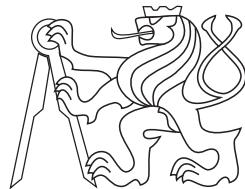


Optimalizace

Elektronická skripta předmětu A4B33OPT.
Text je průběhu semestru doplňován a vylepšován.
Toto je verze ze dne **28. ledna 2016**.

Tomáš Werner



Katedra kybernetiky
Fakulta elektrotechnická
České vysoké učení technické

Obsah

1 Formulace optimalizačních úloh	6
1.1 Matematické značení	6
1.1.1 Množiny	6
1.1.2 Zobrazení	7
1.1.3 Funkce a zobrazení více reálných proměnných	7
1.1.4 Extrémy funkce na množině	8
1.2 Obecná úloha spojité optimalizace	9
1.3 Cvičení	10
2 Maticová algebra	12
2.1 Operace s maticemi	12
2.2 Transpozice a symetrie	13
2.3 Hodnost a inverze	13
2.4 Determinant	14
2.5 Matice s jedním sloupcem nebo jedním řádkem	14
2.6 Matice sestavené z bloků	15
2.7 Hrubé chyby při práci s maticemi	16
2.8 Cvičení	17
3 Linearity	21
3.1 Lineární podprostory	21
3.2 Lineární zobrazení	22
3.2.1 Prostor obrazů	23
3.2.2 Nulový prostor	24
3.2.3 Některé věty o prostoru obrazů a nulovém prostoru	24
3.3 Afinní podprostor a zobrazení	25
3.4 Cvičení	27
4 Ortogonalita	30
4.1 Standardní skalární součin	30
4.2 Ortogonální vektory a podprostory	30
4.2.1 Čtyři podprostory definované maticí	31
4.3 Matice s ortonormálními sloupcí	31
4.4 QR rozklad	33
4.4.1 (*) Gramm-Schmidtova ortonormalizace	34
4.5 Cvičení	34

5 Nehomogenní lineární soustavy	37
5.1 Přibližné řešení ve smyslu nejmenších čtverců	37
5.1.1 Řešení pomocí QR rozkladu	39
5.1.2 Více o ortogonální projekci	39
5.1.3 Příklad použití: lineární regrese	40
5.1.4 Statistické odůvodnění kritéria nejmenších čtverců	41
5.2 Řešení s nejmenší normou	42
5.2.1 Pseudoinverze obecné matice s plnou hodností	43
5.3 Cvičení	43
6 Kvadratické funkce	47
6.1 Vlastní čísla a vektory	47
6.1.1 Spektrální rozklad	48
6.2 Kvadratická forma	49
6.3 Kvadratická funkce	51
6.3.1 Kvadrika	52
6.4 Cvičení	52
7 Rozklad podle singulárních čísel (SVD)	56
7.1 SVD ze spektrálního rozkladu	57
7.2 Nejbližší matice nižší hodnosti	58
7.3 Prokládání bodů podprostorem	59
7.3.1 Zobecnění na affinní podprostor	60
7.4 Přibližné řešení homogenní lineární soustavy	61
7.5 (★) Pseudoinverze obecné matice	61
7.6 Cvičení	62
8 Nelineární funkce a zobrazení	64
8.1 Spojitost	65
8.2 Parciální derivace	65
8.3 Totální derivace	66
8.3.1 Derivace složeného zobrazení	67
8.3.2 Derivace maticových výrazů	69
8.4 Směrová derivace	70
8.5 Gradient	71
8.6 Parciální derivace druhého řádu	72
8.7 Taylorův polynom	73
8.8 Cvičení	74
9 Analytické podmínky na lokální extrémy	76
9.1 Vlastnosti bodu vzhledem k podmnožině \mathbb{R}^n	76
9.2 Lokální extrémy	77
9.3 Volné lokální extrémy	77
9.4 Lokální extrémy vázané rovnostmi	79
9.4.1 Tečný a ortogonální prostor k povrchu	80
9.4.2 Podmínky prvního řádu	81
9.4.3 (★) Podmínky druhého řádu	82
9.5 Cvičení	84

10 Iterační algoritmy na volné lokální extrémy	88
10.1 Sestupné metody	88
10.2 Gradientní metoda	89
10.2.1 (*) Závislost na lineární transformaci souřadnic	89
10.3 Newtonova metoda	89
10.3.1 Použití na soustavy nelineárních rovnic	90
10.3.2 Použití na minimalizaci funkce	91
10.4 Nelineární metoda nejmenších čtverců	92
10.4.1 Gauss-Newtonova metoda	92
10.4.2 Rozdíl proti Newtonově metodě	94
10.4.3 Levenberg-Marquardtova metoda	94
10.5 Cvičení	94
11 Lineární programování	96
11.1 Speciální tvary úloh LP	97
11.1.1 Po částech affinní funkce	98
11.2 Některé aplikace LP	99
11.2.1 Optimální výrobní program	99
11.2.2 Směšovací (dietní) problém	100
11.2.3 Dopravní problém	100
11.3 Použití na nehomogenní lineární soustavy	101
11.3.1 Vektorové normy	101
11.3.2 Přibližné řešení přeuročených soustav	102
11.3.3 Lineární regrese	102
11.4 Cvičení	104
12 Konvexní množiny a polyedry	108
12.1 Čtyři kombinace a čtyři obaly	109
12.2 Operace zachovávající konvexitu množin	109
12.3 Konvexní polyedry	110
12.3.1 Stěny konvexního polyedru	111
12.3.2 Jak byste vypsal všechny vrcholy konvexního polyedru?	112
12.3.3 Dvě reprezentace konvexního polyedru	112
12.4 Cvičení	113
13 Simplexová metoda	115
13.1 Stavební kameny algoritmu	116
13.1.1 Přechod k sousední standardní bázi	116
13.1.2 Kdy je sousední bázové řešení přípustné?	117
13.1.3 Co když je celý sloupec nekladný?	118
13.1.4 Ekvivalentní úpravy účelového řádku	118
13.1.5 Co udělá přechod k sousední bázi s účelovou funkcí?	118
13.2 Základní algoritmus	119
13.3 Inicializace algoritmu	121
13.3.1 Dvoufázová simplexová metoda	122
13.4 Cvičení	124

