y}^T \mathbf{Y} = \mathbf{I}$. Tedy úloha (7.12) má stejnou optimální hodnotu jako úloha

$$\min\{\text{tr}(\mathbf{Y}^T \mathbf{\Lambda} \mathbf{Y}) \mid \mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{n \times k}, \mathbf{Y}^T \mathbf{Y} = \mathbf{I}\}. \quad (7.13)$$

Řešme úlohu (7.13). Z vlastností stopy (viz §7.1) máme

$$\text{tr}(\mathbf{Y}^T \mathbf{\Lambda} \mathbf{Y}) = \text{tr}(\mathbf{Y} \mathbf{Y}^T \mathbf{\Lambda}) = \text{tr}(\mathbf{P} \mathbf{\Lambda}) = \lambda_1 p_{11} + \dots + \lambda_n p_{nn},$$

kde p_{11}, \dots, p_{nn} jsou diagonální prvky matice $\mathbf{P} = \mathbf{Y} \mathbf{Y}^T$.

Pro každou $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{n \times k}$ čísla p_{11}, \dots, p_{nn} splňují rovnost

$$p_{11} + \dots + p_{nn} = \text{tr} \mathbf{P} = \text{tr}(\mathbf{Y} \mathbf{Y}^T) = \text{tr}(\mathbf{Y}^T \mathbf{Y}) = \text{tr} \mathbf{I}_k = k.$$

Dále splňují nerovnosti $0 \leq p_{ii} \leq 1$ (viz Cvičení 4.20). Uvažujme úlohu

$$\min\{\lambda_1 p_{11} + \dots + \lambda_n p_{nn} \mid 0 \leq p_{11}, \dots, p_{nn} \leq 1, p_{11} + \dots + p_{nn} = k\}. \quad (7.14)$$

Tento jednoduchý lineární program vyřešíme úvahou (viz Cvičení ??): jeho optimální hodnota je $\lambda_1 + \dots + \lambda_k$ a optimální argument je dán jako $p_{11} = \dots = p_{kk} = 1$ a $p_{k+1, k+1} = \dots = p_{nn} = 0$.

Ale matici $\mathbf{P} = \mathbf{Y} \mathbf{Y}^T$ s těmito diagonálními prvky lze realizovat volbou $\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_k \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}$. Z toho $\mathbf{X} = \mathbf{V} \mathbf{Y} = [\mathbf{v}_1 \ \dots \ \mathbf{v}_k]$. \square

¹Namítnete, že úloha (7.12) není ve tvaru (1.11), protože optimalizujeme přes množinu matic a ne vektorů. To je ale jen záležitost značení, neboť matici rozměru $m \times n$ lze vidět jako vektor o mn složkách.

Všimněte si, že pro $k = n$ se rovnost (7.12) redukuje na rovnost (7.2), neboť pro každou ortogonální $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je $\text{tr}(\mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X}) = \text{tr}(\mathbf{X} \mathbf{X}^T \mathbf{A}) = \text{tr} \mathbf{A} = \lambda_1 + \dots + \lambda_k$.

Úloze (7.12) lze rozumět takto. Označme $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$ sloupce matice $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1 \ \dots \ \mathbf{x}_k]$. Podmínka $\mathbf{X}^T \mathbf{X} = \mathbf{I}$ říká, že $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k$ jsou ortonormální, $\mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j = \delta_{ij}$. Dále platí (ověřte!)

$$\text{tr}(\mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X}) = \mathbf{x}_1^T \mathbf{A} \mathbf{x}_1 + \dots + \mathbf{x}_k^T \mathbf{A} \mathbf{x}_k. \quad (7.15)$$

Tedy v úloze (7.12) hledáme ortonormální k -tici vektorů, které minimalizují součet (7.15).

Uvedeme ještě jiný tvar úlohy (7.12). Sloupce matice \mathbf{X} tvoří ortonormální bázi podprostoru $X = \text{rng} \mathbf{X}$. Každý vektor z podprostoru X je lineární kombinace $\mathbf{x} = \mathbf{X} \mathbf{y}$ vektorů báze, kde $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^k$ jsou souřadnice vektoru \mathbf{x} v této bázi. Tedy funkce

$$g(\mathbf{y}) = f(\mathbf{X} \mathbf{y}) = \mathbf{y}^T \mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X} \mathbf{y} \quad (7.16)$$

je zúžení (neboli *restrikce*) kvadratické formy $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$ na daný podprostor, vyjádřená v souřadnicích \mathbf{y} . Funkce g je kvadratická forma s maticí $\mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X}$. Její stopu

$$\text{tr}_X \mathbf{A} = \text{tr}(\mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X}) \quad (7.17)$$

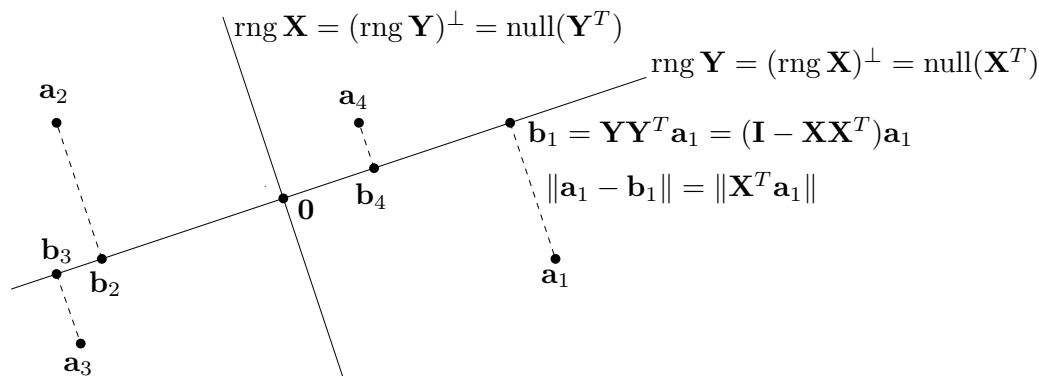
tedy můžeme nazvat *stopou matice \mathbf{A} na podprostoru X* . Aby tato definice byla smysluplná, je důležité, že výraz (7.17) nezávisí na tom, jakou ortonormální bázi podprostoru X zvolíme. Vskutku, pro každou ortogonální matici $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{k \times k}$ (viz Cvičení 4.16) je

$$\text{tr}[(\mathbf{X} \mathbf{U})^T \mathbf{A} (\mathbf{X} \mathbf{U})] = \text{tr}(\mathbf{U}^T \mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X} \mathbf{U}) = \text{tr}(\mathbf{U} \mathbf{U}^T \mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X}) = \text{tr}(\mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X}). \quad (7.18)$$

Tedy úlohu (7.12) můžeme formulovat ‘bezsouřadnicově’: hledáme podprostor $X \subseteq \mathbb{R}^n$ dimenze k , který minimalizuje $\text{tr}_X \mathbf{A}$. Proto se této úloze někdy říká *úloha na nejmenší stopu*.

7.4 Proložení bodů podprostorem

Necht’ jsou dány body $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m \in \mathbb{R}^n$ a přirozené číslo $k \leq n$. Hledejme lineární podprostor dimenze k prostoru \mathbb{R}^n , který minimalizuje součet čtverců vzdáleností k bodům $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m$. Ve statistice se této úloze říká *rozvoj podle hlavních komponent* (angl. *principal component analysis, PCA*) nebo *Karhunen-Loewův rozvoj*. Podotkněme, že úlohu nelze nijak převést na přibližné řešení lineární soustavy ve smyslu nejmenších čtverců, tedy úlohu (5.2).



Zjednodušíme formulaci úlohy tím, že vzdálenosti podprostoru k bodům vyjádříme explicitně (viz obrázek). Označme jako $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1 \ \cdots \ \mathbf{a}_m]^T \in \mathbb{R}^{m \times n}$ matici s řádky $\mathbf{a}_1^T, \dots, \mathbf{a}_m^T$. Místo hledaného podprostoru hledíme jeho ortogonální doplněk, reprezentovaný ortonormální bází tvořenou sloupci matice $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times (n-k)}$. Matice \mathbf{X} má $n - k$ sloupců, neboť dle Věty 4.1 je dimenze tohoto ortogonálního doplňku rovna $n - k$. Tedy hledaný podprostor je (dle (4.8a))

$$\text{rng } \mathbf{Y} = (\text{rng } \mathbf{X})^\perp = \text{null}(\mathbf{X}^T) = \{ \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{X}^T \mathbf{b} = \mathbf{0} \}. \quad (7.19)$$

Jak jsme odvodili v §4.6.2, vzdálenost bodu $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$ k podprostoru (7.19) je délka projekce na jeho ortogonální doplněk, tj. $\|\mathbf{X}\mathbf{X}^T \mathbf{a}\| = \|\mathbf{X}^T \mathbf{a}\|$. Součet čtverců vzdáleností všech bodů k podprostoru je

$$\|\mathbf{X}^T \mathbf{a}_1\|^2 + \cdots + \|\mathbf{X}^T \mathbf{a}_m\|^2 = \|\mathbf{A}\mathbf{X}\|^2,$$

kde $\|\mathbf{A}\mathbf{X}\|$ zde značí maticovou (Frobeniovu) normu (7.7) matice $\mathbf{A}\mathbf{X}$. Řešíme tedy úlohu

$$\min\{ \|\mathbf{A}\mathbf{X}\|^2 \mid \mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times (n-k)}, \mathbf{X}^T \mathbf{X} = \mathbf{I} \}. \quad (7.20)$$

Protože $\|\mathbf{A}\mathbf{X}\|^2 = \text{tr}(\mathbf{X}^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{X})$, úlohu (7.20) můžeme vyřešit pomocí Věty 7.3. Spočítáme spektrální rozklad $\mathbf{V}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^T = \mathbf{A}^T \mathbf{A}$ matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ (kde opět předpokládáme, že diagonální prvky matice $\mathbf{\Lambda}$ jsou vzestupně seřazeny). Rozdělíme-li (ortogonální) matici $\mathbf{V} = [\mathbf{X} \ \mathbf{Y}] \in \mathbb{R}^{n \times n}$ do dvou bloků $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times (n-k)}$ a $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{n \times k}$, pak \mathbf{X} je řešení úlohy (7.20) a (viz §4.6.1) sloupce \mathbf{Y} tvoří ortonormální bázi hledaného podprostoru (7.19). Tedy:

- Posledních k sloupců matice \mathbf{V} (tj. ortonormální vlastní vektory matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ odpovídající k největším vlastním číslům) tvoří ortonormální bázi lineárního podprostoru dimenze k , který minimalizuje součet čtverců vzdáleností k bodům $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m$.
- Prvních $n - k$ sloupců matice \mathbf{V} (tj. ortonormální vlastní vektory matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ odpovídající $n - k$ nejmenším vlastním číslům) tvoří ortonormální bázi ortogonálního doplňku tohoto podprostoru.

Všimněte si výhody: spočítáme-li jednou spektrální rozklad matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$, máme rovnou řešení úlohy pro všechna $k = 1, \dots, n$.

Příklad 7.1. Jsou dány body $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m$ v prostoru \mathbb{R}^3 , jež tvoří řádky matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times 3}$. Necht' $\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^T$ je spektrální rozklad matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$, kde $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3$ jsou sloupce matice $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ a $0 \leq \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \lambda_3$. Příмка procházející počátkem (tedy $k = 1$), která minimalizuje součet čtverců vzdáleností k bodům, je množina

$$(\text{span}\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2\})^\perp = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \mid \mathbf{v}_1^T \mathbf{x} = \mathbf{v}_2^T \mathbf{x} = 0 \} = \text{span}\{\mathbf{v}_3\}.$$

Rovina procházející počátkem (tedy $k = 2$), která minimalizuje součet čtverců vzdáleností k bodům, je množina

$$(\text{span}\{\mathbf{v}_1\})^\perp = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \mid \mathbf{v}_1^T \mathbf{x} = 0 \} = \text{span}\{\mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3\}. \quad \square$$

7.4.1 Nejbližší matice nižší hodnosti

Úlohu na optimální proložení bodů podprostorem jsme formulovali jako (7.20). Tuto úlohu lze ale formulovat i přímočařeji (viz obrázek výše): k daným bodům $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m \in \mathbb{R}^n$ hledáme body $\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_m \in \mathbb{R}^n$ ležící v podprostoru dimenze k takové, aby součet čtverců vzdálenosti

$$\|\mathbf{a}_1 - \mathbf{b}_1\|^2 + \cdots + \|\mathbf{a}_m - \mathbf{b}_m\|^2 = \|\mathbf{A} - \mathbf{B}\|^2 \quad (7.21)$$

bylo minimální. Výraz (7.21) jsme napsali i v maticové formě, kde $\mathbf{B} = [\mathbf{b}_1 \ \cdots \ \mathbf{b}_m]^T \in \mathbb{R}^{m \times n}$ označuje matici s řádky $\mathbf{b}_1^T, \dots, \mathbf{b}_m^T$. Body $\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_m$ leží v podprostoru dimenze k , právě když

$$\dim \text{span}\{\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_m\} = \dim \text{rng}(\mathbf{B}^T) = \text{rank}(\mathbf{B}^T) = \text{rank} \mathbf{B} \leq k.$$

Tedy naši úlohu jde napsat jako

$$\min\{ \|\mathbf{A} - \mathbf{B}\|^2 \mid \mathbf{B} \in \mathbb{R}^{m \times n}, \text{rank} \mathbf{B} \leq k \}. \quad (7.22)$$

Krátce, k dané matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ hledáme nejbližší (ve smyslu Frobeniovy normy) matici \mathbf{B} hodnosti nejvýše k . Tato úloha je angl. známa jako *low rank approximation*.

Z této úvahy plyne, že úlohy (7.20) a (7.22) mají stejnou optimální hodnotu. Zbývá zjistit, jak spočítat optimální řešení \mathbf{B} úlohy (7.22) z optimálního řešení \mathbf{X} úlohy (7.20). Je jasné, že známe-li podprostor, ve kterém leží body $\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_m$, pak tyto body musejí být ortogonálními projekcemi bodů $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m$ do tohoto podprostoru (jinak by totiž číslo $\|\mathbf{A} - \mathbf{B}\|$ šlo zmenšit posunutím bodů v tomto podprostoru). Je-li ortonormální báze tohoto podprostoru tvořena sloupci matice \mathbf{Y} , pak tedy $\mathbf{b}_i = \mathbf{Y}\mathbf{Y}^T \mathbf{a}_i$, což se maticově dá zapsat jako

$$\mathbf{B} = \mathbf{A}\mathbf{Y}\mathbf{Y}^T = \mathbf{A}(\mathbf{I} - \mathbf{X}\mathbf{X}^T), \quad (7.23)$$

kde druhá rovnost plyne z (4.25), předpokládáme-li stále $\mathbf{V} = [\mathbf{X} \ \mathbf{Y}]$.

Dle Věty 7.3 je optimální hodnota úloh (7.20) a (7.22) rovna

$$\lambda_1 + \cdots + \lambda_{n-k}, \quad (7.24)$$

kde $\lambda_1 \leq \cdots \leq \lambda_n$ je spektrum matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$. Číslo (7.24) je tedy čtverec vzdálenosti (měřené Frobeniovou normou) matice \mathbf{A} od nejbližší matice hodnosti nejvýše k . V tomto smyslu lze tedy spektrum matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ vidět jako jakési zobecnění hodnosti matice \mathbf{A} .

7.4.2 Co když prokládáme afinním podprostorem?

Změňme nyní úlohu (7.20) tak, že místo lineárního podprostoru hledáme *afinní* podprostor dimenze k , který minimalizuje součet čtverců vzdáleností k bodům $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m$.

Věta 7.4. *Necht' $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m \in \mathbb{R}^n$ a $k \leq n$. Afinní podprostor dimenze k , který minimalizuje součet čtverců vzdáleností k bodům $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m$, prochází těžištěm $\bar{\mathbf{a}} = \frac{1}{m}(\mathbf{a}_1 + \cdots + \mathbf{a}_m)$ těchto bodů.*

Důkaz. Hledaný afinní podprostor parametrizujme jako (srov. (7.19) a Věta 3.13)

$$\{ \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{X}^T \mathbf{b} = \mathbf{y} \}, \quad (7.25)$$

kde $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times (n-k)}$ je matice s ortonormálními sloupci a $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$. Vzdálenost bodu $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$ od tohoto podprostoru je $\|\mathbf{X}^T \mathbf{a} - \mathbf{y}\|$ (viz §4.6.2). Součet čtverců vzdáleností všech bodů k podprostoru je tedy

$$\|\mathbf{X}^T \mathbf{a}_1 - \mathbf{y}\|^2 + \cdots + \|\mathbf{X}^T \mathbf{a}_m - \mathbf{y}\|^2.$$

Tento výraz tedy musíme minimalizovat přes proměnné \mathbf{X} a \mathbf{y} za podmínky $\mathbf{X}^T \mathbf{X} = \mathbf{I}$. Pokud je \mathbf{X} libovolné pevné a minimalizujeme pouze přes \mathbf{y} , minimum se nabývá v bodě $\mathbf{y} = \mathbf{X}^T \bar{\mathbf{a}}$ (viz Příklad 1.14). Z toho plyne (proč?), že podprostor (7.25) obsahuje bod $\bar{\mathbf{a}}$. \square

Nyní je řešení jasné: nejprve posuneme body $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m$ tak, aby jejich těžiště leželo v počátku, a potom najdeme (lineární) podprostor minimalizující součet čtverců vzdáleností k posunutým bodům. Jeho posunutím zpět pak získáme kýžený afinní podprostor.

7.5 Přeurčené homogenní lineární soustavy

Řešme homogenní lineární soustavu

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{0}, \quad (7.26)$$

kde $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Její množinou řešení je null \mathbf{A} , což je lineární podprostor \mathbb{R}^n dimenze $n - \text{rank } \mathbf{A}$ viz (3.16). Může být homogenní soustava ‘přeurčená’? Přeurčenost není rozumné definovat jako u nehomogenní soustavy (viz §5.1), protože homogenní soustava má vždy triviální řešení $\mathbf{x} = \mathbf{0}$. Ovšem, kdybychom ‘přeurčenou’ soustavu (7.26) zkusili přibližně řešit jako minimalizaci $\|\mathbf{Ax}\|$, dostali bychom triviální optimální řešení $\mathbf{x} = \mathbf{0}$.

Abychom se tomu vyhnuli, můžeme navíc požadovat $\mathbf{x}^T \mathbf{x} = 1$. To tedy vede na úlohu

$$\min\{\|\mathbf{Ax}\| \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{x}^T \mathbf{x} = 1\}. \quad (7.27)$$

Protože $\|\mathbf{Ax}\|^2 = \mathbf{x}^T \mathbf{A}^T \mathbf{Ax}$, dle (7.9) je řešením této úlohy vlastní vektor matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ příslušný jejímu nejmenšímu vlastnímu číslu.

Příklad 7.2 (Přibližné proložení bodů kuželosečkou). Kuželosečka (viz §6.3.1) je množina

$$K = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid Q(x, y) = ax^2 + bxy + cy^2 + dx + ey + f = 0\}.$$

Budiž dáno m bodů $(x_1, y_1), \dots, (x_m, y_m) \in \mathbb{R}^2$, o kterých víme, že mají ležet na kuželosečce. Body jsou ale zatíženy šumem a tedy obecně nemusí existovat kuželosečka, která jimi prochází. Hledejme tedy kuželosečku, která je ‘nejbližší’ daným bodům. Jedna možná formulace této úlohy je, že hledáme čísla a, b, c, d, e, f , která minimalizují součet čtverců vzdáleností bodů od křivky. Vyřešit přesně tuto úlohu je ale obtížné.