14 Konvexní funkce	126
14.1 Konvexitá diferencovatelných funkcí	128
14.2 Vztah konvexní funkce a konvexní množiny	129
14.3 Operace zachovávající konvexitu funkcí	130
14.4 Cvičení	133
15 Konvexní optimalizační úlohy	135
15.1 Ekvivalentní transformace úlohy	136
15.2 Třídy konvexních optimalizačních úloh	137
15.2.1 Lineární programování (LP)	137
15.2.2 Kvadratické programování (QP)	138
15.2.3 Kvadratické programování s kvadratickými omezeními (QCQP)	139
15.2.4 Programování na kuželu druhého řádu (SOCP)	139
15.2.5 Semidefinitní programování (SDP)	140
15.3 Cvičení	140
16 Dualita v lineárním programování	143
16.1 Konstrukce duální úlohy	143
16.2 Věty o dualitě	144
16.3 Příklady na konstrukci a interpretaci duálních úloh	147
16.4 Cvičení	150
17 Lagrangeova dualita	151
17.1 Minimaxní nerovnost	151
17.2 Lagrangeova duální úloha	152
17.3 Silná dualita	153
17.4 Příklady	154

Kapitola 1

Formulace optimalizačních úloh

1.1 Matematické značení

Pokud potkáte ve skriptech slovo vysázené **tučně**, jde o nově definovaný pojem, který máte pochopit a zapamatovat si. Slova vysázená *kurzívou* znamenají bud' zdůraznění, nebo nový avšak všeobecně známý pojem. Odstavce, věty, důkazy, příklady a cvičení označené hvězdičkou (\star) jsou rozšiřující (a tedy obtížnější) a není nezbytné umět je ke zkoušce.

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
$A \times B$	kartézský součin množin, množina $\{(a, b) \mid a \in A, b \in B\}$
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

1.1.2 Zobrazení

Zobrazení 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 $a \in A$ přiřadí právě jeden prvek $b = f(a) \in B$. I když ‘zobrazení’ (*mapping*, *map*) znamená přesně totéž jako ‘funkce’ (*function*), slovo ‘funkce’ se obvykle používá pouze pro zobrazení do číselních množin (tedy $B = \mathbb{R}, \mathbb{Z}, \mathbb{C}$ apod.). Zobrazení se nazývá:

- *injektivní* (neboli prosté) pokud každý vzor má jiný obraz, tj. $f(a) = f(a') \Rightarrow a = a'$;
- *surjektivní* (neboli A na B) pokud každý obraz má aspoň jeden vzor, tj. $f(A) = B$, tj. pro každé $b \in B$ existuje $a \in A$ tak, že $b = f(a)$;
- *bijektivní* (neboli vzájemně jednoznačné) pokud je zároveň injektivní a surjektivní.

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

$$f(A') = \{f(a) \mid a \in A'\}. \quad (1.2)$$

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 $f(A') = \{1, 9, 16\}$.

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

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 $a \in A$.

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**. Zápis

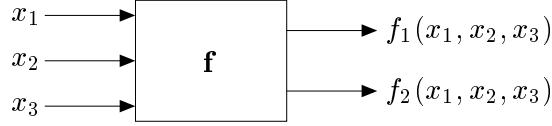
$$\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m \quad (1.4)$$

¹ Přesná 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 $b = b'$.

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*.

1.1.4 Extrémy funkce na množině

Necht' $Y \subseteq \mathbb{R}$. Prvek $y \in Y$ nazveme *nejmenší prvek* (neboli *minimum*) 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 je jasné, že Y nemůže mít více než jeden minimální prvek.

Mějme nyní funkci $f: X \rightarrow \mathbb{R}$, kde X je libovolná množina. Označme

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

obraz množiny X funkcí f . Pokud množina Y má nejmenší prvek, definujeme

$$\min_{x \in X} f(x) = \min\{ f(x) \mid x \in X \} = \min Y$$

a hovoříme o *minimu funkce f na množině X*. V tom případě existuje nejméně jeden prvek $x \in X$ tak, že $f(x) = \min Y$. Říkáme, že funkce *nabývá minimum* v bodě x . Pro podmnožinu množiny X , ve kterých se minimum nabývá, se používá symbol ‘argument minima’

$$\operatorname{argmin}_{x \in X} f(x) = \{ x \in X \mid f(x) = \min Y \}.$$

Podobně definujeme maximum funkce na množině. Minima a maxima funkce se souhrnně nazývají její *extrémy* nebo *optima*.

Jednodušeji můžeme říci, funkce $f: X \rightarrow \mathbb{R}$ nabývá svého minima na množině X v bodě $x \in X$, jestliže $f(x) \leq f(x')$ pro všechny $x' \in X$. Tato definice ovšem zamlčuje vztah k minimálnímu prvku množiny $Y \subseteq \mathbb{R}$.

Příklad 1.1.

- $\min_{x \in \mathbb{R}} |x - 1| = \min\{ |x - 1| \mid x \in \mathbb{R} \} = \min \mathbb{R}_+ = 0$, $\operatorname{argmin}_{x \in \mathbb{R}} |x - 1| = \{1\}$

- 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 $\max_{i=1}^5 a_i = 3$, $\operatorname{argmax}_{i=1}^5 a_i = \{3, 5\}$. □

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

1.2 Obecná úloha spojité optimalizace

Optimalizační úlohy se formulují jako hledání minima dané reálné funkce $f: X \rightarrow \mathbb{R}$ na dané množině X . Tato formulace je velmi obecná, neboť množina X může být zcela libovolná. Existují tři široké kategorie úloh:

- Pokud je množina X konečná (i když třeba velmi velká), mluvíme o *kombinatorické optimalizaci*. Její prvky mohou být např. cesty v grafu, konfigurace Rubikovy kostky, nebo textové řetězce konečné délky. Příkladem je nalezení nejkratší cesty v grafu nebo problém obchodního cestujícího.
- Pokud množina X obsahuje reálná čísla či reálné vektory (tedy $X \subseteq \mathbb{R}^n$), mluvíme o *spojité optimalizaci*. Příkladem je úloha lineárního programování.
- Pokud množina X obsahuje reálné funkce, mluvíme o *variačním počtu*. Příkladem je nalézt rovinnou křivku, která při dané délce obepíná co největší obsah.

Tento kurz se zabývá spojitou optimalizací. V *obecné úloze spojité optimalizace* je $X \subseteq \mathbb{R}^n$ množina řešení $(x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ soustavy m nerovnic a l rovnic

$$g_i(x_1, \dots, x_n) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m \quad (1.5a)$$

$$h_i(x_1, \dots, x_n) = 0, \quad i = 1, \dots, l \quad (1.5b)$$

pro dané funkce $g_1, \dots, g_m, h_1, \dots, h_l: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Ve vektorovém značení píšeme

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

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. Ve shodě s označením (1.3) se hledání minima funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ na množině X může zapsat jako

$$\min\{ f(\mathbf{x}) \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}, \mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \}, \quad (1.6)$$

To je zvykem zapisovat také takto:

$$\begin{aligned} & \min && f(x_1, \dots, x_n) \\ & \text{za podmínek} && g_i(x_1, \dots, x_n) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m \\ & && h_i(x_1, \dots, x_n) = 0, \quad i = 1, \dots, l. \end{aligned} \quad (1.7)$$

Příklad 1.2. Pastevec 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 neumějí plavat).

Označme strany obdélníka x, y . Řešíme úlohu

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

neboli

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

Zde máme $n = 2$, $m = 2$, $l = 1$.

Tuto úlohu dokážeme snadno vyřešit. Z omezení $2x + y = 100$ máme $y = 100 - 2x$, tedy místo původní úlohy můžeme řešit ekvivalentní úlohu bez omezení

$$\min_{x \in \mathbb{R}} x(100 - 2x).$$

Minimum kvadratické funkce $x(100 - 2x)$ snadno najdeme prostředky analýzy funkcí jedné proměnné. Nabývá se v bodě $x = 25$, tedy $y = 100 - 2x = 50$. Tyto hodnoty jsou kladné, tedy podmínky $x, y \geq 0$ jsou automaticky splněny a nemuseli jsme je explicitně uvažovat. \square

Příklad 1.3. Hledejme dvojici nejbližších bodů v rovině, z nichž jeden je na kružnici se středem v počátku a jednotkovým poloměrem a druhý je ve čtverci se středem v bodě $(2, 2)$ a jednotkovou stranou. Úlohu lze samozřejmě řešit snadno úvahou. Napišme ji ale ve tvaru (1.7).

Bod (x_1, x_2) na kružnici splňuje $x_1^2 + x_2^2 = 1$. Bod (x_3, x_4) ve čtverci splňuje $-\frac{1}{2} \leq x_3 - 2 \leq \frac{1}{2}$, $-\frac{1}{2} \leq x_4 - 2 \leq \frac{1}{2}$. Máme $n = 4$, $m = 4$, $l = 1$, a

$$X = \{(x_1, x_2, x_3, x_4) \mid x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0, \frac{3}{2} - x_3 \leq 0, x_3 - \frac{5}{2} \leq 0, \frac{3}{2} - x_4 \leq 0, x_4 - \frac{5}{2} \leq 0\}.$$

Řešíme úlohu

$$\begin{aligned} \min & \sqrt{(x_1 - x_3)^2 + (x_2 - x_4)^2} \\ \text{za podmínek } & x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0 \\ & \frac{3}{2} - x_3 \leq 0 \\ & x_3 - \frac{5}{2} \leq 0 \\ & \frac{3}{2} - x_4 \leq 0 \\ & x_4 - \frac{5}{2} \leq 0 \end{aligned} \quad \square$$