Formulujme proto úlohu přibližně: hledejme čísla a, \dots, f , která minimalizují součet

$$Q(x_1, y_1)^2 + \dots + Q(x_m, y_m)^2. \quad (7.28)$$

Tato formulace ale nevyjadřuje to, co chceme, protože minimum výrazu (7.28) se nabývá pro $a = b = c = d = e = f = 0$. V tomto případě množina K není křivka, ale celá rovina \mathbb{R}^2 , což rozhodně nechceme. Ve skutečnosti navíc potřebujeme, aby aspoň jedno z čísel a, \dots, f bylo nenulové. Toho dosáhneme uvalením podmínky

$$a^2 + b^2 + c^2 + d^2 + e^2 + f^2 = 1. \quad (7.29)$$

Všimněte si, že pro každou kuželosečku můžeme dosáhnout splnění této podmínky, protože vynásobením vektoru (a, b, c, d, e, f) libovolným nenulovým číslem nezmění množinu K .

Minimalizace (7.28) za podmínky (7.29) se dá psát jako minimalizace $\|\mathbf{A}\boldsymbol{\theta}\|^2$ za podmínky $\boldsymbol{\theta}^T \boldsymbol{\theta} = 1$, kde

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} x_1^2 & x_1 y_1 & y_1^2 & x_1 & y_1 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_m^2 & x_m y_m & y_m^2 & x_m & y_m & 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\theta} = [a \ b \ c \ d \ e \ f]^T. \quad \square$$

Obecněji, soustavu (7.26) nazveme přeurčenou tehdy, když dimenze jejího prostoru řešení je nižší než nějaká předem známá dimenze $n - k$. Přibližné řešení soustavy pak vede na úlohu (7.20), která je ovšem ekvivalentní úloze (7.22). Úloha (7.22) odpovídá tomu, že co nejméně změněme matici \mathbf{A} , aby prostor řešení soustavy (7.26) měl kýženou dimenzi $n - k$. Neboli nejprve najdeme matici \mathbf{B} s hodnotí k nejbližší matici \mathbf{A} a potom řešíme soustavu $\mathbf{Bx} = \mathbf{0}$, jejíž prostor řešení již má dimenzi $n - k$.

Vztah k nehomogennímu případu. V §5.1 jsme formulovali přibližné řešení nehomogenní ($\mathbf{b} \neq \mathbf{0}$) soustavy $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ jako úlohu $\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|$. Může se zdát, že tato formulace je úplně odlišná od formulace přibližného řešení homogenní soustavy, kterou jsme uvedli zde. Ale tak tomu není. Formulujeme přibližné řešení nehomogenní soustavy takto: pokud soustava $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ nemá řešení, změňme vektor \mathbf{b} co nejméně tak, aby soustava řešení měla. Přesněji, hledáme vektor \mathbf{c} tak, aby pro nějaké \mathbf{x} platilo $\mathbf{Ax} = \mathbf{c}$ a přitom číslo $\|\mathbf{b} - \mathbf{c}\|$ bylo co nejmenší. Tuto úlohu lze napsat jako

$$\min\{\|\mathbf{b} - \mathbf{c}\| \mid \mathbf{Ax} = \mathbf{c}, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{c} \in \mathbb{R}^m\}.$$

Zde minimalizujeme přes proměnné \mathbf{x} a \mathbf{c} (nevadí, že \mathbf{x} se nevyskytuje v účelové funkci). Ale tato úloha jde zjednodušit: dosadíme $\mathbf{c} = \mathbf{Ax}$ do účelové funkce $\|\mathbf{b} - \mathbf{c}\|$, čímž dostaneme $\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|$. Shrňme:

- V přibližném řešení nehomogenní soustavy $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ chceme změnit vektor \mathbf{b} co nejméně tak, aby soustava měla řešení.
- V přibližném řešení homogenní soustavy $\mathbf{Ax} = \mathbf{0}$ chceme změnit matici \mathbf{A} co nejméně tak, aby soustava měla prostor řešení dané dimenze.

7.6 Singulární rozklad

Věta 7.5. Každou matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ lze rozložit jako

$$\mathbf{A} = \mathbf{USV}^T = s_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{v}_1^T + \cdots + s_p \mathbf{u}_p \mathbf{v}_p^T. \quad (7.30)$$

kde matice $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ je diagonální s diagonálními prvky s_1, \dots, s_p (kde $p = \min\{m, n\}$) a matice $\mathbf{U} = [\mathbf{u}_1 \ \cdots \ \mathbf{u}_m] \in \mathbb{R}^{m \times m}$ a $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n \times n} = [\mathbf{v}_1 \ \cdots \ \mathbf{v}_n]$ jsou ortogonální.

Rozklad (7.30) se nazývá **singulární rozklad** (*Singular Value Decomposition, SVD*) matice \mathbf{A} . Diagonální prvky s_1, \dots, s_p matice \mathbf{S} se nazývají **singulární čísla** matice \mathbf{A} . Upozorníme, že diagonální matice nemusí být čtvercová (viz začátek §2), diagonální matice rozměru $m \times n$ má $p = \min\{m, n\}$ diagonálních prvků. Singulární čísla je zvykem volit nezáporné, což lze vždy zajistit příp. vynásobením čísla s_i a jednoho z vektorů $\mathbf{u}_i, \mathbf{v}_i$ minus jedničkou. Sloupce $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_m$ matice \mathbf{U} nazývají levé **singulární vektory** a sloupce $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n$ matice \mathbf{V} pravé **singulární vektory** matice \mathbf{A} . Platí (např. z Věty 3.6) $\text{rank } \mathbf{A} = \text{rank } \mathbf{S}$, tedy hodnota matice je rovna počtu jejích nenulových **singulárních čísel**.

Rozklad $\mathbf{A} = \mathbf{USV}^T$ kde $\mathbf{S}, \mathbf{U}, \mathbf{V}$ mají rozměry jako ve Větě 7.5 se přesněji nazývá *plný* **singulární rozklad**. Pokud je \mathbf{A} obdélníková, pak posledních $m - p$ sloupců \mathbf{U} příp. $n - p$ sloupců \mathbf{V} je násobeno nulami (napište si!). Jejich vynecháním získáme *redukovaný* rozklad $\mathbf{A} = \mathbf{USV}^T$, kde $\mathbf{S} = \text{diag}(s_1, \dots, s_p) \in \mathbb{R}^{p \times p}$ je diagonální a $\mathbf{U} = [\mathbf{u}_1 \ \cdots \ \mathbf{u}_p] \in \mathbb{R}^{m \times p}$ a $\mathbf{V} = [\mathbf{v}_1 \ \cdots \ \mathbf{v}_p] \in \mathbb{R}^{n \times p}$ mají ortonormální sloupce.

Singulární čísla a vektory matice \mathbf{A} mají úzký vztah k vlastním číslům a vektorům matic $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ a $\mathbf{A} \mathbf{A}^T$. Předpokládáme, že rozklad (7.30) existuje. Pak

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{VS}^T \mathbf{U}^T \mathbf{USV}^T = \mathbf{VS}^T \mathbf{SV}^T, \quad (7.31a)$$

$$\mathbf{A} \mathbf{A}^T = \mathbf{USV}^T \mathbf{VS}^T \mathbf{U}^T = \mathbf{USS}^T \mathbf{U}^T. \quad (7.31b)$$

Ale to jsou spektrální rozklady (6.7) symetrických pozitivně definitních matic $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ a $\mathbf{A} \mathbf{A}^T$. Matice $\mathbf{S}^T \mathbf{S} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ a $\mathbf{S} \mathbf{S}^T \in \mathbb{R}^{m \times m}$ jsou diagonální a jejich nenulové diagonální prvky jsou

druhé mocniny nenulových diagonálních prvků matice \mathbf{S} . Tedy nenulová singulární čísla matice \mathbf{A} jsou druhé odmocniny nenulových vlastních čísel matic $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ a $\mathbf{A} \mathbf{A}^T$ (která jsou tudíž stejná, srov. Cvičení 6.6). Právě a levé singulární vektory jsou vlastní vektory těchto matic příslušné nenulovým vlastním číslům. Zdůrazněme, že (7.31) není ještě důkaz Věty 7.5, protože není jasné, zda matice získané nezávisle dvěma spektrálními rozklady (7.31) splňují (7.30).

Počítat SVD matice \mathbf{A} ze spektrálního rozkladu matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ nebo $\mathbf{A} \mathbf{A}^T$ není numericky vhodné, protože výpočet součinu $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ může vést ke zbytečným zaokrouhlovacím chybám (viz Příklad 5.2). Na SVD proto byly vymyšleny algoritmy, které se explicitnímu výpočtu $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ vyhýbají. Kdykoliv tedy hledáme vlastní čísla a vektory matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ (např. v úlohách (7.20) a (7.22)), měli bychom to dělat *pomocí SVD algoritmu*. Na druhou stranu, pokud nám možné snížení přesnosti nevadí, počítání SVD spektrálním rozkladem může být rychlejší: např. když $m \gg n$ a potřebujeme spočítat jen matice \mathbf{V} a \mathbf{S} (nepotřebujeme \mathbf{U}), spektrální rozklad matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ bude rychlejší (tato matice je malá, $n \times n$).

7.6.1 Nejblíže matice nižší hodnosti

V §7.4.1 jsme odvodili řešení úlohy (7.22) pomocí spektrálního rozkladu matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$. Následující klasická věta formuluje toto řešení elegantně pomocí SVD matice \mathbf{A} .

Věta 7.6 (Eckart-Young). *Necht' $\mathbf{A} = \mathbf{U} \mathbf{S} \mathbf{V}^T$ je SVD matice \mathbf{A} . Řešení úlohy (7.22) je*

$$\mathbf{B} = \mathbf{U} \mathbf{S}' \mathbf{V}^T = s_{p-k+1} \mathbf{u}_{p-k+1} \mathbf{v}_{p-k+1}^T + \cdots + s_p \mathbf{u}_p \mathbf{v}_p^T, \quad (7.32)$$

kde matice \mathbf{S}' se získá z matice \mathbf{S} vynulováním $p - k$ nejmenších diagonálních prvků (v sumě dyád tedy předpokládáme² $0 \leq s_1 \leq \cdots \leq s_p$).

Důkaz. V §7.4.1 jsme ukázali, že optimální řešení úlohy (7.22) je $\mathbf{B} = \mathbf{A} \mathbf{Y} \mathbf{Y}^T$ kde $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{n \times k}$ je druhý blok matice $\mathbf{V} = [\mathbf{X} \quad \mathbf{Y}]$ ve spektrálním rozkladu $\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{V} \mathbf{\Lambda} \mathbf{V}^T$. Ze vztahu singulárního rozkladu matice \mathbf{A} a spektrálního rozkladu matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ víme, že matici \mathbf{V} můžeme také získat ze singulárního rozkladu (7.30) matice \mathbf{A} . Je

$$\mathbf{B} = \mathbf{A} \mathbf{Y} \mathbf{Y}^T = \mathbf{U} \mathbf{S} \mathbf{V}^T \mathbf{Y} \mathbf{Y}^T = \mathbf{U} \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{I}_k \end{bmatrix} \mathbf{Y}^T = \mathbf{U} \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I}_k \end{bmatrix} \mathbf{V}^T = \mathbf{U} \mathbf{S}' \mathbf{V}^T. \quad \square$$

7.7 Cvičení

- 7.1. Řekli jsme, že řešení úlohy (7.10) se nabývá pro $y_1 = 1$ a $y_2 = \cdots = y_n = 0$ (kde předpokládáme, λ_1 je nejmenší z čísel $\lambda_1, \dots, \lambda_n$). Dokažte to přesně.
- 7.2. Vyřešte úlohu $\max \{ \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{x}^T \mathbf{x} = 1 \}$. Musí být matice \mathbf{A} symetrická?
- 7.3. Ukážeme, že úlohy (7.9) a (7.12) lze formulovat i tak, že podmínky na ortonormalitu vynecháme a zobecníme účelovou funkci.

- a) Pro čtvercovou matici \mathbf{A} je výraz $f(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}}{\mathbf{x}^T \mathbf{x}}$ znám jako **Rayleighův kvocient**. Dokažte, že $\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}} f(\mathbf{x}) = \min \{ \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{x}^T \mathbf{x} = 1 \}$.

²Pozor: singulární čísla je zvykem řadit sestupně (tak to dělá např. matlabská funkce `svd`), na rozdíl od vlastních čísel symetrické matice, která se obvykle řadí vzestupně (viz §7.3 a matlabská funkce `eig`). Zde pro jednoduchost značení řadíme obě vzestupně.

b) V §7.3 jsme ukázali, že stopa matice \mathbf{A} na podprostoru X nezávisí na tom, jakou ortonormální bázi podprostoru X zvolíme, tj. výraz (7.17) je stejný pro všechny matice $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times k}$ splňující $X = \text{rng } \mathbf{X}$ a $\mathbf{X}^T \mathbf{X} = \mathbf{I}$. Chceme najít obecnější výraz, který bude stejný pro všechny matice $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times k}$ splňující $X = \text{rng } \mathbf{X}$ a $\text{rank } \mathbf{X} = k$ (tedy báze už nemusí být ortonormální). Dokažte, že takovým výrazem je $\text{tr}(\mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1})$. Dokažte, že úloha $\min\{\text{tr}(\mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}) \mid \mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times k}, \text{rank } \mathbf{X} = k\}$ má stejnou optimální hodnotu jako úloha (7.12).

7.4. Jsou dány čtyři body $\mathbf{a}_1 = (3, -3, 4)$, $\mathbf{a}_2 = (-2, -3, -2)$, $\mathbf{a}_3 = (1, 0, -1)$, $\mathbf{a}_4 = (3, 1, 0)$ v \mathbb{R}^3 . Najděte podprostor $X \subseteq \mathbb{R}^3$, který minimalizuje součet čtverců kolmých vzdáleností bodů k podprostoru X , kde X je

- přímka procházející počátkem,
- rovina procházející počátkem,
- přímka která může ale nemusí procházet počátkem.

Vždy najděte vektor \mathbf{x}_0 a ortonormální bázi lineárního podprostoru X' tak, aby $X = \mathbf{x}_0 + X'$. Dále spočítejte ortogonální projekce bodů na podprostor X (je snad jasné, co myslíme projekcí na afinní podprostor) a souřadnice těchto projekcí v ortonormální bázi podprostoru X' . Použijte (a) spektrální rozklad, (b) SVD. Můžete použít počítač.

7.5. (★) Necht' v rozkladu (7.30) je $\sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_p$ a necht' $\text{rank } \mathbf{A} = r$. Dokažte, že prvních r sloupců matice \mathbf{U} tvoří ortonormální bázi prostoru $\text{rng } \mathbf{A}$ a prvních r sloupců matice \mathbf{V} tvoří ortonormální bázi prostoru $\text{rng}(\mathbf{A}^T)$.

7.6. (★) V Matlabu se báze nulového prostoru matice najde funkcí `null`; vypište si implementaci této funkce matlabským příkazem `edit null` a najděte souvislost se Cvičením 7.5.

7.7. Je dán spektrální rozklad dané symetrické matice. Jak byste z něho jednoduše našli SVD této matice?

7.8. Pro matici $\mathbf{A} = \frac{1}{15} \begin{bmatrix} -13 & 2 & -22 \\ -16 & 14 & -4 \end{bmatrix}$ najděte matici \mathbf{B} hodnosti jedna takovou, že $\|\mathbf{A} - \mathbf{B}\|$ je minimální. Pak spočtete $\|\mathbf{A} - \mathbf{B}\|$. Spočtete pomocí (a) spektrálního rozkladu, (b) SVD. Použijte počítač. Pokud byste počítali ručně, napovíme že $\mathbf{U} = \frac{1}{5} \begin{bmatrix} -3 & 4 \\ 4 & 3 \end{bmatrix}$.

7.9. Máme $n = 100$ bodů $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n \in \mathbb{R}^{10^6}$. Chceme najít podprostor dimenze k (kde $k < 100$) minimalizující součet čtverců vzdáleností k bodům. Jak to uděláme co nejefektivněji? Nápopověda: použijte výsledek Cvičení 6.6.

7.10. Dokažte, že rovnice $\mathbf{A}\mathbf{B} - \mathbf{B}\mathbf{A} = \mathbf{I}$ nemá řešení pro žádné \mathbf{A}, \mathbf{B} .

7.11. Dokažte, že následující dvě úlohy jsou stejné:

- Najdi podprostor takový, že součet čtverců vzdáleností daných bodů k tomuto podprostoru je minimální.
- Najdi podprostor takový, že součet čtverců délek ortogonálních projekcí daných bodů na tento podprostor je maximální.

7.12. Zjednodušte Příklad 7.2 tak, že místo kuželosečky chceme dané body proložit přímkou $\{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid ax + by + c = 0\}$. Děláme to opět tak, že minimalizujeme $\sum_i (ax_i + by_i + c)^2$ za podmínky $a^2 + b^2 + c^2 = 1$.

- a) Minimalizuje formulovaná úloha součet čtverců vzdáleností bodů k přímce, nebo jen jeho aproximaci (jako pro kuželosečku)?
- b) Co když místo omezení $a^2 + b^2 + c^2 = 1$ použijeme omezení $a^2 + b^2 = 1$? Co úloha vyjadřuje a jak ji vyřešíme?
- c) (★) Když v Příkladě 7.2 změňme omezení (7.29) na $a^2 + b^2 + c^2 + d^2 + e^2 = 1$ příp. na $a^2 + b^2 + c^2 = 1$, bude úloha minimalizovat přesný součet čtverců vzdáleností bodů ke kuželosečce?
- 7.13. (★) Dokažte, že $\max\{\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{y} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^m, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{x}^T \mathbf{x} = \mathbf{y}^T \mathbf{y} = 1\} = s_1$, kde s_1 je největší singulární číslo matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, a optimální argument je $\mathbf{u}_1, \mathbf{v}_1$, tedy levý a pravý singulární vektor příslušný singulárnímu číslu s_1 .
- 7.14. Někdo by mohl namítnout, že Věta 7.3 plyne okamžitě z Věty 7.2, neboť minimalizaci součtu $\mathbf{x}_1^T \mathbf{A} \mathbf{x}_1 + \dots + \mathbf{x}_k^T \mathbf{A} \mathbf{x}_k$ za podmínky $\mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j = \delta_{ij}$ jde provést takto: nejdříve minimalizujeme $\mathbf{x}_1^T \mathbf{A} \mathbf{x}_1$ za podmínky $\mathbf{x}_1^T \mathbf{x}_1 = 1$, což má řešení $\mathbf{x}_1 = \mathbf{v}_1$, pak \mathbf{x}_1 zafixujeme a minimalizujeme $\mathbf{x}_2^T \mathbf{A} \mathbf{x}_2$ za podmínky $\mathbf{x}_2^T \mathbf{x}_2 = 1$ a $\mathbf{x}_2^T \mathbf{x}_1 = 0$, což má řešení $\mathbf{x}_2 = \mathbf{v}_2$, atd.
- Ovšem tento ‘hladový’ (angl. *greedy*) algoritmus obecně nefunguje. Uvažujte zjednodušenou verzi úlohy: máme funkce $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ a $g: \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}$ a chceme minimalizovat součet $f(x_1) + \dots + f(x_k)$ za podmínky $g(x_1, \dots, x_k) = 0$, kde proměnné jsou čísla $x_1, \dots, x_k \in \mathbb{R}$. Najděte příklad funkcí f, g , pro které hladový algoritmus nenajde minimum této úlohy.
- 7.15. Do této chvíle jsme potkali již tři rozklady matic: QR, spektrální rozklad a SVD. Je ještě několik jiných užitečných rozkladů. Návrh algoritmů na operace s maticemi, řešení soustav lineárních rovnic a rozklady matic je předmětem *numerické lineární algebry*. Cílem je nalézt rychlé algoritmy, které jsou odolné vůči zaokrouhlovacím chybám. Existují volně dostupné softwarové balíky na numerickou lineární algebru. Matlab je postaven na balíku LAPACK. Jiný oblíbený balík je BLAS, který obsahuje funkce nižší úrovně než LAPACK. Najděte na internetu dokumentaci k balíkům LAPACK a BLAS a pochopte z ní co nejvíce!