V matematické analýze se řešením úlohy (1.7) říká *extrémy funkce f vázané podmínkami* (1.5). 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, kriteriální) funkce.
- Prvky množiny X se nazývají *přípustná řešení*, což je vlastně protimluv, protože nemusí být řešeními úlohy (1.7). Prvkům množiny $\operatorname{argmin}_{\mathbf{x} \in X} f(\mathbf{x})$ se pak říká *optimální řešení*.
- Rovnice a nerovnice (1.5) se nazývají *omezující podmínky*, krátce *omezení*.
- Omezení (1.5a) příp. (1.5b) se nazývají omezení *typu nerovnosti* příp. *typu rovnosti*. Pokud omezení chybí ($m = l = 0$), jedná se o optimalizaci *bez omezení*.
- Pokud je množina X přípustných řešení prázdná (omezení si odporují), úloha se nazývá *nepřípustná*.
- Pokud se účelová funkce při splnění omezení může zlepšovat nade všechny meze, úloha se nazývá *neomezená*.

1.3 Cvičení

1.1. Vyřešte následující úlohy, přičemž slovní úlohy nejdříve formulujte ve tvaru (1.7). Stačí vám k tomu zdravý rozum a derivace funkcí jedné proměnné.

- $\min\{x^2 + y^2 \mid x > 0, y > 0, xy \geq 1\}$
- $\min\{(x - 2)^2 + (y - 1)^2 \mid x^2 \leq 1, y^2 \leq 1\}$

- c) Máte vyrobit papírovou krabici 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.
- d) Jaké má rozměry válec s jednotkovým objemem a nejmenším povrchem?
- e) Najděte rozměry půllitru, na jehož výrobu je třeba co nejméně skla. Tloušťka stěn je zanedbatelná.
- f) Najděte obsah největšího obdélníka vepsaného do kružnice s poloměrem 1.
- g) 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?
- h) Najděte bod v rovině na parabole s rovnicí $y = x^2$ nejblíže bodu $(3, 0)$.
- i) Hektarová oblast obdélníkového tvaru se má obehnat ze tří stran živým plotem, který stojí 1000 korun na metr, a ze zbývající strany obyčejným plotem, který stojí 500 korun na metr. Jaké budou rozměry oblasti při nejmenší ceně plotu?
- j) x, y jsou čísla v intervalu $[1, 5]$ takové, že jejich součet je 6. Najděte tato čísla tak, aby xy^2 bylo (a) co nejmenší a (b) co největší.
- k) 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 .
- l) *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.

1.2. Načrtněte následující množiny (proměnné x, y patří do \mathbb{R}):

- 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) $\{(x, y) \mid x^2 + y^2 = 1\} \times \mathbb{R}$
- f) $\{(x, y) \mid x > 0, y > 0, xy = 1\}$
- g) $\{(x, y) \mid \min\{x, y\} = 1\}$
- h) $\{1/x \mid x \geq 1\}$
- i) $\{1/x \mid |x| \geq 1\}$
- j) $\{e^{-x^2} \mid x \in \mathbb{R}\}$
- k) $\{x + y \mid x^2 + y^2 < 1\}$
- l) $\{x - y \mid x^2 + y^2 = 1\}$
- m) $\{x + y \mid |x| \geq 1, |y| \geq 1\}$

Kapitola 2

Maticová algebra

Reálná **matice** rozměru $m \times n$ je zobrazení $\{1, \dots, m\} \times \{1, \dots, n\} \rightarrow \mathbb{R}$. Toto zobrazení zapisujeme tabulkou

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

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

Budeme používat 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 (platí pro čtvercové i obdélníkové matice). Pokud \mathbf{A} je čtvercová diagonální ($m = n$), 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}).

2.1 Operace s maticemi

Na maticích jsou definovány následující operace:

- Součin skaláru¹ $\alpha \in \mathbb{R}$ a matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ je matice $\alpha\mathbf{A} = [\alpha a_{ij}] \in \mathbb{R}^{m \times n}$.
- Součet matic $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ je matice $\mathbf{A} + \mathbf{B} = [a_{ij} + b_{ij}] \in \mathbb{R}^{m \times n}$.
- **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

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^p a_{ik} b_{kj}. \tag{2.1}$$

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

¹ Slovo *skalár* v algebře reálných matic označuje reálné číslo. Přesněji, pohlížíme-li na množinu všech matic rozměru $m \times n$ jako na lineární prostor, jedná se o skaláry tohoto lineárního prostoru.

Vlastnosti maticového součinu:

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

Obecně neplatí $\mathbf{AB} = \mathbf{BA}$ (čtvercové matice obecně nekomutují).

Poznamenejme, že výraz $\alpha \mathbf{A}$ 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.

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 nutně plyne $a_{ii} = 0$).