Nápověda a řešení

- 7.1. Dokažte, že kdyby bylo $y_1 < 1$ (a tedy $y_2^2 + \dots + y_n^2 > 0$), tak bychom mohli hodnotu výrazu $\lambda_1 y_1^2 + \dots + \lambda_n y_n^2$ zmenšit bez porušení podmínky $y_1^2 + \dots + y_n^2 = 1$.
- 7.3.a) Klíčové je si všimnout, že $f(\alpha \mathbf{x}) = f(\mathbf{x})$ pro každé $\alpha \neq 0$ a $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$. To nám dovolí dokázat rovnost množin $\{f(\mathbf{x}) \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \setminus \{\mathbf{0}\}\} = \{\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{x}^T \mathbf{x} = 1\}$. Každý prvek z pravé množiny zřejmě patří také do levé množiny. Ale také každý prvek z levé množiny patří do pravé množiny, protože když vektor \mathbf{x} vydělíme číslem $\|\mathbf{x}\|$, bude $\mathbf{x}^T \mathbf{x} = 1$ a hodnota $f(\mathbf{x})$ se nezmění.
- 7.3.b) Z cykličnosti stopy je $\text{tr}(\mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}) = \text{tr}(\mathbf{A} \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T)$. Matice $\mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T$ je ortogonální projektor na podprostor \mathbf{X} . Ve Cvičení 5.11 jsme dokázali, že tento projektor nezávisí na změně báze.
- 7.4.a) $\mathbf{x}_0 = \mathbf{0}$, ortonorm. báze X' je např. $\{(0.6912, -0.2181, 0.6889)\}$.
- 7.4.b) $\mathbf{x}_0 = \mathbf{0}$, ortonorm. báze X' je např. $\{(0.6912, -0.2181, 0.6889), (-0.3771, -0.9221, 0.0864)\}$.
- 7.4.c) $\mathbf{x}_0 = (1.25, -1.25, 0.25)$, ortonorm. báze X' je např. $\{(0.6599, 0.0280, 0.7508)\}$.
- 7.10. Použijte cykličnost stopy.
- 7.13. Dosad'te $\mathbf{A} = \mathbf{U} \mathbf{S} \mathbf{V}^T$ (\mathbf{U}, \mathbf{V} ortogonální, $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{m \times n}$). Řešíme $\max\{\bar{\mathbf{x}}^T \mathbf{S} \bar{\mathbf{y}} \mid \bar{\mathbf{x}}^T \bar{\mathbf{x}} = \bar{\mathbf{y}}^T \bar{\mathbf{y}} = 1\}$. Máme $\bar{\mathbf{x}}^T \mathbf{S} \bar{\mathbf{y}} = \sum_{i=1}^p s_i \bar{x}_i \bar{y}_i = \sum_{i=1}^p s_i z_i$, kde $z_i = \bar{x}_i \bar{y}_i$. Platí $|z_i| \leq 1$ a $|\sum_i z_i| \leq 1$ (rozmyslete). Úloha $\max\{\sum_i s_i z_i \mid |z_i| \leq 1, |\sum_i z_i| \leq 1\}$ má optimální hodnotu s_1 a optimální argument je

$z_1 = 1$ a $z_i = 0$ pro $i \neq 1$. Taková čísla $z_i = \bar{x}_i \bar{y}_i$ lze ale realizovat volbou $\bar{\mathbf{x}} = \mathbf{e}_1$ a $\bar{\mathbf{y}} = \mathbf{e}_1$. Optimální argument původní úlohy je $\mathbf{x} = \mathbf{U}\bar{\mathbf{x}} = \mathbf{u}_1$ a $\mathbf{y} = \mathbf{V}\bar{\mathbf{y}} = \mathbf{v}_1$.

7.14. $f(x) = x$ a $g(x_1, \dots, x_k) = x_1^2 + \dots + x_k^2$. Necht' $k = 2$. Minimum je $x_1 = x_2 = 1/\sqrt{2}$. Hladový algoritmus ovšem v prvním kroku minimalizuje x_1 za podmínky $x_1^2 + x_2^2 = 1$, což dá $x_1 = -1$.

Část II

Nelineární optimalizace

Kapitola 8

Nelineární funkce a zobrazení

V předchozích kapitolách jsme potkali lineární a afinní zobrazení a kvadratické funkce. V této kapitole si zopakujeme základní fakta o obecných nelineárních funkcích $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ a zobrazeních $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ (zopakujte si značení funkcí a zobrazení z §1.1.3). Většinu z této kapitoly byste již měli znát z matematické analýzy funkcí jedné a více proměnných. I když v některých definicích použijeme pojem limity funkce více proměnných, student se bez znalosti tohoto pojmu obejde.

Většinu definic a vět vyslovíme jen pro funkce a zobrazení, jejichž definičním oborem je celé \mathbb{R}^n . To samozřejmě obecně neplatí, protože součástí definice funkce je i její definiční obor. Např. funkce $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ daná předpisem $f(x) = x^2$ a funkce $g: [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ daná předpisem $g(x) = x^2$ jsou dvě různé funkce. Podobně, funkce daná předpisem $f(x) = \sqrt{1 - x^2}$ není pro některá $x \in \mathbb{R}$ definována a jejím největším možným definičním oborem je interval $[-1, 1]$. Toto zjednodušení usnadní výklad a vždy bude očividné, jak by se látka zobecnila pro jiný definiční obor.

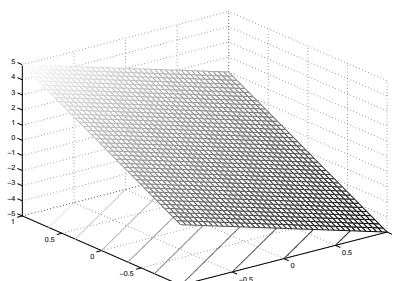
Pro funkci $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ užíváme tyto pojmy:

- **Graf** funkce f je množina $\{(\mathbf{x}, y) \in \mathbb{R}^{n+1} \mid f(\mathbf{x}) = y\} = \{(\mathbf{x}, f(\mathbf{x})) \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n\}$.
- **Vrstevnice** funkce f výšky y je množina $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid f(\mathbf{x}) = y\}$.

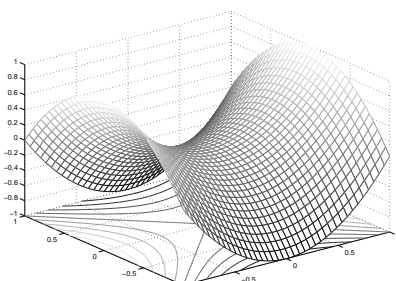
Příklad 8.1. Graf funkce $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ dané vzorcem $f(x) = x^2$ je množina $\{(x, y) \mid x^2 = y\}$. Vrstevnice funkce f výšky 1 je množina $\{x \mid x^2 = 1\} = \{-1, 1\}$.

Graf funkce $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ dané vzorcem $f(x, y) = x^2 + y^2$ je množina $\{(x, y, z) \mid x^2 + y^2 = z\}$. Vrstevnice funkce f výšky 1 je množina $\{(x, y) \mid x^2 + y^2 = 1\}$. \square

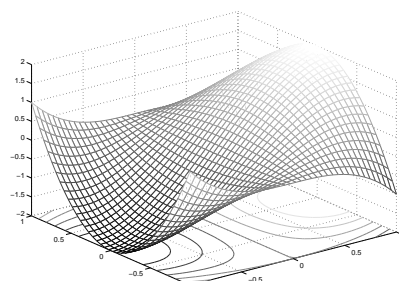
Příklad 8.2. Obrázek ukazuje část (na obdélníku $[-1, 1]^2$) grafu a vrstevnic funkcí $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$:



$$f(x, y) = -2x + 3y$$



$$f(x, y) = x^2 - y^2$$



$$f(x, y) = 3x - x^3 - 3xy^2$$

\square

Příklad 8.3. Příklady funkcí a zobrazení reálných proměnných:

1. $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = x^2$
2. $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}, f(x, y) = x^2 - y^2$
3. $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, f(\mathbf{x}) = a$ kde $a \in \mathbb{R}$ (konstantní funkce n proměnných)
4. $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, f(\mathbf{x}) = x_1$ (i když x_2, \dots, x_n chybí, f se rozumí jako funkce n proměnných)
5. $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, f(\mathbf{x}) = \mathbf{a}^T \mathbf{x} = a_1 x_1 + \dots + a_n x_n$ kde $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$ (lineární funkce)
6. $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, f(\mathbf{x}) = \mathbf{a}^T \mathbf{x} + b = a_1 x_1 + \dots + a_n x_n + b$ kde $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n, b \in \mathbb{R}$ (afinní funkce)
7. $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, f(\mathbf{x}) = e^{-\mathbf{x}^T \mathbf{x}}$ (nenormalizované Gaussovo rozdělení)
8. $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, f(\mathbf{x}) = \max_{i=1}^n x_i$
9. $\mathbf{f}: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^2, \mathbf{f}(t) = (\cos t, \sin t)$ (parametrizace kružnice, množina $\mathbf{f}([0, 2\pi])$ je kružnice)
10. $\mathbf{f}: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^3, \mathbf{f}(t) = (\cos t, \sin t, at)$ (parametrizace šroubovice neboli helixu)
11. $\mathbf{f}: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n, \mathbf{f}(t) = \mathbf{x} + t\mathbf{v}$ (parametrizace přímky jdoucí bodem \mathbf{x} ve směry \mathbf{v})
12. $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n, \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{x}$ (identické zobrazení neboli identita)
13. $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m, \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{a}$ kde $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^m$ (konstantní zobrazení)
14. $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m, \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{x}$ kde $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$
(lineární zobrazení; je to také parametrizace lineárního podprostoru $\mathbf{f}(\mathbb{R}^n) = \text{rng } \mathbf{A} \subseteq \mathbb{R}^m$)
15. $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m, \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b}$ kde $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$
(afinní zobrazení; je to také parametrizace afinního podprostoru $\mathbf{f}(\mathbb{R}^n) \subseteq \mathbb{R}^m$)
16. $\mathbf{f}: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3, \mathbf{f}(u, v) = ((R + r \cos v) \cos u, (R + r \cos v) \sin u, r \sin v)$
(parametrizace toru neboli anuloidu, množina $\mathbf{f}([0, 2\pi] \times [0, 2\pi])$ je torus)
17. *Skalární pole* (pojem z fyziky) je funkce $\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$. Např. teplotní pole přiřadí každému bodu prostoru teplotu.
18. *Vektorové pole* (opět z fyziky) je zobrazení $\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$. Např. elektrické pole přiřadí každému bodu v \mathbb{R}^3 vektor z \mathbb{R}^3 .
19. Při technice *image morphing* se obrázek např. obličejů zdeformuje na obrázek jiného obličejů. Morphing je tedy zobrazení $\mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ (kde obrázek pro jednoduchost považujeme za prostor \mathbb{R}^2). □

8.1 Spojitost

Spojitosť funkce lze definovat několika ekvivalentními způsoby. Uvedeme tento: zobrazení $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ je **spojité** v bodě $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, jestliže

$$\lim_{\mathbf{y} \rightarrow \mathbf{x}} \mathbf{f}(\mathbf{y}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}). \quad (8.1)$$

Tato definice ovšem není pohodlná, protože počítat limity funkcí více proměnných je obtížné. Uvedeme proto postačující (avšak nikoliv nutnou) podmínku pro spojitost, která v praxi většinou stačí. Přitom předpokládáme, že čtenář pouze dokáže ověřit spojitost funkcí jedné proměnné. Věta vlastně ukazuje, jak lze rekurzivně sestavit spojitá zobrazení více proměnných ze spojitých funkcí jedné proměnné. Důkaz věty vynecháme.

Věta 8.1.

1. Necht' funkce $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ je spojitá v bodě x . Necht' $k \in \{1, \dots, n\}$ a necht' funkce $g: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ je dána jako $g(x_1, \dots, x_n) = f(x_k)$ (tedy g závisí jen na proměnné x_k). Pak funkce g je spojitá v každém bodě (x_1, \dots, x_n) takovém, že $x_k = x$.
2. Necht' funkce $f, g: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ jsou spojité v bodě \mathbf{x} . Pak funkce $f + g$, $f - g$ a fg jsou spojité v bodě \mathbf{x} . Pokud $g(\mathbf{x}) \neq 0$, je funkce f/g spojitá v bodě \mathbf{x} .
3. Necht' $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ je spojitá v bodě \mathbf{x} a $g: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ je spojitá v bodě $y = f(\mathbf{x})$. Pak složená funkce $g \circ f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ je spojitá v bodě \mathbf{x} .
4. Necht' funkce $f_1, \dots, f_m: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ jsou spojité v bodě \mathbf{x} . Pak zobrazení $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ definované jako $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (f_1(\mathbf{x}), \dots, f_m(\mathbf{x}))$ je spojité v bodě \mathbf{x} .

Příklad 8.4. Z věty snadno ukážeme, že např. funkce dvou proměnných

$$f(x, y) = \sin(x + y^2) \quad (8.2)$$

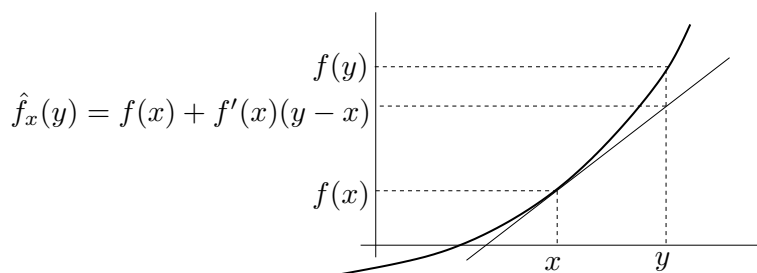
je spojitá. Podle 1 je x spojitá funkce dvou proměnných (x, y) . Podobně, y^2 je spojitá funkce proměnných (x, y) . Podle 2 je proto funkce $x + y^2$ spojitá. Protože funkce \sin je spojitá, podle 3 je funkce $\sin(x + y^2)$ spojitá. Takto jsme 'rekurzivně' dokázali spojitost celé funkce. \square

8.2 Derivace funkce jedné proměnné

Zopakujme pojmy diferencovatelnosti a derivace funkce jedné proměnné. Funkce $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ je *diferencovatelná* v bodě $x \in \mathbb{R}$ tehdy, existuje-li limita

$$\lim_{y \rightarrow x} \frac{f(y) - f(x)}{y - x} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{f(x + \alpha) - f(x)}{\alpha}. \quad (8.3)$$

V tom případě se hodnota limity (8.3) nazývá *derivace* funkce f v bodě x . Tuto derivaci značíme jedním ze symbolů $\frac{df(x)}{dx}$ nebo $f'(x)$. Symbol $\frac{df}{dx}: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ nebo $f': \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ označuje funkci, která bodu $x \in \mathbb{R}$ přiřadí derivaci funkce f v bodě x .



Diferencovatelnost a derivaci lze definovat i jiným, ekvivalentním způsobem: funkce f je diferencovatelná v bodě x tehdy, lze-li ji v okolí bodu x 'dobře' aproximovat afinní funkcí. Upřesněme tento výrok. Označme naši afinní funkci jako $\hat{f}_x: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ a píšme ji ve tvaru¹

$$\hat{f}_x(y) = f(x) + a(y - x), \quad (8.4)$$

¹Někdo raději píše $f(x + \alpha) \approx f(x) + a\alpha$, což je samozřejmě stejné jako (8.4) dosazením $y = x + \alpha$.

Všimněte si, že pro každé $a \in \mathbb{R}$ je $\hat{f}_x(x) = f(x)$. Funkce \hat{f}_x je opravdu afinní (viz (3.5)), protože $\hat{f}_x(y) = ay + b$ kde $b = f(x) - ax$. Funkce f je *diferencovatelná* v bodě x právě tehdy, když existuje číslo a takové, že chyba aproximace $f(y) - \hat{f}_x(y)$ se pro $y \rightarrow x$ v prvním řádu blíží nule, tedy

$$\lim_{y \rightarrow x} \frac{f(y) - \hat{f}_x(y)}{y - x} = \lim_{y \rightarrow x} \frac{f(y) - f(x) - a(y - x)}{y - x} = 0. \quad (8.5)$$

V tom případě se číslu a říká *derivace* funkce f v bodě x .

Obě definice jsou ekvivalentní, neboť

$$\lim_{y \rightarrow x} \frac{f(y) - f(x) - a(y - x)}{y - x} = \lim_{y \rightarrow x} \left(\frac{f(y) - f(x)}{y - x} - a \right) = \lim_{y \rightarrow x} \frac{f(y) - f(x)}{y - x} - a. \quad (8.6)$$

Tedy limita (8.3) existuje a je rovna a , právě když limita (8.5) existuje a je rovna nule.

8.3 Parciální derivace

Parciální derivaci funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ podle i -té proměnné v bodě \mathbf{x} značíme jedním ze symbolů $\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i}$ nebo $f_{x_i}(\mathbf{x})$. Spočítáme ji tak, že všechny proměnné x_j , $j \neq i$, považujeme za konstanty a zderivujeme funkci podle jediné proměnné x_i . Symbol $\frac{\partial f}{\partial x_i}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ nebo $f_{x_i}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ pak označuje funkci, která přiřazuje bodu $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ parciální derivaci funkce f podle i -té proměnné v bodě \mathbf{x} .

Příklad 8.5. Parciální derivace funkce (8.2) jsou

$$\frac{\partial f(x, y)}{\partial x} = f_x(x, y) = \cos(x + y^2), \quad (8.7a)$$

$$\frac{\partial f(x, y)}{\partial y} = f_y(x, y) = 2y \cos(x + y^2). \quad (8.7b)$$

□

8.4 Derivace zobrazení

Jak se dají pojmy diferencovatelnosti a derivace zobecnit z funkce $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ na zobrazení $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$? Mohli bychom si myslet, že toho lze dosáhnout nějakým zobecněním limity (8.3), tudy ale cesta nevede. Cesta vede přes alternativní definici diferencovatelnosti (8.5). Zkusme zobrazení v blízkosti bodu \mathbf{x} aproximovat afinním zobrazením

$$\hat{\mathbf{f}}_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \mathbf{A}(\mathbf{y} - \mathbf{x}), \quad (8.8)$$

kde $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Zobrazení \mathbf{f} je **diferencovatelné** v bodě \mathbf{x} , jestliže existuje matice \mathbf{A} taková, že chyba aproximace $\mathbf{f}(\mathbf{y}) - \hat{\mathbf{f}}_{\mathbf{x}}(\mathbf{y})$ se pro $\mathbf{y} \rightarrow \mathbf{x}$ v prvním řádu blíží nule, tedy

$$\lim_{\mathbf{y} \rightarrow \mathbf{x}} \frac{\mathbf{f}(\mathbf{y}) - \hat{\mathbf{f}}_{\mathbf{x}}(\mathbf{y})}{\|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|} = \lim_{\mathbf{y} \rightarrow \mathbf{x}} \frac{\mathbf{f}(\mathbf{y}) - \mathbf{f}(\mathbf{x}) - \mathbf{A}(\mathbf{y} - \mathbf{x})}{\|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|} = \mathbf{0}. \quad (8.9)$$

Všimněte si, že tato limita nejde zjednodušit jako jsme to udělali v (8.6).