2.3 Hodnost a inverze

Hodnost matice je velikost největší podmnožiny jejích lineárně nezávislých sloupců. Jinými slovy, je to dimenze lineárního obalu sloupců matice. Hodnost značíme rank \mathbf{A} . Platí (a není to snadné dokázat)

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

tedy místo pomocí sloupců lze hodnost ekvivalentně definovat pomocí řádků. Z toho plyne, pro každou matici je vždy

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

Pokud $\text{rank } \mathbf{A} = \min\{m, n\}$, říkáme, že matice má **plnou hodnost**. Čtvercová matice s plnou hodností se nazývá **regulární**, jinak je **singulární**. Uvedeme ještě tvrzení o hodnosti součinu matic, které dokážeme později v §3.2.1:

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

Pokud matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times m}$ a $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ splňují

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

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 čtvercové matice existuje právě tehdy, když tato matice je regulární. Proto se regulární matici říká také **invertovatelná**. V tom případě je jediná a je rovna levé inverzi. Pak mluvíme pouze o **inverzi** matice a značíme ji \mathbf{A}^{-1} . 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} .

2.4 Determinant

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

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

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

- Determinant je multilineární funkce sloupců matice, tj. je lineární funkcií libovolného sloupce, jsou-li všechny ostatní sloupce konstantní.
- Determinant je alternující funkce sloupců matice, tj. prohození dvou sousedních sloupců změní znaménko determinantu.
- $\det \mathbf{I} = 1$
- $\det \mathbf{A} = 0$ právě tehdy, když \mathbf{A} je singulární
- $\det \mathbf{A}^T = \det \mathbf{A}$
- $\det(\mathbf{AB}) = (\det \mathbf{A})(\det \mathbf{B})$
- $\det \mathbf{A}^{-1} = (\det \mathbf{A})^{-1}$ (plyne z předchozího pro $\mathbf{B} = \mathbf{A}^{-1}$)

2.5 Matice s jedním sloupcem nebo jedním řádkem

Matice s jedním sloupcem (tedy prvek $\mathbb{R}^{n \times 1}$) se také nazývá **sloupcový vektor**². Matice s jedním řádkem (tedy prvek $\mathbb{R}^{1 \times n}$) se také nazývá **řádkový vektor**.

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

$$\mathbf{x} = \underbrace{(x_1, \dots, x_n)}_{\text{uspořádaná } n\text{-tice}} = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n$$

matice $n \times 1$

² V lineární algebře má slovo *vektor* obecnější význam než v maticové algebře: znamená prvek lineárního prostoru (který se někdy také nazývá *vektorový prostor*).

tohoto prostoru budeme říkat krátce **vektory**. Jinak řečeno, slovem *vektor* (bez přívlastku) budeme rozumět *sloupcový vektor* nebo také uspořádanou n -tici čísel³.

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

- Pro matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ a vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, výraz \mathbf{Ax} je maticový součin matice $m \times n$ a matice $n \times 1$, což je (sloupcový) vektor délky m .
- 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 .
- 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} (viz §4.1).
- Pro $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ je \mathbf{xy}^T matice $m \times n$, které se někdy říká *vnější součin* vektorů \mathbf{x} a \mathbf{y} .

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 -té místě) značí i -tý (sloupcový) vektor standarní báze. Dimenze n vektoru je určena kontextem. Příklad: pro $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ je $\mathbf{e}_i^T \mathbf{x} = x_i$.

2.6 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, např. v prvním příkladu musí mít 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)!)

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

Příklad 2.2. Často je užitečné vnímat matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ jako matici sestavenou z bloků

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

³ Totéž bychom samozřejmě mohli udělat s řádky (a někdo to tak i dělá, např. počítačoví grafici).

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 $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m \in \mathbb{R}^n$.

Vyjádříme-li matici \mathbf{A} pomocí řádků a matici \mathbf{B} pomocí sloupců, je

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

Vyjádříme-li matici \mathbf{A} pomocí sloupců a matici \mathbf{B} pomocí řádků, je

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

2.7 Hrubé chyby při práci s maticemi

Při manipulaci s maticovými výrazy a rovnicemi dělají studenti někdy hrubé chyby, kterých se lze při alespoň minimální pozornosti vyvarovat. Uvedeme typické příklady těchto chyb.

Výraz je nesmyslný kvůli rozměrům matic

Jako první příklad uvedeme chybu, kdy výraz nemá smysl kvůli rozměrům matic a vektorů. První typ těchto chyb porušuje syntaktická pravidla, 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 příklad je použití ‘zlomku’ pro matice, např. $\frac{\mathbf{A}}{\mathbf{B}}$.

Ve druhém typu těchto chyb student napíše výraz nebo udělá závěr, který neodporuje syntaxi ale nedává smysl kvůli sémantice (významu), např.:

- Inverze čtvercové, ale evidentně singulární matice. Např. $(\mathbf{w} \mathbf{w}^T)^{-1}$, kde $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^3$.
- Předpoklad existence levé inverze široké matice nebo pravé inverze úzké matice. Např. napíšeme $\mathbf{Q} \mathbf{Q}^T = \mathbf{I}$, kde $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{5 \times 3}$.
- Tvrzení $\text{rank } \mathbf{A} = 5$, kde $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{3 \times 5}$. Je chybné, protože každá pětice vektorů z \mathbb{R}^3 je lineárně závislá.

Příklad 2.3. 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 $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{k \times p}$:

- Abychom se vyhnuli syntaktické chybě v násobení, musí být $m = k$.

- Jelikož součin $\mathbf{A}^T \mathbf{B}$ je rozměru $n \times p$, musí být $n = p$, abychom se vyhnuli syntaktické chybě při inverzi. Ted' 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 dostali bychom sémantickou chybu. Abychom se jí vyhnuli, musí být obě matice bud' 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

Použití neexistujících maticových identit

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

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

Neekvivalentní úpravy (ne)rovníc

Zde student udělá chybný úsudek při *neekvivalentní úpravě* rovnice či nerovnice. Ekvivalentní a neekvivalentní úpravy skalárních rovnic známe již ze základní školy. Např. operace 'odmocni rovnici' je neekvivalentní, nebot' sice $a = b$ implikuje $a^2 = b^2$, ale $a^2 = b^2$ neimplikuje $a = b$. Příklady:

- Úsudek, že $\mathbf{a}^T \mathbf{x} = \mathbf{a}^T \mathbf{y}$ implikuje $\mathbf{x} = \mathbf{y}$ (není pravda, ani když vektor \mathbf{a} je nenulový).
- Úsudek, že pokud $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{3 \times 5}$ a $\mathbf{AX} = \mathbf{AY}$, pak platí $\mathbf{X} = \mathbf{Y}$ (není pravda, protože \mathbf{A} nemá levou inverzi, tedy lineárně nezávislé sloupce).
- Úsudek, že $\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{B}^T \mathbf{B}$ implikuje $\mathbf{A} = \mathbf{B}$ (není pravda dokonce ani pro skaláry).

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 $(\mathbf{AB})^T = \mathbf{B}^T \mathbf{A}^T$, zkusíme např. `A=randn(5,3); B=randn(3,6); (A*B)' - B'*A'`. Samozřejmě to není důkaz.

2.8 Cvičení

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

- a) $\mathbf{AX} + \mathbf{B} = \mathbf{A}^2\mathbf{X}$
b) $\mathbf{X} - \mathbf{A} = \mathbf{XB}$
c) $2\mathbf{X} - \mathbf{AX} + 2\mathbf{A} = \mathbf{0}$
- 2.2. Řešíme soustavu rovnic $\{ \mathbf{b}_i = \mathbf{X}\mathbf{a}_i, i = 1, \dots, k \}$ pro neznámou matici $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{m \times n}$. 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 $\{ \mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \mathbf{x} = \mathbf{A}^T\mathbf{y} \}$, kde \mathbf{x}, \mathbf{y} jsou neznámé vektory a matice \mathbf{A} je široká s plnou hodností. Najděte jen vztah pro \mathbf{x} , vztah pro \mathbf{y} nás nezajímá. Ověřte v Matlabu pro náhodné zadání, které získáte příkazy $\mathbf{A}=\text{randn}(\mathbf{m}, \mathbf{n})$; $\mathbf{b}=\text{randn}(\mathbf{m}, 1)$.
- 2.4. Mějme soustavu rovnic pro neznámé \mathbf{x} a \mathbf{y} :
- $$\begin{aligned}\mathbf{Ax} + \mathbf{By} &= \mathbf{a} \\ \mathbf{Cx} + \mathbf{Dy} &= \mathbf{b}\end{aligned}$$
- a) Vyjádřete soustavu ve tvaru $\mathbf{Pu} = \mathbf{q}$.
b) Je-li $\mathbf{a}, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{b}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$, ukažte, že $\mathbf{x} = (\mathbf{A} - \mathbf{BD}^{-1}\mathbf{C})^{-1}(\mathbf{a} - \mathbf{BD}^{-1}\mathbf{b})$. Jakou to má výpočetní výhodu oproti počítání \mathbf{u} přímo ze soustavy $\mathbf{Pu} = \mathbf{q}$?
- 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 $\text{vec } \mathbf{A}$ je matice \mathbf{A} 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

$$\text{vec}(\mathbf{ABC}) = (\mathbf{C}^T \otimes \mathbf{A}) \text{vec } \mathbf{B}. \quad (2.10)$$

Použijte tohoto vzorce pro převedení 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) $\{ \mathbf{b}_i^T \mathbf{X} \mathbf{a}_i = 0, i = 1, \dots, k \}$
b) $\mathbf{AX} + \mathbf{XA}^T = \mathbf{C}$

2.7. Součet diagonálních prvků čtvercové matice se nazývá její *stopa*.

- a) Dokažte, že matice \mathbf{AB} a \mathbf{BA} mají stejnou stopu.
- b) Dokažte, že rovnice $\mathbf{AB} - \mathbf{BA} = \mathbf{I}$ nemá řešení pro žádné \mathbf{A}, \mathbf{B} .

2.8. *Komutátorem* dvou matic rozumíme matici $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{AB} - \mathbf{BA}$. Dokažte, že platí *Jacobiho identita* $[\mathbf{A}, [\mathbf{B}, \mathbf{C}]] + [\mathbf{B}, [\mathbf{C}, \mathbf{A}]] + [\mathbf{C}, [\mathbf{A}, \mathbf{B}]] = \mathbf{0}$.