Definice (8.9) není pro ověřování diferencovatelnosti pohodlná, protože počítání limit funkcí více proměnných je obtížné. Uvedeme proto postačující (ne však nutnou) podmínku pro diferencovatelnost, která nám většinou stačí. Zobrazení \mathbf{f} je v bodě \mathbf{x} **spojitě diferencovatelné**, jestliže v bodě \mathbf{x} existují všechny parciální derivace $\partial f_i(\mathbf{x})/\partial x_j$ a funkce $\partial f_i/\partial x_j$ jsou v tomto bodě spojité.

Věta 8.2. *Je-li zobrazení v bodě spojité diferencovatelné, je v tomto bodě diferencovatelné.*

Příklad 8.6. Obě parciální derivace (8.7) funkce (8.2) jsou spojité funkce na celém \mathbb{R}^2 (neboť splňují předpoklady Věty 8.1). Proto je funkce (8.2) spojité diferencovatelná (a tedy diferencovatelná) na celém \mathbb{R}^2 . \square

Pozor: pouhá existence všech parciálních derivací pro diferencovatelnost nestačí.

V případě, že je zobrazení \mathbf{f} je v bodě \mathbf{x} diferencovatelné, má matice \mathbf{A} přirozený tvar: její složky jsou parciální derivace všech složek zobrazení podle všech proměnných²:

$$\mathbf{A} = \frac{d\mathbf{f}(\mathbf{x})}{d\mathbf{x}} = \mathbf{f}'(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m(\mathbf{x})}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_m(\mathbf{x})}{\partial x_n} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n}. \quad (8.10)$$

Matice (8.10) se nazývá **totální derivace**³ (nebo krátce jen **derivace**) zobrazení \mathbf{f} v bodě \mathbf{x} . Z historických důvodů se jí říká také **Jacobiho matice**. Funkci, která bodu $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ přiřazuje (totální) derivaci zobrazení \mathbf{f} v bodě \mathbf{x} , značíme $\frac{d\mathbf{f}}{d\mathbf{x}}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{m \times n}$ nebo $\mathbf{f}': \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{m \times n}$.

Pamatujte speciální případy:

- Pro $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ je $f'(x)$ skalár a splývá s obyčejnou derivací (8.3).

- Pro $\mathbf{f}: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^m$ je $\mathbf{f}'(x) = \begin{bmatrix} f'_1(x) \\ \vdots \\ f'_m(x) \end{bmatrix}$ sloupcový vektor, jehož složky jsou derivace složek \mathbf{f} .

- Pro $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ je $f'(\mathbf{x}) = \left[\frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_1} \quad \dots \quad \frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_n} \right]$ řádkový vektor.

8.4.1 Derivace složeného zobrazení

Známé ‘řetízkové pravidlo’ pro derivaci složených funkcí jedné proměnné lze přirozeným způsobem rozšířit na zobrazení. Důkaz následující věty není krátký a nebudeme ho uvádět.

Věta 8.3. *Necht' $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ a $\mathbf{g}: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^l$ jsou diferencovatelná zobrazení. Derivace složeného zobrazení $\mathbf{g} \circ \mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^l$ je*

$$(\mathbf{g} \circ \mathbf{f})'(\mathbf{x}) = \frac{d\mathbf{g}(\mathbf{f}(\mathbf{x}))}{d\mathbf{x}} = \mathbf{g}'(\mathbf{f}(\mathbf{x})) \mathbf{f}'(\mathbf{x}). \quad (8.11)$$

Dimenze zúčastněných prostorů lze přehledně znázornit diagramem (viz §1.1.2)

$$\mathbb{R}^n \xrightarrow{\mathbf{f}} \mathbb{R}^m \xrightarrow{\mathbf{g}} \mathbb{R}^l.$$

²Někdo matici (8.10) značí také $D\mathbf{f}(\mathbf{x})$, ale my to tak značit nebudeme.

³Někdy se místo pojmu ‘totální derivace’ používá pojem ‘totální diferenciál’. Tyto pojmy jsou si podobné ale ne identické: totální derivace je *matice* a totální diferenciál je *lineární zobrazení* reprezentované touto maticí.

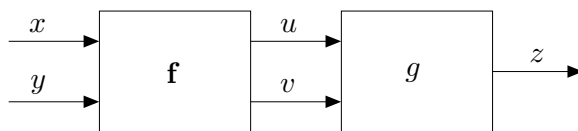
Pokud píšeme $\mathbf{u} = \mathbf{f}(\mathbf{x})$ a $\mathbf{y} = \mathbf{g}(\mathbf{u})$, pravidlo lze psát také v Leibnizově značení jako

$$\frac{d\mathbf{y}}{d\mathbf{x}} = \frac{d\mathbf{y}}{d\mathbf{u}} \frac{d\mathbf{u}}{d\mathbf{x}}, \quad (8.12)$$

což se dobře pamatuje, protože $d\mathbf{u}$ se ‘jakoby vykrátí’ (což ale není důkaz ničeho!). Zdůrazněme, že tato rovnost je *násobení matic*. Výraz na levé straně je matice $l \times n$, první výraz na pravé straně je matice $l \times m$ a druhý výraz na pravé straně je matice $m \times n$. Pro $l = m = n = 1$ dostaneme řetězkové pravidlo pro derivaci složení funkcí jedné proměnné. Pravidlo se dá zjevným způsobem rozšířit na složení více než dvou zobrazení: *Jacobiho matice složeného zobrazení je součinem Jacobiho matic jednotlivých zobrazení.*

Příklad 8.7. Necht' $g: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ je diferencovatelná funkce. Hledejme (totální) derivaci funkce $h(x, y) = g(x + y, xy)$ podle vektoru (x, y) , tedy matici $\begin{bmatrix} \frac{\partial h(x,y)}{\partial x} & \frac{\partial h(x,y)}{\partial y} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{1 \times 2}$.

Máme $\mathbb{R}^2 \xrightarrow{\mathbf{f}} \mathbb{R}^2 \xrightarrow{g} \mathbb{R}$, kde $\mathbf{f}(x, y) = (u, v) = (x + y, xy)$. Označme $z = g(u, v)$. Viz obrázek:



Derivace zobrazení g podle vektoru (u, v) je matice 1×2 (řádkový vektor)

$$g'(u, v) = \begin{bmatrix} \frac{\partial g(u,v)}{\partial u} & \frac{\partial g(u,v)}{\partial v} \end{bmatrix} = [g_u(u, v) \quad g_v(u, v)].$$

Derivace zobrazení \mathbf{f} podle vektoru (x, y) je matice 2×2

$$\mathbf{f}'(x, y) = \frac{d\mathbf{f}(x, y)}{d(x, y)} = \begin{bmatrix} \frac{\partial(x+y)}{\partial x} & \frac{\partial(x+y)}{\partial y} \\ \frac{\partial(xy)}{\partial x} & \frac{\partial(xy)}{\partial y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ y & x \end{bmatrix}.$$

Derivace zobrazení $h = g \circ \mathbf{f}: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ podle vektoru (x, y) je matice 1×2 (řádkový vektor)

$$\begin{aligned} \frac{dh(x, y)}{d(x, y)} &= \frac{dg(\mathbf{f}(x, y))}{d(x, y)} = g'(u, v)\mathbf{f}'(x, y) \\ &= [g_u(u, v) \quad g_v(u, v)] \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ y & x \end{bmatrix} \\ &= [g_u(u, v) + yg_v(u, v) \quad g_u(u, v) + xg_v(u, v)], \end{aligned}$$

kde $u = x + y$ a $v = xy$. □

Příklad 8.8. Ukažme dva způsoby, jak najít parciální derivaci h_x funkce $h(x, y) = e^{(x+y)^2+(xy)^2}$:

- Považujeme y za konstantu a derivujeme h jako funkci jedné proměnné x :

$$h_x(x, y) = [2(x + y) + 2(xy)y]e^{(x+y)^2+(xy)^2} = 2(x + y + xy^2)e^{(x+y)^2+(xy)^2}.$$

- Položíme $u = x + y$, $v = xy$, $g(u, v) = e^{u^2+v^2}$. Z Příkladu 8.7 máme $h_x = g_u + yg_v$. Jelikož

$$g_u(u, v) = 2ue^{u^2+v^2}, \quad g_v(u, v) = 2ve^{u^2+v^2},$$

máme $h_x(x, y) = g_u + yg_v = 2ue^{u^2+v^2} + y(2v)e^{u^2+v^2} = 2(x + y + xy^2)e^{(x+y)^2+(xy)^2}$. □

Příklad 8.9. Máme diferencovatelnou funkci $g: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ a chceme spočítat derivaci funkce $g(t + t^2, \sin t)$ podle t .

Máme $\mathbb{R} \xrightarrow{\mathbf{f}} \mathbb{R}^2 \xrightarrow{g} \mathbb{R}$, kde $\mathbf{f}(t) = (u, v) = (t + t^2, \sin t)$. Je

$$\frac{dg(t + t^2, \sin t)}{dt} = g'(u, v)\mathbf{f}'(t) = [g_u(u, v) \quad g_v(u, v)] \begin{bmatrix} 1 + 2t \\ \cos t \end{bmatrix} = g_u(u, v)(1 + 2t) + g_v(u, v) \cos t.$$

□

8.4.2 Derivace maticových výrazů

Je-li zobrazení zadáno výrazem obsahujícím vektory a matice, jeho (totální) derivaci lze obvykle napsat také jako výraz obsahující tyto vektory a matice. Naučme se této dovednosti.

Příklad 8.10. Odvodme derivaci zobrazení $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ daného vzorcem $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b}$, kde $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ a $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$. Máme

$$\begin{aligned} f_1(\mathbf{x}) &= a_{11}x_1 + \cdots + a_{1n}x_n + b_1 \\ &\vdots \\ f_m(\mathbf{x}) &= a_{m1}x_1 + \cdots + a_{mn}x_n + b_m. \end{aligned}$$

Ale $\partial f_i(\mathbf{x})/\partial x_j = a_{ij}$, tedy dle (8.10) je $\mathbf{f}'(\mathbf{x}) = \mathbf{A}$. Tomu se nedivíme, neboť zobrazení \mathbf{f} je afinní, tedy jeho afinní aproximace (8.8) musí být ono samo. Opravdu: pravá strana výrazu (8.8) je pro libovolné \mathbf{x} rovna $\mathbf{A}\mathbf{y} + \mathbf{b}$. □

Příklad 8.11. Počítejme derivaci zobrazení $\mathbf{g}(\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b})$ podle \mathbf{x} , kde $\mathbf{g}: \mathbb{R}^l \rightarrow \mathbb{R}^m$, $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{l \times n}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^l$. V řetízkovém pravidle máme $\mathbb{R}^n \xrightarrow{\mathbf{f}} \mathbb{R}^l \xrightarrow{\mathbf{g}} \mathbb{R}^m$, kde $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b}$. Je $\mathbf{f}'(\mathbf{x}) = \mathbf{A}$, tedy

$$\frac{d\mathbf{g}(\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b})}{d\mathbf{x}} = \mathbf{g}'(\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b})\mathbf{A}. \quad (8.13)$$

□

Příklad 8.12. Odvodme derivaci kvadratické formy $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$,

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{A}\mathbf{x} = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n a_{ij}x_i x_j, \quad (8.14)$$

kde $\mathbf{A} = [a_{ij}] \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je (ne nutně symetrická) čtvercová matice. Derivace monomu $x_i x_j$ je

$$\frac{\partial(x_i x_j)}{\partial x_k} = \begin{cases} x_j & \text{když } k = i, \\ x_i & \text{když } k = j, \\ 0 & \text{jinak.} \end{cases}$$

Tedy

$$\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_k} = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n a_{ij} \frac{\partial(x_i x_j)}{\partial x_k} = \sum_{i=1}^n (a_{ik} + a_{ki})x_i = (\mathbf{a}_k + \mathbf{b}_k)^T \mathbf{x} = \mathbf{x}^T (\mathbf{a}_k + \mathbf{b}_k),$$

kde $\mathbf{a}_k = (a_{1k}, \dots, a_{nk})$ je k -tý sloupec a $\mathbf{b}_k^T = (a_{k1}, \dots, a_{kn})^T$ je k -tý řádek matice \mathbf{A} . Tedy

$$f'(\mathbf{x}) = \left[\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1} \quad \cdots \quad \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_n} \right] = \mathbf{x}^T [\mathbf{a}_1 + \mathbf{b}_1 \quad \cdots \quad \mathbf{a}_n + \mathbf{b}_n] = \mathbf{x}^T (\mathbf{A} + \mathbf{A}^T). \quad (8.15)$$

□

Následující tabulka uvádí derivace jednoduchých zobrazení (odvod'te je jako cvičení!), které je dobré si pamatovat. S pomocí zapamatovaných derivací jednoduchých zobrazení a řetízkového pravidla nakonec totální derivace odvozujeme s trochou cviku rovnou v maticovém tvaru.

zobrazení	(totální) derivace	poznámka
$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{x}$	$\mathbf{f}'(\mathbf{x}) = \mathbf{I}$	$\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$
$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b}$	$\mathbf{f}'(\mathbf{x}) = \mathbf{A}$	$\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m, \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$
$f(\mathbf{x}) = \mathbf{a}^T \mathbf{x}$	$f'(\mathbf{x}) = \mathbf{a}^T$	$f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, \mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$
$f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{x}$	$f'(\mathbf{x}) = 2\mathbf{x}^T$	$f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$
$f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{A}\mathbf{x}$	$f'(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T (\mathbf{A} + \mathbf{A}^T)$	$f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$
$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{g}(\mathbf{x})$	$\mathbf{f}'(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{g}'(\mathbf{x})$	$\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m, \mathbf{g}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^l, \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times l}$
$f(\mathbf{x}) = \ \mathbf{x}\ $	$f'(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T / \ \mathbf{x}\ $	$f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$
$f(\mathbf{x}) = \mathbf{g}(\mathbf{x})^T \mathbf{g}(\mathbf{x})$	$f'(\mathbf{x}) = 2\mathbf{g}(\mathbf{x})^T \mathbf{g}'(\mathbf{x})$	$f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, \mathbf{g}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$
$f(\mathbf{x}) = \mathbf{g}(\mathbf{x})^T \mathbf{h}(\mathbf{x})$	$f'(\mathbf{x}) = \mathbf{g}(\mathbf{x})^T \mathbf{h}'(\mathbf{x}) + \mathbf{h}(\mathbf{x})^T \mathbf{g}'(\mathbf{x})$	$f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, \mathbf{g}, \mathbf{h}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$

8.5 Směrová derivace

Řez zobrazení $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ v bodě $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ ve směru⁴ $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$ je zobrazení $\varphi: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^m$ dané jako

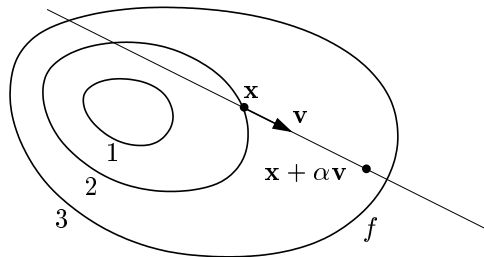
$$\varphi(\alpha) = \mathbf{f}(\mathbf{x} + \alpha\mathbf{v}). \quad (8.16)$$

Směrová derivace⁵ zobrazení \mathbf{f} v bodě \mathbf{x} ve směru \mathbf{v} je vektor

$$\varphi'(0) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\varphi(\alpha) - \varphi(0)}{\alpha} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\mathbf{f}(\mathbf{x} + \alpha\mathbf{v}) - \mathbf{f}(\mathbf{x})}{\alpha}, \quad (8.17)$$

kde $\varphi'(0)$ označuje derivaci zobrazení φ v bodě $\alpha = 0$, tedy vektor se složkami $\varphi'_1(0), \dots, \varphi'_m(0)$. Směrová derivace existuje právě tehdy, když derivace $\varphi'_1(0), \dots, \varphi'_m(0)$ existují.

Pojem směrové derivace se geometricky snadněji představí pro případ $m = 1$, tedy pro funkci $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Obrázek ilustruje situaci pro funkci $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$:



Vidíme, že parciální derivace funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ není nic jiného než její směrová derivace ve směru i -tého vektoru standardní báze $\mathbf{e}_i = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$ (jednička na i -tém místě).

Věta 8.4. *Necht' zobrazení $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ je diferencovatelné v bodě \mathbf{x} . Pak jeho směrová derivace v bodě \mathbf{x} ve směru \mathbf{v} je rovna $\mathbf{f}'(\mathbf{x})\mathbf{v}$.*

⁴Někdy se řez a směrová derivace uvažují jen pro *normalizované* vektory \mathbf{v} , tj. $\|\mathbf{v}\| = 1$, protože ty lépe zachycují pojem směru. Mnoho autorů (a my také) však dovoluje libovolný vektor \mathbf{v} .

⁵Přesněji jde o *oboustrannou* směrovou derivaci. Jednostrannou směrovou derivaci bychom dostali, kdybychom místo oboustranné limity (8.17) vzali jednostrannou limitu zprava.

Důkaz. Zobrazení $\mathbf{y} = \varphi(\alpha) = \mathbf{f}(\mathbf{x} + \alpha\mathbf{v})$ je složením zobrazení $\mathbf{y} = \mathbf{f}(\mathbf{u})$ a $\mathbf{u} = g(\alpha) = \mathbf{x} + \alpha\mathbf{v}$. Máme diagram $\mathbb{R} \xrightarrow{g(\alpha)=\mathbf{u}} \mathbb{R}^n \xrightarrow{\mathbf{f}(\mathbf{u})=\mathbf{y}} \mathbb{R}^m$. Je $g'(\alpha) = \mathbf{v}$. Podle řetízkového pravidla je

$$\varphi'(\alpha) = \mathbf{f}'(g(\alpha))g'(\alpha) = \mathbf{f}'(g(\alpha))\mathbf{v}.$$

Ale $g(0) = \mathbf{x}$ a tedy $\varphi'(0) = \mathbf{f}'(\mathbf{x})\mathbf{v}$. □

Věta 8.4 říká, že je-li zobrazení \mathbf{f} diferencovatelné, je jeho směrová derivace (v pevném bodě \mathbf{x}) lineární zobrazení směru \mathbf{v} reprezentované Jacobiho maticí $\mathbf{f}'(\mathbf{x})$. Zdůrazněme, že nic takového neplatí, pokud zobrazení \mathbf{f} není diferencovatelné.

Příklad 8.13. Spočítáme směrovou derivaci funkce $f(x, y) = \sin(x + y^2)$ v bodě (x, y) ve směru (u, v) dvěma způsoby: nejdříve z definice (8.17) a pak z Věty 8.4. Z definice je

$$\begin{aligned}\varphi(\alpha) &= \sin(x + \alpha u + (y + \alpha v)^2), \\ \varphi'(\alpha) &= (u + 2v(y + \alpha v)) \cos(x + \alpha u + (y + \alpha v)^2), \\ \varphi'(0) &= (u + 2vy) \cos(x + y^2).\end{aligned}$$

Podle Věty 8.4 je směrová derivace rovna

$$uf_x(x, y) + vf_y(x, y) = u \cos(x + y^2) + 2vy \cos(x + y^2) = (u + 2vy) \cos(x + y^2),$$

což je stejné jako předešlý výsledek. □

8.6 Gradient

Sloupcový vektor parciálních derivací funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ se nazývá její **gradient** a značí se

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_n} \end{bmatrix} = f'(\mathbf{x})^T$$

(∇ čteme ‘nabla’). Je to tedy transpozice Jacobiho matice $f'(\mathbf{x})$, což je řádkový vektor⁶.

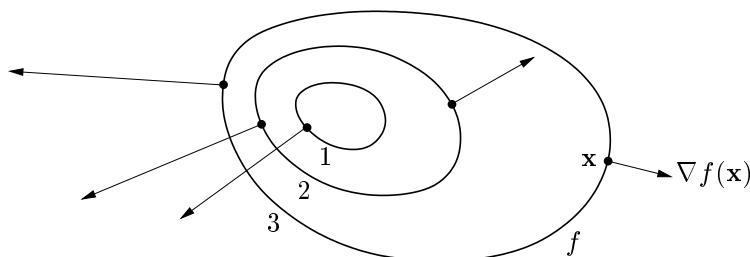
Zkoumejme směrovou derivaci v pevném bodě \mathbf{x} pro různé normalizované směry \mathbf{v} (tedy $\|\mathbf{v}\| = 1$). Tato derivace je rovna $f'(\mathbf{x})\mathbf{v} = \nabla f(\mathbf{x})^T \mathbf{v}$, což je skalární součin gradientu v bodě \mathbf{x} a vektoru \mathbf{v} . Je jasné (ale promyslete!), že:

- Směrová derivace je největší ve směru $\mathbf{v} = \nabla f(\mathbf{x})/\|\nabla f(\mathbf{x})\|$, tedy když je \mathbf{v} rovnoběžný s gradientem a stejně orientovaný. Tedy směr gradientu je *směr největšího růstu* funkce.
- Velikost gradientu $\|\nabla f(\mathbf{x})\|$ je strmota funkce ve směru největšího růstu.
- Směrová derivace ve směru kolmém na gradient je nulová.

⁶Zavedení nového slova pro transpozici derivace se zdá zbytečné – důvod je ale v tom, že totální diferenciál je *lineární forma*, kdežto gradient je *vektor*. Toto rozlišení by bylo důležité, kdybychom uvažovali derivaci funkce $f: V \rightarrow \mathbb{R}$ kde V je obecný (normovaný) vektorový prostor (tj. ne nutně \mathbb{R}^n). Literatura bohužel není jednotná v rozlišování gradientu a (totální) derivace funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Někdy se obojí ztotožňuje a značí $\nabla f(\mathbf{x})$. To ale vede mj. k nekonzistenci s maticovým značením, protože derivace funkce $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ pak není speciálním případem derivace zobrazení $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ (tedy Jacobiho matice) pro $m = 1$, což je řádkový vektor.

Dále lze ukázat (viz diskuze v §??), že gradient je vždy *kolmý k vrstevnici*.

Obrázek ukazuje tři vrstevnice funkce $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ a její gradienty v několika bodech:



8.7 Parciální derivace druhého řádu

Zderivujeme-li funkci $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ nejdříve podle proměnné x_i a pak podle proměnné x_j , dostaneme parciální derivaci druhého řádu, kterou značíme

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i} = \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_i \partial x_j}.$$

Je-li $i = j$, píšeme zkráceně

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i} = \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_i^2}.$$

Věta 8.5. Necht' $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ a $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$. Jestliže druhé parciální derivace

$$\frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_i \partial x_j}, \quad \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_j \partial x_i}$$

v bodě \mathbf{x} existují a jsou v tomto bodě spojité, pak jsou si rovny.

Příklad 8.14. Určeme všechny druhé parciální derivace funkce $f(x, y) = \sin(x + y^2)$ z Příkladu 8.4. První derivace už tam máme. Nyní druhé derivace:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x^2} &= \frac{\partial}{\partial x}(\cos(x + y^2)) = -\sin(x + y^2), \\ \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x \partial y} &= \frac{\partial}{\partial y}(\cos(x + y^2)) = -2y \sin(x + y^2), \\ \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial y \partial x} &= \frac{\partial}{\partial x}(2y \cos(x + y^2)) = -2y \sin(x + y^2), \\ \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial y^2} &= \frac{\partial}{\partial y}(2y \cos(x + y^2)) = 2 \cos(x + y^2) - 4y^2 \sin(x + y^2). \end{aligned}$$

Vidíme, že vskutku nezáleží na pořadí derivování podle x a podle y . □

Pro funkci $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ budeme značit matici všech druhých parciálních derivací

$$f''(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_1 \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_n \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_n \partial x_n} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n}.$$

Dle Věty 8.5 je tato matice symetrická. Často se jí říká **Hessova matice**.

Co by byla druhá derivace zobrazení $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$? Nebyla by to již dvojrozměrná tabulka (tedy matice) velikosti $n \times n$, nýbrž třírozměrná tabulka velikosti $m \times n \times n$.

8.8 Taylorův polynom

Necht' funkce $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ má v bodě x derivace až do řádu k . Její **Taylorův polynom** stupně k v bodě x je polynom $T_x^k: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ takový, že v bodě x má všechny derivace až do řádu k stejné jako funkce f . V tomto smyslu je polynom T_x^k aproximací funkce f v okolí bodu x .

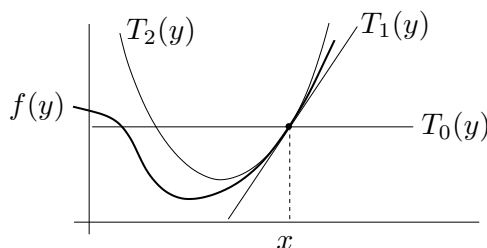
Taylorův polynom je tímto požadavkem definován jednoznačně a má tvar (odvoďte!)

$$T_x^k(y) = \sum_{i=0}^k \frac{1}{i!} f^{(i)}(x) (y-x)^i, \quad (8.18)$$

kde $f^{(i)}$ označuje i -tou derivaci funkce f (kde nultá derivace je funkce sama, $f^{(0)} = f$) a kde klademe $0! = 1$. Tvary polynomu až do stupně dva:

$$\begin{aligned} T_x^0(y) &= f(x), \\ T_x^1(y) &= f(x) + f'(x)(y-x), \\ T_x^2(y) &= f(x) + f'(x)(y-x) + \frac{1}{2}f''(x)(y-x)^2. \end{aligned}$$

Taylorův polynom nultého stupně T_x^0 je hodně špatná aproximace, rovná jednoduše konstantní funkci. Polynom prvního stupně T_x^1 je roven funkci \hat{f}_x v (8.4). Polynom druhého stupně T_x^2 je parabola, která má s funkcí f v bodě x společnou hodnotu a první dvě derivace. Viz obrázek:



Jak zobecnit Taylorův polynom pro funkci více proměnných $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$? Definujme Taylorův polynom k -tého stupně (funkce f v okolí bodu \mathbf{x}) jako polynom $T_{\mathbf{x}}^k: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, který má v bodě \mathbf{x} všechny parciální derivace až do řádu k stejné jako funkce f . Nebudeme uvádět vzorec pro polynom libovolného stupně, budou nám stačit jen polynomy do stupně dva:

$$T_{\mathbf{x}}^0(\mathbf{y}) = f(\mathbf{x}), \quad (8.19a)$$

$$T_{\mathbf{x}}^1(\mathbf{y}) = f(\mathbf{x}) + f'(\mathbf{x})(\mathbf{y} - \mathbf{x}), \quad (8.19b)$$

$$T_{\mathbf{x}}^2(\mathbf{y}) = f(\mathbf{x}) + f'(\mathbf{x})(\mathbf{y} - \mathbf{x}) + \frac{1}{2}(\mathbf{y} - \mathbf{x})^T f''(\mathbf{x})(\mathbf{y} - \mathbf{x}). \quad (8.19c)$$

Zde $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$, $f'(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^{1 \times n}$ je Jacobiho matice (řádkový vektor) a $f''(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je Hessova matice. Funkce (8.19b) je afinní a funkce (8.19c) je kvadratická.

Taylorův polynom lze zobecnit na zobrazení $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ tak, že vezmeme Taylorovy polynomy všech složek f_1, \dots, f_m . Polynom prvního stupně tak vede na zobrazení

$$\mathbf{T}_{\mathbf{x}}^1(\mathbf{y}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \mathbf{f}'(\mathbf{x})(\mathbf{y} - \mathbf{x}), \quad (8.20)$$

což je ale zobrazení $\hat{\mathbf{f}}_{\mathbf{x}}$ ve (8.8). Polynom druhého stupně vede na zobrazení $\mathbf{T}_{\mathbf{x}}^2$, jehož složky jsou funkce (8.19c). To nejde napsat v maticové formě, protože všech $m \times n \times n$ druhých parciálních derivací se 'nevejde' do matice.

Příklad 8.15. Najděte Taylorův polynom druhého stupně funkce $f(x, y) = x^{-1} + y^{-1} + xy$ v bodě $(x_0, y_0) = (2, 1)$. Máme

$$\begin{aligned} f(x_0, y_0) &= x^{-1} + y^{-1} + xy \Big|_{(x,y)=(2,1)} = \frac{7}{2}, \\ f'(x_0, y_0) &= [y - x^{-2} \quad x - y^{-2}] \Big|_{(x,y)=(2,1)} = \left[\frac{3}{4} \quad 1 \right], \\ f''(x_0, y_0) &= \begin{bmatrix} 2x^{-3} & 1 \\ 1 & 2y^{-3} \end{bmatrix} \Big|_{(x,y)=(2,1)} = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Dle (8.19c) je (pozor, naše proměnné jsou označené jinak než v (8.19c))

$$\begin{aligned} T_{(2,1)}^2(x, y) &= f(x_0, y_0) + f'(x_0, y_0) \begin{bmatrix} x - x_0 \\ y - y_0 \end{bmatrix} + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} x - x_0 \\ y - y_0 \end{bmatrix}^T f''(x_0, y_0) \begin{bmatrix} x - x_0 \\ y - y_0 \end{bmatrix} \\ &= \frac{7}{2} + \left[\frac{3}{4} \quad 1 \right] \begin{bmatrix} x - 2 \\ y - 1 \end{bmatrix} + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} x - 2 \\ y - 1 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x - 2 \\ y - 1 \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{8}x^2 + xy + y^2 - \frac{3}{4}x - 3y + \frac{9}{2}. \end{aligned} \quad \square$$

8.9 Vnitřek a hranice množiny

Označme jako

$$B_\varepsilon(\mathbf{x}) = \{ \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n \mid \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| < \varepsilon \} \quad (8.21)$$

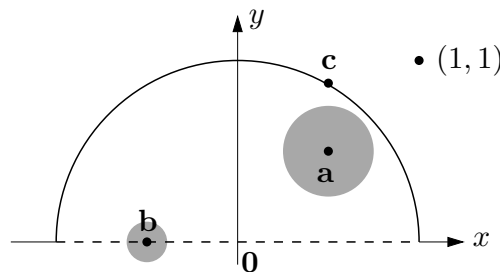
n -rozměrnou kouli bez hranice⁷ se středem $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ a poloměrem $\varepsilon > 0$. Všimněte si, že pro speciální případ $n = 1$ (tedy $x \in \mathbb{R}$) je množina (8.21) interval $B_\varepsilon(x) = (x - \varepsilon, x + \varepsilon)$.

Mějme nyní množinu $X \subseteq \mathbb{R}^n$. Bod $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ se nazývá její

- **vnitřní bod**, jestliže existuje $\varepsilon > 0$ takové, že $B_\varepsilon(\mathbf{x}) \subseteq X$,
- **hraniční bod**, jestliže pro každé $\varepsilon > 0$ je $B_\varepsilon(\mathbf{x}) \cap X \neq \emptyset$ a $B_\varepsilon(\mathbf{x}) \cap (\mathbb{R}^n \setminus X) \neq \emptyset$.

Všimněte si, že hraniční bod množiny nemusí patřit do této množiny. Pokud leží bod v množině, je buď vnitřní nebo hraniční, ale ne obojí najednou (dokažte!). **Vnitřek** [hranice] množiny je množina všech jejích vnitřních [hraničních] bodů.

Příklad 8.16. Máme množinu $\{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid x^2 + y^2 \leq 1, y > 0\} \cup \{(1, 1)\}$ na obrázku:



⁷Mohli bychom použít i kouli s hranicí $\{ \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n \mid \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| \leq \varepsilon \}$. Podobně, norma v (8.21) může být eukleidovská, ale i libovolná jiná vektorová p -norma (viz §??). Vnitřek a hranice každé množiny by se tím nezměnila.

Bod \mathbf{a} je vnitřní bod množiny, protože existuje koule (s nenulovým poloměrem!) se středem \mathbf{a} , která celé leží v množině. Bod \mathbf{b} je hraniční, protože každá koule se středem \mathbf{b} má neprázdný průnik s množinou i s jejím doplňkem. Všimněte si, že \mathbf{b} nepatří do množiny. Bod \mathbf{a} není hraniční a bod \mathbf{b} není vnitřní. Bod \mathbf{c} není vnitřní, je hraniční a patří do množiny. Bod $(1, 1)$ (který patří do množiny, viz její definice výše) je hraniční. \square

Příklad 8.17. Bod $1/2$ je vnitřní bod intervalu $(0, 1] \subseteq \mathbb{R}$ a body 0 a 1 jsou hraniční. \square

Příklad 8.18. Množina $[0, 1] \times \{1\} = \{(x, y) \mid 0 \leq x \leq 1, y = 1\} \subseteq \mathbb{R}^2$ (úsečka v rovině) nemá žádné vnitřní body. Všechny její body jsou hraniční, je tedy sama svou vlastní hranicí. \square

Příklad 8.19. Kružnice v rovině $\{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid x^2 + y^2 = 1\}$ nemá žádné vnitřní body, všechny její body jsou hraniční. Podobně pro n -rozměrnou sféru $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \|\mathbf{x}\| = 1\}$. \square

Příklad 8.20. Mějme kruh bez hranice $\{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid x^2 + y^2 < 1\}$. Všechny jeho body jsou vnitřní. Jeho hranice je kružnice $\{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid x^2 + y^2 = 1\}$. Podobně pro n -rozměrnou kouli bez hranice $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \|\mathbf{x}\| < 1\}$. \square

8.10 Lokální extrémů funkce na množině

Zopakujme (§1.3), že funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ nabývá na množině $X \subseteq \mathbb{R}^n$ v bodě $\mathbf{x} \in X$ svého

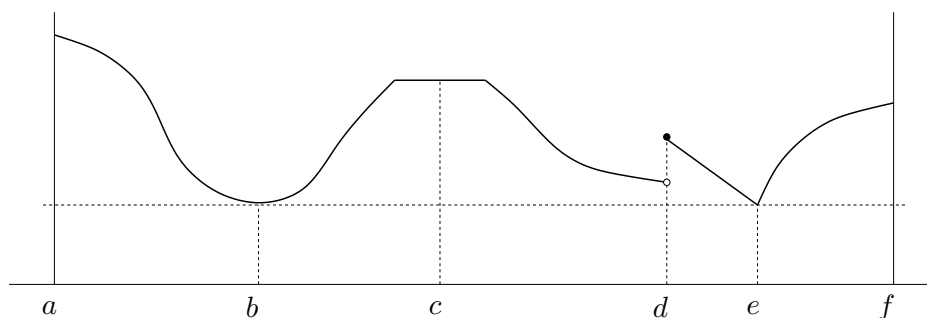
- *minima*, jestliže $f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x}')$ pro všechna $\mathbf{x}' \in X$,
- *ostrého minima*, jestliže $f(\mathbf{x}) < f(\mathbf{x}')$ pro všechna $\mathbf{x}' \in X \setminus \{\mathbf{x}\}$.

Funkce f nabývá na množině X v bodě \mathbf{x} svého **[ostrého] lokálního minima**, jestliže existuje $\varepsilon > 0$ tak, že funkce f nabývá na množině $X \cap B_\varepsilon(\mathbf{x})$ svého [ostrého] minima. Maximum, lokální maximum a jejich ostré verze se definují obdobně.

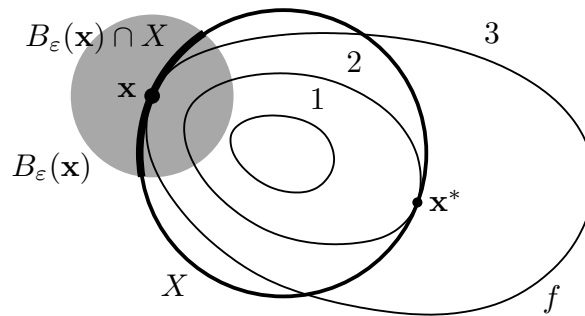
Každé minimum funkce f je zároveň lokální minimum funkce f (proč?), naopak to ale obecně neplatí. Mluvíme-li o lokálních extrémech, pro zdůraznění někdy ‘obyčejné’ extrémy nazýváme **globální extrémy**. Pokud odkaz na množinu X chybí, myslí se jí celý definiční obor funkce f .

Každý bod množiny $X \subseteq \mathbb{R}^n$ je buď vnitřní nebo hraniční. Extrém \mathbf{x} (globální či lokální) funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ na množině X je **volný** když \mathbf{x} je vnitřní bod množiny X , a **vázaný** když \mathbf{x} je hraniční bod množiny X .

Příklad 8.21. Funkce jedné proměnné na obrázku nabývá na uzavřeném intervalu $[a, f] \subseteq \mathbb{R}$ v bodě a globálního (a tedy i lokálního) maxima, v bodech b, e globálního (a tedy i lokálního) minima, v bodě c lokálního maxima a zároveň lokálního minima, v bodě d lokálního maxima, v bodě f lokálního maxima. Extrémy v bodech a, b, d, e, f jsou ostré. Extrémy v bodech a, f jsou vázané, v bodech b, c, d, e jsou volné. \square



Příklad 8.22. Necht' $X \subseteq \mathbb{R}^2$ je kružnice a funkce $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ má vrstevnice jako na obrázku:



V bodě \mathbf{x}^* nabývá funkce f na množině X globálního (a tedy i lokálního) minima, protože v žádném bodě na kružnici X nemá funkce menší hodnotu než $f(\mathbf{x}^*) = 2$. V bodě \mathbf{x} nabývá funkce f na množině X lokálního minima, protože existuje $\varepsilon > 0$ tak, že funkce f nabývá na části kružnice $B_\varepsilon(\mathbf{x}) \cap X$ svého (globálního) minima. Oba extrémů jsou vázané, protože body \mathbf{x}^* a \mathbf{x} jsou hraniční body množiny X (množina X vnitřní body nemá, viz Příklad 8.19). \square

Příklad 8.23. Funkce $f(\mathbf{x}) = x_1$ má na množině $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \|\mathbf{x}\| \leq 1\}$ vázané globální (a tedy i lokální) minimum v bodě $(-1, 0, \dots, 0)$. \square

Příklad 8.24. Libovolná funkce $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ má na množině \mathbb{Z} (množina celých čísel) v libovolném bodě $x \in \mathbb{Z}$ lokální minimum i lokální maximum. \square

8.11 Cvičení

- 8.1. Najděte parametrizaci válce. Přesněji, najděte zobrazení $\mathbf{f}: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$ tak, aby množina $\mathbf{f}([0, 2\pi) \times \mathbb{R})$ byla nekonečný válec o poloměru r bez podstav.
- 8.2. Máme množiny $X = [-1, 1] \times \{0\}$ a $Y = [-1, 1] \times [-1, 1]$. Načrtněte následující množiny:
 - a) $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 \mid 1 \geq \min_{\mathbf{y} \in X} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|\}$
 - b) $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 \mid 2 \geq \max_{\mathbf{y} \in X} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|\}$
 - c) vrstevnice výšky 1 funkce $f(\mathbf{x}) = \min_{\mathbf{y} \in Y} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|$
 - d) vrstevnice výšky $\sqrt{2}$ funkce $f(\mathbf{x}) = \max_{\mathbf{y} \in Y} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|$
- 8.3. Máme funkci $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ danou vzorcem $f(x, y) = \ln(1 + xy)$. Máme bod $(x_0, y_0) = (1, 2)$.
 - a) Je funkce f v bodě (x_0, y_0) spojitá?
 - b) Je funkce f v bodě (x_0, y_0) spojitě diferencovatelná?
 - c) Je funkce f v bodě (x_0, y_0) diferencovatelná?
 - d) Najdi totální derivaci (Jacobiho matici) $f'(x, y)$ funkce f v bodě (x_0, y_0) .
 - e) Najdi gradient $\nabla f(x, y)$ funkce f v bodě (x_0, y_0) .
 - f) Najdi řez a směrovou derivaci funkce f v bodě (x_0, y_0) ve směru $(1, -1)$.
 - g) Najdi Hessovu matici funkce f v bodě (x_0, y_0) .
- 8.4. Funkce $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ je dána vzorcem $f(x, y) = \max\{x, y\}$. Ve kterých bodech je tato funkce spojitě diferencovatelná? Odpověď odůvodněte.
- 8.5. Najdi totální derivaci (Jacobiho matici) zobrazení 1, 2, 4, 6, 9, 12, 14, 15 z Příkladu 8.3.