2.9. Dokažte *Sherman-Morrisonův vzorec* (\mathbf{A} je čtvercová regulární a $\mathbf{v}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{u} \neq 1$):

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

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

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

- a) $\mathbf{A} + \mathbf{A}^T$ je symetrická
- b) $\mathbf{A} - \mathbf{A}^T$ je antisymetrická
- c) existuje symetrická \mathbf{B} a antisymetrická \mathbf{C} tak, že $\mathbf{A} = \mathbf{B} + \mathbf{C}$, přičemž \mathbf{B}, \mathbf{C} jsou dány jednoznačně.
- 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 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. (*) 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 $\mathbf{A}^T \mathbf{D} - \mathbf{C}^T \mathbf{B} = \mathbf{I}$.

Návod 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. 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 matici $\mathbf{A}, \mathbf{C}, \mathbf{X}$ 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.

Kapitola 3

Linearita

Množina $\mathbb{R}^{m \times n}$ matic pevného rozměru $m \times n$ spolu s operacemi $+$ (sčítání matic) a \cdot (násobení matice skalárem) tvoří lineární prostor nad tělesem reálných čísel. Speciálním případem je lineární prostor $\mathbb{R}^{n \times 1}$ jednosloupcových matic neboli, po ztotožnění popsaném v §2.5, lineární prostor \mathbb{R}^n všech n -tic reálných čísel. Zopakujte si z lineární algebry pojmem lineárního prostoru!

3.1 Lineární podprostupy

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

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

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

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

V opačném případě jsou **lineárně závislé**. **Lineární obal** vektorů $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k$ je množina

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

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

Množina $X \subseteq \mathbb{R}^n$ se nazývá **lineární podprostor** (častěji jen **podprostor**) lineárního prostoru \mathbb{R}^n , pokud libovolná lineární kombinace libovolných vektorů z X leží v X (říkáme, že množina X je uzavřená vůči lineárním kombinacím). **Báze** lineárního podprostoru $X \subseteq \mathbb{R}^n$ je lineárně nezávislá množina vektorů, jejíž lineární obal je X . Netriviální podprostor \mathbb{R}^n má nekonečný počet bází, každá báze má však stejný počet vektorů. Tento počet je **dimenzí** lineárního podprostoru, kterou značíme $\dim X$.

Definujeme¹ $\text{span} \emptyset = \{\mathbf{0}\}$. Z toho plyne, že nejmenší možný lineární podprostor je $\mathbf{0}$.

Příklad 3.1. 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 3.2. 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

¹Plyne z toho, že (3.1) je rovno $\mathbf{0}$ pro $k = 0$. To platí proto, že prázdná suma $\sum_{i \in \emptyset} a_i$ je definována jako nula, protože přirozeně chceme, aby $b + \sum_{i \in \emptyset} a_i = b$ pro libovolné b (podobně pro vektory).

Příklad 3.3. 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 3.4. 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 $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ nazveme **lineární**, pokud pro každé $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$ a $\alpha_1, \dots, \alpha_k \in \mathbb{R}$ platí

$$\mathbf{f}(\alpha_1\mathbf{x}_1 + \dots + \alpha_k\mathbf{x}_k) = \alpha_1\mathbf{f}(\mathbf{x}_1) + \dots + \alpha_k\mathbf{f}(\mathbf{x}_k), \quad (3.3)$$

tedy pokud ‘zobrazení lineární kombinace je rovno lineární kombinaci zobrazení’. Lze ukázat, že zobrazení je lineární právě tehdy, existuje-li matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ taková, že

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{Ax}. \quad (3.4)$$

Důkaz jedné implikace je snadný: zobrazení (3.4) je lineární, neboť

$$\mathbf{f}(\alpha_1\mathbf{x}_1 + \dots + \alpha_k\mathbf{x}_k) = \mathbf{A}(\alpha_1\mathbf{x}_1 + \dots + \alpha_k\mathbf{x}_k) = \alpha_1\mathbf{Ax}_1 + \dots + \alpha_k\mathbf{Ax}_k = \alpha_1\mathbf{f}(\mathbf{x}_1) + \dots + \alpha_k\mathbf{f}(\mathbf{x}_k),$$

což plyne z vlastností maticového součinu (viz §2.1). Důkaz obrácené implikace vynecháme, ale také není obtížný. Lze navíc ukázat, že matice \mathbf{A} je zobrazením \mathbf{f} určena jednoznačně. Říkáme proto, že matice \mathbf{A} *reprezentuje* lineární zobrazení \mathbf{f} .

Příklad 3.5. 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 (3.3). Ovšem je to patrné na první pohled, protože jej lze vyjádřit ve tvaru (3.4):

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

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

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{a}^T \mathbf{x} = a_1 x_1 + \dots + a_n x_n, \quad (3.5)$$

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

Podívejme se blíže na vzorec (3.4). Výraz \mathbf{Ax} je maticový součin matice $m \times n$ maticí $n \times 1$ (viz §2.5). Označíme-li $\mathbf{y} = \mathbf{Ax}$, je tedy podle (2.1)

$$y_i = \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \quad (3.6)$$

neboli

$$\begin{aligned} y_1 &= a_{11} x_1 + \dots + a_{1n} x_n \\ &\vdots \\ y_m &= a_{m1} x_1 + \dots + a_{mn} x_n. \end{aligned}$$

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

$$\mathbf{Ax} = [\mathbf{a}_1 \ \cdots \ \mathbf{a}_n] \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = x_1\mathbf{a}_1 + \cdots + x_n\mathbf{a}_n, \quad (3.7)$$

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

$$\mathbf{Ax} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1^T \\ \vdots \\ \mathbf{a}_m^T \end{bmatrix} \mathbf{x} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1^T \mathbf{x} \\ \vdots \\ \mathbf{a}_m^T \mathbf{x} \end{bmatrix}, \quad (3.8)$$

tedy složky vektoru \mathbf{Ax} jsou *skalárni součiny řádků* matice a vektoru \mathbf{x} . Všimněte si, že (3.7) a (3.8) jsou speciální případy (2.8) a (2.9) z Příkladu 2.2.