8.6. Necht' $f(x, y)$ je diferencovatelná funkce dvou proměnných.

- Spočítej derivaci f podle polárních souřadnic (φ, r) , kde $x = r \cos \varphi$, $y = r \sin \varphi$.
- Bod (x, y) se v čase t pohybuje po křivce dané rovnicí $(x, y) = (t^2 + 2t, \log(t^2 + 1))$. Najděte derivaci f podle času.

8.7. Necht' $f(x, y)$ je diferencovatelná funkce dvou proměnných. Spočítej derivaci funkce $g(\mathbf{u}) = f(\mathbf{a}^T \mathbf{u}, \|\mathbf{u}\|)$ podle vektoru \mathbf{u} .

8.8. Odvod' co nejjednodušší vzorec pro totální derivaci (Jacobiho matici) těchto zobrazení. Kde je to možné, odvod' nejdříve přímým výpočtem a pak řetízkovým pravidlem.

- $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{x} = \|\mathbf{x}\|^2$
- $f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\| = \sqrt{\mathbf{x}^T \mathbf{x}}$
- $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{g}(\mathbf{x})^T \mathbf{h}(\mathbf{x})$ (kde $\mathbf{g}, \mathbf{h}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ jsou dána)
- $f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{g}(\mathbf{x})\|$

8.9. Odvod' totální derivaci (8.15) kvadratické formy, nepoužij ale postup z Příkladu 8.12 ale použij vzorec $(\mathbf{g}(\mathbf{x})^T \mathbf{h}(\mathbf{x}))' = \mathbf{g}(\mathbf{x})^T \mathbf{h}'(\mathbf{x}) + \mathbf{h}(\mathbf{x})^T \mathbf{g}'(\mathbf{x})$.

8.10. Nadmořská výška krajiny je dána vzorcem $h(d, s) = 2s^2 + 3sd - d^2 + 5$, kde d je zeměpisná délka (zvětšuje se od západu k východu) a s je zeměpisná šířka (zvětšuje se od jihu k severu). V bodě $(d, s) = (-1, 1)$ určete

- směr nejstrmějšího stoupání terénu
- strmost terénu v jihovýchodním směru.

V této úloze je logické uvažovat směr jako normalizovaný vektor.

8.11. Spočítejte druhou derivaci $f''(\mathbf{x})$ (Hessovu matici) těchto funkcí:

- $f(x, y) = e^{-x^2 - y^2}$
- $f(x, y) = \log(e^x + e^y)$
- $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$ (matice \mathbf{A} je dána, nemusí být symetrická)
- $f(\mathbf{x}) = \mathbf{g}(\mathbf{x})^T \mathbf{g}(\mathbf{x})$ (zobrazení $\mathbf{g}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ je dáno)
- $f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|$

8.12. Je dána funkce $f(x, y) = 6xy^2 - 2x^3 - 3y^3$. V bodě $(x_0, y_0) = (1, -2)$ najděte Taylorův polynom nultého, prvního a druhého stupně.

8.13. Čemu je roven Taylorův polynom prvního stupně polynomu prvního stupně (tj. afinní funkce)? A čemu je roven Taylorův polynom druhého stupně polynomu druhého stupně (tj. kvadratické funkce)? Proč?

8.14. *Metoda konečných diferencí* počítá derivaci funkce přibližně jako

$$f'(x) \approx \frac{f(x + \alpha) - f(x)}{\alpha},$$

kde α je malé číslo (dobrá volba je $h = \sqrt{\varepsilon}$, kde ε je strojová přesnost). Toto jde použít i na parciální derivace. Vymyslete si dvě zobrazení $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ a $\mathbf{g}: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^l$ pro nějaké navzájem různé dimenze $n, m, l > 1$. Zvolte bod $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$. Spočítejte přibližně totální derivace (Jacobiho matice) $\mathbf{f}'(\mathbf{x})$ a $\mathbf{g}'(\mathbf{f}(\mathbf{x}))$ v Matlabu metodou konečných diferencí. Potom spočítejte derivaci složeného zobrazení $(\mathbf{g} \circ \mathbf{f})'(\mathbf{x})$ jednak metodou konečných diferencí a jednak vynásobením matic $\mathbf{f}'(\mathbf{x})$ a $\mathbf{g}'(\mathbf{f}(\mathbf{x}))$. Porovnejte.

8.15. (*) Necht' zobrazení $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ je definováno výrazem $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ obsahujícím vektor \mathbf{x} , konstantní matice a vektory, a operace součet matic, maticový součin a transpozice (např. $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{x}\mathbf{b}^T\mathbf{x}$). Lze vždy derivaci $\mathbf{f}'(\mathbf{x})$ vyjádřit výrazem obsahujícím vektor \mathbf{x} , ty samé konstantní matice a vektory, a operace součet matic, maticový součin a transpozice?

8.16. Načrtněte následující množiny (jedná se o podmnožiny \mathbb{R}^2 nebo \mathbb{R}^3):

- a) $[-1, 0] \times \{1\}$
- b) $\mathbb{Z} \times \mathbb{Z}$
- c) $\mathbb{R} \times \mathbb{Z}$
- d) $(\mathbb{R} \times \mathbb{Z}) \cup (\mathbb{Z} \times \mathbb{R})$
- e) $\{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid x^2 + y^2 = 1\} \times \mathbb{R}$
- f) $\{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid x > 0, y > 0, xy = 1\}$
- g) $\{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid \min\{x, y\} = 1\}$

8.17. Co je vnitřek a hranice těchto množin?

- a) Množina reálných čísel \mathbb{R}
- b) Uzavřený interval $[a, b] = \{x \in \mathbb{R} \mid a \leq x \leq b\}$
- c) Množina racionálních čísel \mathbb{Q}
- d) Množina (8.21)
- e) $\{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid x^2 + y^2 = 1, y \geq 0\}$
- f) $\{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid y = x^2, -1 < x \leq 1\}$
- g) $\{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid xy < 1, x > 0, y > 0\}$
- h) $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \max_{i=1}^n x_i \leq 1\}$
- i) $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{a}^T \mathbf{x} = b\}$, kde $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n, b \in \mathbb{R}$ (nadrovina)
- j) $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid b \leq \mathbf{a}^T \mathbf{x} \leq c\}$, kde $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n, b, c \in \mathbb{R}$ (panel)
- k) $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}\}$ (afinní podprostor \mathbb{R}^n)

8.18. Každá z následujících množin je sjednocením konečného počtu (otevřených, uzavřených či polouzavřených) intervalů. Najděte tyto intervaly. Příklad: $\{x^2 \mid x \in \mathbb{R}\} = [0, +\infty)$.

- a) $\{1/x \mid x \geq 1\}$
- b) $\{1/x \mid |x| \geq 1\}$
- c) $\{e^{-x^2} \mid x \in \mathbb{R}\}$
- d) $\{x + y \mid x^2 + y^2 < 1\}$
- e) $\{x + y \mid x^2 + y^2 = 1\}$
- f) $\{x - y \mid x^2 + y^2 = 1\}$
- g) $\{|x| + |y| \mid x^2 + y^2 = 1\}$
- h) $\{x_1 + \dots + x_n \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, x_1^2 + \dots + x_n^2 = 1\}$
- i) $\{|x - y| \mid x \in [0, 1], y \in (1, 2]\}$
- j) $\{x + y \mid |x| \geq 1, |y| \geq 1\}$

8.19. Najdi (úvahou, bez použití derivací) všechny extrémní funkce

- a) $f(\mathbf{x}) = \mathbf{a}^T \mathbf{x}$ (vektor $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$ je dán)
- b) $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{x}$

na množině

- a) \mathbb{R}^n
- b) $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \|\mathbf{x}\| = 1 \}$
- c) $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \|\mathbf{x}\| \leq 1 \}$
- d) $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \|\mathbf{x}\| < 1 \}$
- e) daný lineární podprostor prostoru \mathbb{R}^n
- f) daný afinní podprostor prostoru \mathbb{R}^n
- g) $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid -1 \leq \mathbf{1}^T \mathbf{x} \leq 1 \}$

U každého extrému urči, zda je lokální/globální, ostrý/neostrý, volný/vázaný.

8.20. Necht' $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ a $\mathbf{x} \in X' \subseteq X \subseteq \mathbb{R}^n$. Uvažujme dva výroky:

1. Funkce f má v bodě \mathbf{x} lokální minimum na množině X .
2. Funkce f má v bodě \mathbf{x} lokální minimum na množině X' .

Vyplývá druhý výrok z prvního? Vyplývá první výrok z druhého? Odpovědi dokažte.

8.21. Může se stát, že funkce má na množině lokální minimum ale nemá na ní globální minimum? Odpověď dokažte.

8.22. Může nekonzstantní lineární funkce nabývat na množině lokálního extrému ve vnitřním bodě této množiny? Odpověď dokažte.

8.23. (*) Dokažte, že pro libovolné funkce $f_1, \dots, f_m: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ platí

$$\min_{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m \in \mathbb{R}^n} [f_1(\mathbf{x}_1) + \dots + f_m(\mathbf{x}_m)] = \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} f_1(\mathbf{x}) + \dots + \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} f_m(\mathbf{x}), \quad (8.22)$$

tedy minimalizace funkce $f(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m) = f_1(\mathbf{x}_1) + \dots + f_m(\mathbf{x}_m)$ se rozpadne na m nezávislých minimalizací. Jde to udělat i když nahradíme součet maximem nebo minimem? Obecněji, pro jaké funkce $g: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ platí

$$\min_{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m \in \mathbb{R}^n} g(f_1(\mathbf{x}_1), \dots, f_m(\mathbf{x}_m)) = g(\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} f_1(\mathbf{x}), \dots, \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} f_m(\mathbf{x}))? \quad (8.23)$$

Nápověda a řešení

8.3.a) Ano, dle Věty 8.1.

8.3.b) Ano, protože její parciální derivace $\partial f(x, y)/\partial x = y/(1 + xy)$ a $\partial f(x, y)/\partial y = x/(1 + xy)$ jsou (dle Věty 8.1) spojité funkce.

8.3.c) Ano, dle Věty 8.2.

8.3.d) $f'(x, y) = [y/(1 + xy) \quad x/(1 + xy)] \in \mathbb{R}^{1 \times 2}$, tedy $f'(x_0, y_0) = [2 \quad 1]/3$.

8.3.e) $\nabla f(x, y) = [f'(x, y)]^T = \begin{bmatrix} y/(1 + xy) \\ x/(1 + xy) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2 \times 1}$, tedy $\nabla f(x_0, y_0) = (2, 1)/3 = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix} / 3$.

8.3.f) Řez je $\varphi(\alpha) = \ln[1 + (1 + \alpha)(2 - \alpha)]$. Směrová derivace je $1/3$.

8.4. Je spoj. diferencovatelná na množině $\mathbb{R}^2 \setminus \{ (x, y) \mid x = y \}$.

8.6.a) $f_\varphi(x, y) = -f_x(x, y)r \sin \varphi + f_y(x, y)r \cos \varphi$, $f_r(x, y) = f_x(x, y) \cos \varphi + f_y(x, y) \sin \varphi$

8.6.b) $f_t(x, y) = 2f_x(x, y)(t + 1) + 2tf_y(x, y)/(t^2 + 1)$

8.9. Dosad' $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{x}$ a $\mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{x}$.

8.10.a) $(5, 1)/\sqrt{26}$

8.10.b) $(5, 1)^T(1, -1)/\sqrt{2} = 2\sqrt{2}$

8.11.a) $2e^{-x^2-y^2} \begin{bmatrix} 2x^2 - 1 & 2xy \\ 2xy & 2y^2 - 1 \end{bmatrix}$

8.11.b) $\frac{e^{x+y}}{(e^x+e^y)^2} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$

8.11.c) $f''(\mathbf{x}) = \mathbf{A} + \mathbf{A}^T$

8.11.d) $f''(\mathbf{x}) = 2\mathbf{g}'(\mathbf{x})^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}) + 2 \sum_{i=1}^m g_i(\mathbf{x})g_i''(\mathbf{x})$ (výraz nejde napsat čistě v maticové formě, nutno použít sumu)

8.12. $T_{(1,-2)}^0(x, y) = 46, T_{(1,-2)}^1(x, y) = 18x - 60y - 92, T_{(1,-2)}^2(x, y) = -6x^2 - 24xy - 18x + 24y^2 + 60y + 46$

8.13. V obou případech je roven původnímu polynomu. Ty přece určitě mají nulté a první (a příp. druhé) derivace stejné jako původní polynom.

8.17.c) Vnitřek je \emptyset a hranice je \mathbb{R} .

8.20. Druhý výrok plyne z prvního. Naopak to ale neplatí, protipříklad je $X = \mathbb{R}, X' = [0, 1], f(x) = x$.

Kapitola 9

Volné lokální extrémy

9.1 Analytické podmínky

Zopakujme nejprve podmínky na volné lokální extrémy diferencovatelných funkcí, vyjádřené pomocí prvních a druhých derivací. Uděláme to nejprve pro funkce jedné proměnné a pak zobecníme na funkce více proměnných.

9.1.1 Pro jednu proměnnou

Věta 9.1. *Necht' je funkce $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ v bodě $x \in \mathbb{R}$ diferencovatelná a necht' $f'(x) > 0$ [$f'(x) < 0$]. Pak existuje $\delta > 0$ tak, že pro každé $\alpha \in (0, \delta]$ je $f(x - \alpha) < f(x) < f(x + \alpha)$ [$f(x - \alpha) < f(x) < f(x + \alpha)$].*

Důsledek 9.2 (Fermatova věta). *Necht' funkce $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ je v bodě $x \in \mathbb{R}$ diferencovatelná a má v tomto bodě lokální extrém. Pak $f'(x) = 0$.*

Jestliže $f'(x) = 0$, bodu x říkáme **stacionární bod** funkce f . Věta 9.2 říká, že stacionární body jsou body 'podezřelé' z volného lokálního extrému. Věta samozřejmě neříká, že každý stacionární bod je lokální extrém (uvažte např. funkci $f(x) = x^3$ v bodě $x = 0$).

Věta 9.2 udává podmínku *prvního řádu* na volné extrémy, protože obsahuje první derivace. Následující podmínka *druhého řádu* (uvedená bez důkazu) pomůže zjistit, zda je stacionární bod lokálním extrémem, případně jakým.

Věta 9.3. *Necht' funkce $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ je v bodě $x \in \mathbb{R}$ dvakrát diferencovatelná a necht' $f'(x) = 0$.*

- *Je-li x lokální minimum [maximum] funkce f , pak $f''(x) \geq 0$ [$f''(x) \leq 0$].*
- *Je-li $f''(x) > 0$ [$f''(x) < 0$], pak x je ostré lokální minimum [maximum] funkce f .*

Všimněte si, že je-li $f''(x) = 0$, funkce v bodě x lokální extrém mít může nebo nemusí (příkladem jsou funkce $f(x) = x^3$ a $f(x) = x^4$ v bodě $x = 0$).

9.1.2 Pro více proměnných

Věta 9.2 má snadný důsledek pro funkce více proměnných:

Věta 9.4. *Necht' $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ a $X \subseteq \mathbb{R}^n$. Necht' \mathbf{x} je vnitřní bod množiny X a zároveň lokální extrém funkce f na množině X . Necht' $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$. Jestliže existuje směrová derivace funkce f v bodě \mathbf{x} ve směru \mathbf{v} , pak je nulová.*

Důkaz. Jelikož \mathbf{x} je lokální extrém f na X a zároveň vnitřní bod X , existuje $\varepsilon > 0$ tak, že $B_\varepsilon(\mathbf{x}) \subseteq X$ a \mathbf{x} je (globální) extrém funkce f na kouli $B_\varepsilon(\mathbf{x})$. Pro řez $\varphi(\alpha) = f(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{v})$ (viz §8.5) z toho plyne, že bod 0 je (globální) extrém funkce φ na intervalu $[-\varepsilon/\|\mathbf{v}\|, \varepsilon/\|\mathbf{v}\|] = B_{\varepsilon/\|\mathbf{v}\|}(0)$. Tedy funkce φ má v bodě $\alpha = 0$ lokální extrém. Dle Důsledku 9.2 je tedy $\varphi'(0) = 0$. Dle (8.17) je $\varphi'(0)$ směrová derivace funkce f v bodě \mathbf{x} ve směru \mathbf{v} . \square

Jestliže je funkce v bodě \mathbf{x} diferencovatelná, tak existují směrové derivace ve všech směrech a jsou nulové, tedy speciálně všechny parciální derivace jsou nulové neboli $f'(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$. V tom případě bod \mathbf{x} opět nazýváme **stacionární bod** funkce f .

Věta 9.4 svádí k tomu, aby se použila v situacích, kdy nejsou splněny její předpoklady. Uvedme příklady tohoto chybého použití (jeden už jsme uvedli v §9.1.1 pro $n = 1$).

Příklad 9.1. V Příkladu 8.21 jsou předpoklady Věty 9.4 splněny pouze pro body b, c , které jsou stacionární a vnitřní. Body a, f jsou hraniční (tedy ne vnitřní) body intervalu $[a, f]$ a v bodech d, e není funkce diferencovatelná. \square

Příklad 9.2. Funkce $f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|$ má na hyperkrychli $X = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid -1 \leq \mathbf{x} \leq 1\}$ v bodě $\mathbf{0}$ volné lokální minimum (nakreslete si množinu X a vrstevnice funkce f pro $n = 1$ a pro $n = 2$!). Nemá tam ale stacionární bod, protože tam není diferencovatelná. Dále má funkce na množině X vázaná lokální maxima ve všech jejích rozích (např. v bodě $\mathbf{1}$), což jsou její hraniční body. Bod $\mathbf{1}$ ovšem není stacionární bod funkce f . \square

A nyní podmínky druhého řádu:

Věta 9.5. Necht' $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ a $X \subseteq \mathbb{R}^n$. Necht' \mathbf{x} je vnitřní bod množiny X . Necht' je funkce f v bodě \mathbf{x} dvakrát diferencovatelná a platí $f'(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$. Pak:

- Je-li \mathbf{x} lokální minimum [maximum] funkce f na množině X , pak Hessova matice $f''(\mathbf{x})$ je pozitivně [negativně] semidefinitní.
- Je-li $f''(\mathbf{x})$ pozitivně [negativně] definitní, pak \mathbf{x} je ostré lokální minimum [maximum] funkce f na množině X .
- Je-li $f''(\mathbf{x})$ indefinitní, pak \mathbf{x} není lokální extrém funkce f na množině X .

Bod \mathbf{x} , ve kterém $f'(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ a matice $f''(\mathbf{x})$ je indefinitní, se nazývá **sedlový bod**. Všimněte si, že je-li matice $f''(\mathbf{x})$ (pozitivně či negativně) semidefinitní, věta neříká nic o tom, zda funkce v bodě \mathbf{x} má nebo nemá lokální extrém. Příklad jsme uvedli v §9.1.1) pro $n = 1$.

Větu 9.5 nebudeme dokazovat, uvedeme jen argument, který ji učiní snadno uvěřitelnou. Místo funkce f vyšetřujme v blízkosti bodu \mathbf{x} její Taylorův polynom druhého stupně (8.19c),

$$T_{\mathbf{x}}^2(\mathbf{y}) = f(\mathbf{x}) + \underbrace{f'(\mathbf{x})(\mathbf{y} - \mathbf{x})}_{\mathbf{0}} + \frac{1}{2}(\mathbf{y} - \mathbf{x})^T f''(\mathbf{x})(\mathbf{y} - \mathbf{x}).$$

Protože $f'(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, lineární člen je nulový a polynom je tedy kvadratická forma posunutá do bodu \mathbf{x} . Zda funkce $T_{\mathbf{x}}^2$ má či nemá v bodě \mathbf{x} extrém bychom tedy mohli určit podle Věty 6.2 z definitnosti matice $f''(\mathbf{x})$. Zde ovšem vyšetřujeme funkci f a ne její aproximaci $T_{\mathbf{x}}^2$, proto pro lokální extrém nestačí (pozitivní či negativní) semidefinitnost $f''(\mathbf{x})$.

Příklad 9.3. Extrémy kvadratické funkce (6.12) umíme hledat pomocí rozkladu na čtverec. Ovšem je to také možné pomocí derivací. Podmínka stacionarity je

$$\frac{d}{d\mathbf{x}}(\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c) = 2\mathbf{x}^T \mathbf{A} + \mathbf{b}^T = \mathbf{0}.$$

Po transpozici dostaneme rovnici (6.14a). Druh extrému určíme podle druhé derivace (Hessiánu), který je roven $2\mathbf{A}$ (předpokládáme symetrii \mathbf{A}). To souhlasí s klasifikací extrémů kvadratické formy z §6. \square

9.2 Iterační algoritmy na volná lokální minima

Dále se budeme věnovat numerickým iteračním algoritmům na nalezení volného lokálního minima diferencovatelných funkcí na množině \mathbb{R}^n .

Iterační algoritmy na hledání lokálního minima spojitě funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ mají tvar

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{v}_k, \quad (9.1)$$

kde vektor $\mathbf{v}_k \in \mathbb{R}^n$ je **směr hledání** a skalár $\alpha_k > 0$ je **délka kroku**. Ve třídě algoritmů zvaných **sestupné metody** (*descent methods*) hodnota účelové funkce monotonně klesá¹, $f(\mathbf{x}_{k+1}) < f(\mathbf{x}_k)$.

Nechť je funkce f diferencovatelná. Směr \mathbf{v}_k se nazývá **sestupný** v bodě \mathbf{x}_k , jestliže

$$f'(\mathbf{x}_k) \mathbf{v}_k < 0, \quad (9.2)$$

tedy směrová derivace ve směru \mathbf{v}_k je záporná. Pokud v bodě \mathbf{x}_k existuje sestupný směr, existuje $\alpha_k > 0$ tak, že $f(\mathbf{x}_{k+1}) < f(\mathbf{x}_k)$. Pokud v bodě \mathbf{x}_k sestupný směr neexistuje, vektor $f'(\mathbf{x}_k)$ je nutně nulový (proč?) a tedy \mathbf{x}_k je stacionární bod.

Máme-li sestupný směr, optimální délku kroku α_k najdeme minimalizací funkce f na polo-přímce z bodu \mathbf{x}_k ve směru \mathbf{v}_k . Tedy minimalizujeme funkci jedné proměnné

$$\varphi(\alpha_k) = f(\mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{v}_k) \quad (9.3)$$

přes všechny $\alpha_k \geq 0$. Tato úloha je v kontextu vícerozměrné optimalizace nazývána *jednorozměrné hledání* (angl. *line search*). Tuto úlohu stačí řešit přibližně, čímž se nebudeme zabývat a necháme to na čtenáři.

Dále uvedeme nejznámější zástupce sestupných metod.

9.3 Gradientní metoda

Tato nejjednodušší metoda volí směr sestupu jako záporný gradient funkce f v bodě \mathbf{x}_k :

$$\mathbf{v}_k = -f'(\mathbf{x}_k)^T = -\nabla f(\mathbf{x}_k). \quad (9.4)$$

Tento směr je sestupný, což je okamžitě vidět dosazením do (9.2).

Výhodou gradientní metody je spolehlivost, daná tím, že směr (9.4) je vždy sestupný. Nevýhodou gradientní metody je často pomalá konvergence. To se může stát tehdy, když funkce v okolí lokálního optima je v některých směrech mnohem protaženější než v jiných (přesněji, když vlastní čísla Hessiánu $f''(\mathbf{x})$ jsou velmi různá).

¹Existují totiž i algoritmy, ve kterých hodnota $f(\mathbf{x}_k)$ neklesá monotonně (tj. někdy stoupne a někdy klesne) a přesto konvergují k optimu (např. *subgradientní metody*).

Příklad 9.4. Hledejme minimum kvadratické formy $f(x, y) = (ax^2 + y^2)/2$ (kde $a > 0$) gradientní metodou s počátečním bodem $(x_0, y_0) = (1, a)$. Minimum se nabývá v bodě $(x, y) = (0, 0)$. Při přesném řešení problému (9.3) je k -tá iterace rovna (odvod'te!)

$$x_k = \left(-\frac{a-1}{a+1}\right)^k, \quad y_k = a \left(\frac{a-1}{a+1}\right)^k. \quad (9.5)$$

Vidíme, že konvergence je velmi pomalá pro $a \ll 1$ nebo $a \gg 1$. □

9.3.1 (★) Závislost na lineární transformaci souřadnic

Transformujme vektor proměnných \mathbf{x} lineární transformací $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{A}\mathbf{x}$, kde \mathbf{A} je regulární matice. Je jasné, že funkce f původních proměnných \mathbf{x} bude mít stejné extrémy jako funkce

$$\tilde{f}(\tilde{\mathbf{x}}) = \tilde{f}(\mathbf{A}\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{A}^{-1}\tilde{\mathbf{x}}).$$

Iterace gradientní metody v nových proměnných je

$$\tilde{\mathbf{x}}_{k+1} = \tilde{\mathbf{x}}_k - \alpha_k \tilde{f}'(\tilde{\mathbf{x}}_k)^T. \quad (9.6)$$

Zkoumejme, jaké iteraci to odpovídá v původních proměnných. K tomu potřebujeme vyjádřit (9.6) v proměnných \mathbf{x} . Použitím řetízkového pravidla odvodíme

$$\tilde{f}'(\tilde{\mathbf{x}}) = \frac{d\tilde{f}(\tilde{\mathbf{x}})}{d\tilde{\mathbf{x}}} = \frac{df(\mathbf{x})}{d\mathbf{x}} \frac{d\mathbf{x}}{d\tilde{\mathbf{x}}} = \frac{df(\mathbf{x})}{d\mathbf{x}} \mathbf{A}^{-1}.$$

Dosazením za $\tilde{\mathbf{x}}$ a $\tilde{f}'(\tilde{\mathbf{x}})$ do (9.6) a úpravou dostaneme

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \alpha_k (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} f'(\mathbf{x}_k)^T. \quad (9.7)$$

To lze napsat ve tvaru (9.1) se směrem hledání

$$\mathbf{v}_k = -(\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} f'(\mathbf{x}_k)^T. \quad (9.8)$$

Tento směr se liší od původního směru (9.4) vynásobením maticí $(\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1}$. Vidíme, že gradientní metoda *není invariantní* vůči lineární transformaci souřadnic.

Ovšem lze ukázat, že nový směr (9.8) je také sestupný. Dosazením (9.4) do (9.2) to znamená, že $-f'(\mathbf{x}_k)(\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} f'(\mathbf{x}_k)^T < 0$. To je ale pravda, neboť matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ a tedy i její inverze je pozitivně definitní (viz Cvičení 6.19 a 6.18).

Na vzorec (9.8) se lze dívat ještě obecněji. Je jasné, že směr $\mathbf{v}_k = -\mathbf{C}_k^{-1} f'(\mathbf{x}_k)^T$ je sestupný, je-li matice \mathbf{C}_k je pozitivně definitní. Opačně, každý sestupný směr lze napsat takto. Uvidíme, že algoritmy uvedené dále budou mít vždy tento tvar sestupného směru, ovšem matice \mathbf{C}_k bude jiná v každém kroku.

9.4 Newtonova metoda

Newtonova metoda (přesněji Newton-Raphsonova) je slavný iterační algoritmus na řešení soustav nelineárních rovnic. Lze ho použít i na minimalizaci funkce tak, že hledáme její bod s nulovým gradientem. Oba způsoby použití popíšeme.

9.4.1 Použití na soustavy nelineárních rovnic

Nechť $\mathbf{g}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ je diferencovatelné zobrazení. Chceme řešit rovnici $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, což je soustava n rovnic s n neznámými. Myšlenka Newtonovy metody je jednoduchá: místo hledání nulového bodu zobrazení \mathbf{g} (což je obecně velmi obtížné) opakujeme iteraci, která najde nulový bod afinní aproximace zobrazení \mathbf{g} v okolí aktuálního odhadu (což je snadné).

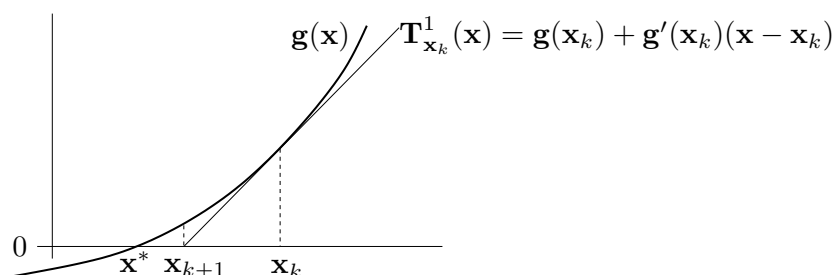
Afinní aproximace zobrazení \mathbf{g} v okolí bodu \mathbf{x}_k je zobrazení (viz (8.8) nebo (8.20))

$$\mathbf{T}_{\mathbf{x}_k}^1(\mathbf{x}) = \mathbf{g}(\mathbf{x}_k) + \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k). \quad (9.9)$$

Další odhad \mathbf{x}_{k+1} najdeme řešením nehomogenní lineární soustavy $\mathbf{T}_{\mathbf{x}_k}^1(\mathbf{x}_{k+1}) = \mathbf{0}$. Pokud je Jacobiho matice $\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)$ regulární, řešením je

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^{-1}\mathbf{g}(\mathbf{x}_k). \quad (9.10)$$

Viz obrázek:



Hlavní výhodou Newtonovy metody je, že v blízkém okolí řešení obvykle konverguje velmi rychle (mnohem rychleji než gradientní metoda). Nevýhodou je, že je nutno začít s poměrně přesnou aproximací \mathbf{x}_0 skutečného řešení, jinak algoritmus snadno diverguje.

Příklad 9.5. *Babylónská metoda* na výpočet druhé odmocniny čísla $a \geq 0$ opakuje iteraci

$$x_{k+1} = \frac{1}{2} \left(x_k + \frac{a}{x_k} \right).$$

To není nic jiného než Newtonova metoda pro rovnici $0 = g(x) = x^2 - a$. Opravdu,

$$x_{k+1} = x_k - \frac{g(x_k)}{g'(x_k)} = x_k - \frac{x_k^2 - a}{2x_k} = x_k - \frac{1}{2} \left(x_k - \frac{a}{x_k} \right) = \frac{1}{2} \left(x_k + \frac{a}{x_k} \right). \quad \square$$

Příklad 9.6. Hledejme průsečík $(x, y) \in \mathbb{R}^2$ dvou rovinných křivek daných rovnicemi

$$\begin{aligned} (x-1)^2 + y^2 &= 1, \\ x^4 + y^4 &= 1. \end{aligned}$$

Máme

$$\mathbf{g}(x, y) = \begin{bmatrix} (x-1)^2 + y^2 - 1 \\ x^4 + y^4 - 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^2, \quad \mathbf{g}'(x, y) = \begin{bmatrix} 2(x-1) & 2y \\ 4x^3 & 4y^3 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}.$$

Iterace (9.10) je

$$\begin{bmatrix} x_{k+1} \\ y_{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_k \\ y_k \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 2(x_k-1) & 2y_k \\ 4x_k^3 & 4y_k^3 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} (x_k-1)^2 + y_k^2 - 1 \\ x_k^4 + y_k^4 - 1 \end{bmatrix}.$$

Načrtne-li si obě křivky, vidíme, že mají dva průsečíky, lišící se znaménkem druhé souřadnice. Zvolme počáteční odhad pro horní průsečík $(x_0, y_0) = (1, 1)$. První iterace bude

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 2 \\ 4 & 4 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.75 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Pro šestou iteraci $(x_6, y_6) = (0.671859751039018, 0.944629015546222)$ jsou rovnice splněny se strojovou přesností. \square

Příklad 9.7. Funkce $g(x) = x^2 - 1$ má dva nulové body $x = \pm 1$. Pokud v nějaké iteraci bude $x_k = 0$, nastane dělení nulou. Pokud bude x_k velmi malé, dělení nulou nenastane, ale iterace x_{k+1} se ocitne velmi daleko od kořene. \square

Příklad 9.8. Pro funkci $g(x) = x^3 - 2x + 2$ zvolme $x_0 = 0$. Další iterace bude $x_1 = 1$ a další $x_2 = 0$. Algoritmus bude oscilovat mezi hodnotami 0 a 1, tedy bude divergovat. \square

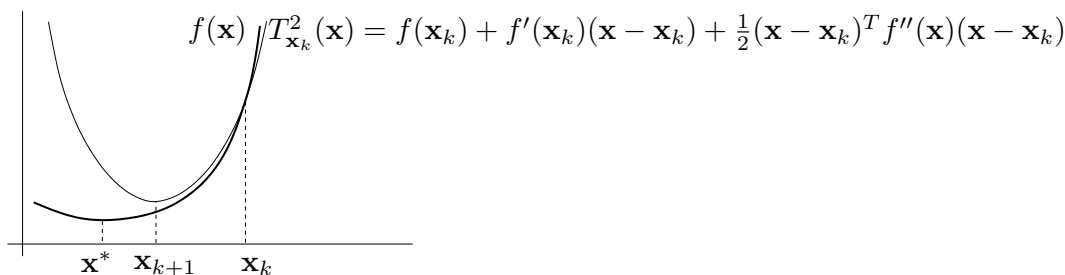
9.4.2 Použití na minimalizaci funkce

Newtonovu metodu lze použít pro hledání lokálního extrému dvakrát diferencovatelné funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ tak, že v algoritmu (9.10) položíme $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = f'(\mathbf{x})^T$. Tím dostaneme iteraci

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - f''(\mathbf{x}_k)^{-1} f'(\mathbf{x}_k)^T, \quad (9.11)$$

kde $f''(\mathbf{x}_k)$ je Hessova matice funkce f v bodě \mathbf{x}_k . Neplet' se si tato dvě různá použití Newtonovy metody (tj. na hledání kořenů a na hledání lokálních extrémů)!

Význam iterace (9.10) byl takový, že se zobrazení \mathbf{g} v bodě \mathbf{x}_k aproximovalo afinním zobrazením $\mathbf{T}_{\mathbf{x}_k}^1$ a pak se našel nulový bod tohoto zobrazení. Význam iterace (9.11) je takový, že se funkce f aproximuje Taylorovým polynomem druhého stupně $T_{\mathbf{x}_k}^2$ (tedy kvadratickou funkcí) a pak se najde minimum této kvadratické funkce (viz Cvičení 9.9).



Iteraci (9.11) lze napsat v obecnějším tvaru (9.1), kde

$$\mathbf{v}_k = -f''(\mathbf{x}_k)^{-1} f'(\mathbf{x}_k)^T. \quad (9.12)$$

Výhodou tohoto zobecnění je možnost zvolit optimální (ne nutně jednotkovou) délku kroku pomocí jednorozměrné minimalizace (9.3). Algoritmu (9.11) s jednotkovou délkou kroku se pak říká **čistá** Newtonova metoda.

Vektoru (9.12) říkáme **Newtonův směr**. Vidíme, že se od gradientního směru (9.4) liší násobením Hessovou maticí $f''(\mathbf{x}_k)$. Aby to byl sestupný směr, musí být

$$f'(\mathbf{x}_k) \mathbf{v}_k = -f'(\mathbf{x}_k) f''(\mathbf{x}_k)^{-1} f'(\mathbf{x}_k)^T < 0.$$

Toto platí, když $f'(\mathbf{x}_k) \neq \mathbf{0}$ (tj. \mathbf{x}_k není stacionární bod) a matice $f''(\mathbf{x}_k)$ je pozitivně definitní (neboť pak bude pozitivně definitní i její inverze, viz Cvičení 6.18).

V porovnání s gradientní metodou má Newtonova metoda (použitá na minimalizaci funkce) nevýhodu v tom, že musíme počítat Hessián $f''(\mathbf{x}_k)$ a řešit soustavu $f''(\mathbf{x}_k)\mathbf{v}_k = -f'(\mathbf{x}_k)^T$, což pro velký počet proměnných je pomalé či nemožné. Všimněte si ale, že na rozdíl od §9.4.1 je zde matice $\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k) = f''(\mathbf{x}_k)$ symetrická, což může řešení soustavy ulehčit.

9.5 Nelineární metoda nejmenších čtverců

Mějme soustavu rovnic $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, kde $\mathbf{g}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ (tedy je to soustava m rovnic s n neznámými). Soustavu nazveme přeúčtenou, jestliže nemá žádné řešení. Chceme takovou přeúčtenou soustavu řešit přibližně ve smyslu nejmenších čtverců. Tedy chceme minimalizovat funkci

$$f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{g}(\mathbf{x})\|^2 = \mathbf{g}(\mathbf{x})^T \mathbf{g}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m g_i(\mathbf{x})^2, \quad (9.13)$$

kde g_i jsou složky zobrazení \mathbf{g} . Speciálním případem je přibližné řešení lineární nehomogenní soustavy $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, kde $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{b} - \mathbf{Ax}$ (viz §5.1).

Zatímco v §9.3 a §9.4.2 bylo cílem minimalizovat *obecnou* funkci, zde chceme minimalizovat funkci ve speciálním tvaru (9.13). Nyní máme dvě možnosti. Bud' můžeme nasadit na funkci (9.13) jednu z metod pro minimalizaci obecné funkce, k čemuž se vrátíme v §9.5.2. Nebo můžeme být chytřejší a využít speciálního tvaru funkce (9.13), což popíšeme v §9.5.1.

9.5.1 Gauss-Newtonova metoda

Aproximujme opět zobrazení \mathbf{g} afinním zobrazením (9.9). Úloha (9.13) pak vyžaduje minimalizovat $\|\mathbf{T}_{\mathbf{x}_k}^1(\mathbf{x})\|^2$. To je úloha lineárních nejmenších čtverců, kterou již známe z §5.1. Normální rovnice (5.3) má tvar

$$\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) = -\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{g}(\mathbf{x}_k). \quad (9.14)$$

Její řešení napíšeme pomocí pseudoinverze:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^+ \mathbf{g}(\mathbf{x}_k). \quad (9.15)$$

Algoritmus (9.15) je znám jako (čistá) **Gauss-Newtonova metoda**. Můžeme jej opět napsat obecněji ve tvaru (9.1) se směrem hledání (Gauss-Newtonův směr)

$$\mathbf{v}_k = -\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^+ \mathbf{g}(\mathbf{x}_k). \quad (9.16)$$

Všimněte si, že pokud $m = n$ a Jakobiho matice $\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)$ je regulární, je $\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^+ = \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^{-1}$, tedy Gauss-Newtonova metoda (9.15) se redukuje na Newtonovu metodu (9.10).

Pokud má Jacobiho matice $\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)$ lineárně nezávislé sloupce (viz §5.1), výraz (9.16) můžeme napsat jako

$$\mathbf{v}_k = -(\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k))^{-1} \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{g}(\mathbf{x}_k) = -\frac{1}{2}(\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k))^{-1} f'(\mathbf{x}_k)^T, \quad (9.17)$$

kde ve výrazu na pravé straně jsme dosadili derivaci

$$f'(\mathbf{x}) = 2\mathbf{g}(\mathbf{x})^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}) \quad (9.18)$$

účelové funkce (9.13) (odvodte dle §8.4.2!). Vidíme, že Gauss-Newtonův směr (9.17) se liší od gradientního směru (9.4) pouze násobením maticí $\frac{1}{2}(\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k))^{-1}$. Aby byl tento směr sestupný, musí být

$$f'(\mathbf{x}_k) \mathbf{v}_k = -\frac{1}{2} f'(\mathbf{x}_k) (\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k))^{-1} f'(\mathbf{x}_k)^T < 0.$$

To platí, když $f'(\mathbf{x}_k) \neq \mathbf{0}$ a matice $\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)$ je pozitivně definitní (viz Cvičení 6.18). Matice $\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)$ je pozitivně definitní, právě když $\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)$ má lineárně nezávislé sloupce (viz Cvičení 6.19), což ovšem již předpokládáme kvůli existenci inverze. Tedy vidíme, že za přirozených podmínek je Gauss-Newtonův směr vždy sestupný.

Čistá Gauss-Newtonova metoda (tj. s jednotkovou délkou kroku) může divergovat, a to i když je počáteční odhad \mathbf{x}_0 libovolně blízko lokálnímu minimu funkce (9.13). Protože ale Gauss-Newtonův směr je vždy sestupný, vhodnou volbou délky kroku α_k lze vždy zajistit konvergenci.

Příklad 9.9. Hledáme přibližné řešení soustavy tří rovnic o dvou neznámých

$$\begin{aligned} (x-1)^2 + y^2 &= 1, \\ x^4 + y^4 &= 1, \\ x^2 + (y-1)^2 &= 1/2. \end{aligned}$$

Oba průsečíky křivek daných prvními dvěma rovnicemi již známe z Příkladu 9.6. Ani jeden z těchto průsečíků neleží na třetí křivce (i když je jí blízko), tedy soustava je přeúčřená. Nezbyvá nám tedy, než ji řešit přibližně. Hledáme bod $(x, y) \in \mathbb{R}^2$, který minimalizuje číslo

$$f(x, y) = \mathbf{g}(x, y)^T \mathbf{g}(x, y) = ((x-1)^2 + y^2 - 1)^2 + (x^4 + y^4 - 1)^2 + (x^2 + (y-1)^2 - 1/2)^2$$

kde

$$\mathbf{g}(x, y) = \begin{bmatrix} (x-1)^2 + y^2 - 1 \\ x^4 + y^4 - 1 \\ x^2 + (y-1)^2 - 1/2 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^3, \quad \mathbf{g}'(x, y) = \begin{bmatrix} 2(x-1) & 2y \\ 4x^3 & 4y^3 \\ 2x & 2(y-1) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{3 \times 2}.$$

Rozumný počáteční odhad je $(x_0, y_0) = (1, 1)$. První Gauss-Newtonova iterace (9.15) je

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 2 \\ 4 & 4 \\ 2 & 0 \end{bmatrix}^+ \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.75 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Po osmé iteraci $(x_8, y_8) = (0.691002152515578, 0.940548357857245)$ se již hodnota $f(x_8, y_8) = 0.0008674592922855055$ v rámci strojové přesnosti nemění. \square

Příklad 9.10. V systému GPS máme m satelitů se známými souřadnicemi $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m \in \mathbb{R}^n$ a chceme spočítat souřadnice pozorovatele $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ z naměřených vzdáleností $y_i = \|\mathbf{a}_i - \mathbf{x}\|$ pozorovatele od satelitů. Měření jsou zatížena chybou, proto obecně tato soustava rovnic nebude mít žádné řešení. Řešme tuto přeúčřenou nelineární soustavu ve smyslu nejmenších čtverců, tedy minimalizujme funkci

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m (\|\mathbf{x} - \mathbf{a}_i\| - y_i)^2.$$

Máme² tedy $\mathbf{g} = (g_1, \dots, g_m): \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, kde $g_i(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x} - \mathbf{a}_i\| - y_i$. Derivace složek \mathbf{g} je (pomůžte nám §8.4.2, ale udělejte sami!) $g'_i(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - \mathbf{a}_i)^T / \|\mathbf{x} - \mathbf{a}_i\|$. Tedy

$$\mathbf{g}'(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} (\mathbf{x} - \mathbf{a}_1)^T / \|\mathbf{x} - \mathbf{a}_1\| \\ \vdots \\ (\mathbf{x} - \mathbf{a}_m)^T / \|\mathbf{x} - \mathbf{a}_m\| \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n}.$$

Pak dosadíme do vzorečku (9.15). □

9.5.2 Rozdíl oproti Newtonově metodě

Předpokládejme, že bychom optimalizovali naši účelovou funkci (9.13) přímo Newtonovou metodou z §9.4.2. Spočítejme (viz Cvičení 8.11.d) Hessián funkce (9.13):

$$f''(\mathbf{x}) = 2\mathbf{g}'(\mathbf{x})^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}) + 2 \sum_{i=1}^m g_i(\mathbf{x}) g''_i(\mathbf{x}). \quad (9.19)$$

Hessián je součtem členu obsahujícího derivace prvního řádu a členu obsahujícího derivace druhého řádu. Vidíme, že Gauss-Newtonův směr (9.17) se liší od Newtonova směru (9.12) zanedbáním členu druhého řádu v Hessiánu (9.19). Jinými slovy, Gauss-Newtonovu metodu je možno vnímat jako aproximaci Newtonovy metody na minimalizaci funkce (9.13) spočívající v tom, že zanedbáme členy druhého řádu, tedy skutečný Hessián (9.19) aproximujeme výrazem $2\mathbf{g}'(\mathbf{x})^T \mathbf{g}'(\mathbf{x})$.

To se projevuje tím, že Gauss-Newtonova metoda obvykle konverguje pomaleji než plná Newtonova metoda použitá na funkci (9.13). Ovšem vyhnuli jsme se počítání druhých derivací funkce \mathbf{g} , což je hlavní výhoda Gauss-Newtonovy metody.

9.5.3 Levenberg-Marquardtova metoda

Levenberg-Marquardtova metoda je široce používané vylepšení Gauss-Newtonovy metody, které její iteraci

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - (\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k))^{-1} \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{g}(\mathbf{x}_k) \quad (9.20)$$

nahrazuje iterací

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - (\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k) + \mu_k \mathbf{I})^{-1} \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{g}(\mathbf{x}_k) \quad (9.21)$$

kde $\mu_k > 0$. Přidání členu $\mu_k \mathbf{I}$ je vlastně (Tichonovova) regularizace (viz §(5.17)). Potom:

- Pro malé μ_k se (9.21) blíží Gauss-Newtonově iteraci.
- Pro velké μ_k je $(\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k) + \mu_k \mathbf{I})^{-1} \approx \mu_k^{-1} \mathbf{I}$, tedy (9.21) je blízká iteraci $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \frac{1}{2} \mu_k^{-1} f'(\mathbf{x}_k)^T$ (kde jsme dosadili (9.18)) gradientní metody s délkou kroku μ_k^{-1} .

Tím jsou spojeny výhody Gauss-Newtonovy metody (typicky rychlá konvergence v okolí optima) a gradientní metody (spolehlivost i daleko od optima). Volbou parametru μ_k spojitě přecházíme mezi oběma metodami.

Parametr μ_k měníme během algoritmu pomocí jednoduché heuristiky. Začneme např. s $\mu_0 = 10^3$ a pak v každé iteraci:

²Zde ignorujeme, že funkce f není všude diferencovatelná. Přesně, není diferencovatelná v bodech $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m$ (promyslete!), což budeme ignorovat.

- Pokud iterace snížila účelovou funkci, iteraci přijmeme a μ_k zmenšíme.
- Pokud iterace nesnížila účelovou funkci, iteraci odmítneme a μ_k zvětšíme.

Zvětšování a zmenšování μ_k děláme násobením a dělením konstantou, např. 10. Všimněte si, toto nahrazuje optimalizaci délky kroku α_k (*line search*).

Motivaci pro přidání regularizace do Gauss-Newtonovy iterace (9.20) lze vidět i jinak. Matice $\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)$ může být regulární (to když sloupce $\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)$ budou lineárně závislé) nebo blízka singulární. Pak její inverze neexistuje nebo je velmi citlivá na malé změny matice, což může neblaze ovlivnit konvergenci algoritmu. Matice (9.21) je ale vždy pozitivně definitní (viz Cvičení 6.16), a tedy regulární.

9.6 Cvičení

9.1. Funkce $f: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ má stacionární bod $(2, 1, 5)$. Co se dá o tomto stacionárním bodě říci, když Hessova matice $f''(2, 1, 5)$ v něm má vlastní čísla

- $\{2, 3, -1\}$
- $\{2, 3, 0\}$
- $\{2, 1, 1\}$

9.2. Pro následující funkce najděte stacionární body. Pro každý stacionární bod určete, zda je to lokální minimum, lokální maximum, či ani jedno. Pokud to určit neumíte, odůvodněte.

- $f(x, y) = x(1 - \frac{2}{3}x^2 - y^2)$
- $f(x, y) = 1/x + 1/y + xy$
- $f(x, y) = e^y(y^2 - x^2)$
- $f(x, y) = 3x - x^3 - 3xy^2$
- $f(x, y) = 6xy^2 - 2x^3 - 3y^4$
- $f(x, y) = x^4/3 + y^4/2 - 4xy^2 + 2x^2 + 2y^2 + 3$
- $f(x, y, z) = x^3 + y^3 + 2xyz + z^2$

9.3. Najděte všechna řešení rovnice $\sin x = \frac{1}{2}x$ (sinus je v radiánech) na kalkulačce s největší přesností, jakou dokážete.

9.4. Najděte lokální extrém funkce $f(x, y) = x^2 - y + \sin(y^2 - 2x)$ čistou Newtonovou metodou. Počáteční odhad zvolte $(x_0, y_0) = (1, 1)$. Můžete použít počítač.

9.5. Máme m bodů v rovině o souřadnicích (x_i, y_i) , $i = 1, \dots, m$. Tyto body chceme proložit kružnicí ve smyslu nejmenších čtverců – tj. hledáme kružnici se středem (u, v) a poloměrem r takovou, aby součet čtverců kolmých vzdáleností bodů ke kružnici byl minimální. Zformulujte příslušnou optimalizační úlohu. Napište iteraci (a) Gauss-Newtonovy, (b) Levenberg-Marquardtovy metody.

9.6. Soustavu dvou rovnic o jedné neznámé

$$\begin{aligned}x^2 + x &= 1 \\x^2 - x &= 1\end{aligned}$$

chceme řešit přibližně ve smyslu nejmenších čtverců. Napište iteraci

- čisté Gauss-Newtonovy metody,

b) čisté Newtonovy metody.

Výsledné vzorce co nejvíce zjednodušte.

9.7. Máme soustavu rovnic

$$\begin{aligned}x + y - 2xy &= 1 \\ -x + y + xy &= -3 \\ x - y + xy &= 1\end{aligned}$$

Je soustava lineární? Kolik má řešení a proč? Chceme soustavu řešit přibližně ve smyslu nejmenších čtverců, tj. minimalizovat funkci $f(x, y)$ ve tvaru (9.13). Napište iteraci (a) gradientní, (b) Newtonovy, (c) Gauss-Newtonovy, (d) Levenberg-Marquardtovy metody.

9.8. Chceme najít vzdálenost množiny $\{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid x^2 = y\}$ od kružnice s poloměrem 1 a středem v bodě $(2, 0)$. Tvrdíme, že tuto úlohu lze řešit tak, že vyřešíme přeurčenou soustavu $\{x^2 = y, (x - 2)^2 + y^2 = 1\}$ přibližně ve smyslu nejmenších čtverců, tedy minimalizujeme funkci $f(x, y) = (x^2 - y)^2 + ((x - 2)^2 + y^2 - 1)^2$. Je to pravda, bude minimální hodnota této funkce rovna (čtverci) vzdálenosti mezi množinami? Pokud ne, jak bychom tuto vzdálenost spočítali?

9.9. Čistá Newtonova metoda (9.11) na minimalizaci funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ je Newtonova metoda (9.10) na řešení soustavy $f'(\mathbf{x})^T = \mathbf{0}$. Takto jsme ji odvodili. Ukažte, že iteraci (9.11) lze odvodit také tak, že funkci f aproximujeme okolo bodu \mathbf{x}_k Taylorovým polynomem druhého řádu a najdeme \mathbf{x}_{k+1} jako minimum tohoto polynomu.

9.10. (*) V §9.3.1 jsme ukázali, že iterace gradientní metody není invariantní vůči lineární transformaci souřadnic $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{A}\mathbf{x}$ (pro regulární \mathbf{A}). Ukažte, že iterace Newtonovy metody (9.11) je invariantní vůči této transformaci.

9.11. Může Newtonova metoda (9.10) konvergovat, když soustava $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ nemá reálné řešení?

9.12. (*) Gauss-Newtonův směr (9.16) se získá řešením normální rovnice (9.14). Ukázali jsme, že když Jacobiho matice $\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)$ má lineárně nezávislé sloupce, je Gauss-Newtonův směr sestupný. Má-li $\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)$ lineárně závislé sloupce, rovnice (9.14) má nekonečně mnoho řešení, tj. směrů hledání je nekonečně mnoho. Dokažte, že každý takový směr je sestupný.

Nápověda a řešení

9.1.a) funkce nemá v tomto bodě lokální extrém

9.1.b) nemůžeme rozhodnout, zda má funkce má v tomto bodě lokální extrém

9.1.c) funkce má v tomto bodě lokální minimum

9.2.d) Stacionární body jsou 4.

9.2.e) Stacionární body jsou 3.

9.2.f) Stacionárních bodů je 5.

9.2.g) Stacionární body jsou $(0, 0, 0)$ a $(3/2, 3/2, -9/4)$.

9.3. Jeden kořen je $x = 0$ a pak dva další lišící se znaménkem. Jeden z nich získáme Newtonovou metodou: $x_{k+1} = x_k - (2 \sin x_k - x_k) / (2 \cos x_k - 1)$. Načtneme si grafy funkcí $\sin x$ a $1/over{2x}$ a z toho zvolíme počáteční odhad, např. $x_0 = 2$. Po několika iteracích máme $x_k = 1.895494267033981$.

9.6.a) Minimalizujeme $\mathbf{g}(x)^T \mathbf{g}(x)$ kde $\mathbf{g}(x) = \begin{bmatrix} x^2 + x - 1 \\ x^2 - x - 1 \end{bmatrix}$. Máme $\mathbf{g}'(x) = \begin{bmatrix} 2x + 1 \\ 2x - 1 \end{bmatrix}$. Iterace je

$$x \leftarrow x - (\mathbf{g}'(x)^T \mathbf{g}'(x))^{-1} \mathbf{g}'(x)^T \mathbf{g}(x) = x - (8x^2 + 2)^{-1} \begin{bmatrix} 2x + 1 & 2x - 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x^2 + x - 1 \\ x^2 - x - 1 \end{bmatrix} = \frac{2x(x^2 + 1)}{4x^2 + 1}.$$

- 9.6.b) Minimalizujeme $f(x) = \mathbf{g}(x)^T \mathbf{g}(x) = (x^2 + x - 1)^2 + (x^2 - x - 1)^2 = 2(x^4 - x^2 + 1)$. Máme $f'(x) = 8x^3 - 4x$, $f''(x) = 24x^2 - 4$. Iterace je $x \leftarrow x - f'(x)/f''(x) = (4x^3)/(6x^2 - 1)$. Vidíme, že pro tuto jednoduchou soustavu s jednou proměnnou není Newtonova iterace složitější než Gauss-Newtonova iterace – obvykle je to ale naopak.
- 9.7. Soustava je nelineární. Nemá řešení, protože po zavedení proměnné $xy = z$ dostaneme lineární soustavu s řešením $(x, y, z) = (0.5, -1.5, -1)$, což je spor.
- 9.8. Nebude, vzdálenost by se musela počítat jako minimalizace $(x-u)^2 + (y-v)^2$ za podmínek $x^2 = y$ a $(u-2)^2 + v^2 = 1$. Protože se křivky neprotínají, tato formulace jde zjednodušit: vzdálenost bodu od kružnice je rovna vzdálenost bodu od středu kružnice, tedy stačí minimalizovat $(x-2)^2 + y^2$ za podmínky $x^2 = y$, což se zjednoduší na minimalizaci funkce jedné proměnné $(x-2)^2 + x^4$.
- 9.9. Po přejmenování proměnných $\mathbf{x}_k, \mathbf{x}_{k+1}$ na \mathbf{x}, \mathbf{y} máme ukázat, že stacionární bod \mathbf{y} Taylorova polynomu (8.19c) je právě bod splňující $\mathbf{g}(\mathbf{x}) + \mathbf{g}'(\mathbf{x})(\mathbf{y} - \mathbf{x}) = \mathbf{0}$ kde $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = f'(\mathbf{x})^T$. To se snadno dokáže výpočtem derivace polynomu (s užitím Cvičení 8.11).
- 9.12. Pišme normální rovnici (9.14) jako $\mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{v} = \mathbf{A}^T \mathbf{b}$ kde $\mathbf{A} = \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)$, $\mathbf{b} = -\mathbf{g}(\mathbf{x}_k)$ a $\mathbf{v} = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k$ je směr hledání. Je-li \mathbf{v} řešením normální rovnice, pak $\mathbf{A} \mathbf{v} = \mathbf{P} \mathbf{b}$ je projekce vektoru \mathbf{b} na podprostor $\text{rng } \mathbf{A}$. Je $f'(\mathbf{x}_k) = -\mathbf{A}^T \mathbf{b}$, tedy podmínka na sestupnost směru \mathbf{v} zní $\mathbf{b}^T \mathbf{A} \mathbf{v} = \mathbf{b}^T \mathbf{P} \mathbf{b} > 0$. Ale \mathbf{P} je pozitivně semidefinitní (viz Cvičení 6.25), tedy $\mathbf{b}^T \mathbf{P} \mathbf{b} \geq 0$. Zde ovšem rovnost nastane jen když $\mathbf{b} = \mathbf{0}$ nebo $\mathbf{A}^T \mathbf{b} = \mathbf{0}$. Tedy \mathbf{v} je sestupný, za přirozených předpokladů $\mathbf{g}(\mathbf{x}_k) \neq \mathbf{0}$ a $f'(\mathbf{x}) \neq \mathbf{0}$.