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

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

tedy \mathbf{BA} je matice složeného zobrazení $\mathbf{g} \circ \mathbf{f}$. Tedy matice složeného zobrazení je součinem matic jednotlivých zobrazení. Toto je hlavní důvod, proč je rozumné definovat maticové násobení jako (2.1): *násobení matic odpovídá skládání lineárních zobrazení reprezentovanými 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 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$.

Prostor obrazů matice \mathbf{A} (neboli prostor obrazů zobrazení \mathbf{f}) je množina

$$\text{rng } \mathbf{A} = \{ \mathbf{Ax} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \} \subseteq \mathbb{R}^m. \quad (3.9)$$

Interpretace prostoru obrazů:

- Je to množina $\mathbf{f}(\mathbb{R}^n)$ všech hodnot, jichž může zobrazení \mathbf{f} nabýt.
- Je to množina všech vektorů \mathbf{y} , pro které má lineární soustava $\mathbf{Ax} = \mathbf{y}$ řešení.
- Podle (3.7) je to lineární obal sloupců matice \mathbf{A} . Tedy je to lineární podprostor \mathbb{R}^m .

Z definice hodnosti je jasné, že

$$\dim \text{rng } \mathbf{A} = \text{rank } \mathbf{A}. \quad (3.10)$$

Věta 3.1. Následující tvrzení jsou ekvivalentní:

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

Důkaz.

- Ekvivalence $1 \Leftrightarrow 2 \Leftrightarrow 3 \Leftrightarrow 4 \Leftrightarrow 5$ snadno plynou z definice hodnosti a z (3.10).
- Implikace $4 \Rightarrow 6$ 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 $6 \Rightarrow 4$ položíme $\mathbf{x} = \mathbf{By}$. \square

3.2.2 Nulový prostor

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

$$\text{null } \mathbf{A} = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{Ax} = \mathbf{0} \} \subseteq \mathbb{R}^n. \quad (3.11)$$

Interpretace nulového prostoru:

- Je to množina všech vektorů, které se zobrazí na nulový vektor.
- Podle (3.8) 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 .

Věta 3.2. Následující tvrzení jsou ekvivalentní:

1. $\text{null } \mathbf{A} = \{ \mathbf{0} \}$ (tj. nulový prostor je triviální).
2. $\text{rank } \mathbf{A} = n$
3. Sloupce matice \mathbf{A} jsou lineárně nezávislé.
4. Zobrazení \mathbf{f} je injektivní (viz §1.1.2).
5. Matice \mathbf{A} má levou inverzi, tj. existuje \mathbf{B} tak, že $\mathbf{BA} = \mathbf{I}$.

Důkaz.

- Ekvivalence $1 \Leftrightarrow 3$ plyne z definice lineární nezávislosti (3.2), tj. $\mathbf{Ax} = \mathbf{0} \Rightarrow \mathbf{x} = \mathbf{0}$.
- Ekvivalence $2 \Leftrightarrow 3$ plyne z definice hodnosti.
- Tvrzení 4 říká, že pro každé \mathbf{x}, \mathbf{y} je $\mathbf{Ax} = \mathbf{Ay} \Rightarrow \mathbf{x} = \mathbf{y}$, neboť $\mathbf{A}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \mathbf{0} \Rightarrow \mathbf{x} - \mathbf{y} = \mathbf{0}$. To dokazuje $1 \Leftrightarrow 4$.
- Tvrzení 5 je ekvivalentní tomu, že matice \mathbf{A}^T má pravou inverzi, tj. $\mathbf{A}^T \mathbf{B}^T = \mathbf{I}$. Tedy $3 \Leftrightarrow 5$ plyne z Věty 3.1. \square

3.2.3 Některé věty o prostoru obrazů a nulovém prostoru

Následující věta je základní, její důkaz lze najít v každé učebnici lineární algebry.

Věta 3.3. Pro každou matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ platí

$$\dim \text{rng } \mathbf{A} + \dim \text{null } \mathbf{A} = n. \quad (3.12)$$

Neformální interpretace: Číslo $\dim \text{rng } \mathbf{A} = \text{rank } \mathbf{A}$ je dimenze podprostoru všech hodnot, které se mohou objevit na výstupu zobrazení. Číslo $\dim \text{null } \mathbf{A}$ je dimenze podprostoru vstupních hodnot, které zobrazení 'smáčkne' do nulového vektoru. Věta 3.3 říká, že každá dimenze na vstupu se bud' 'smáčkne' do nulového vektoru nebo se objeví na výstupu.

Dokažme nyní snadná tvrzení o prostoru obrazů a nulovém prostoru součinu matic.

Věta 3.4. Pro libovolné matice \mathbf{A}, \mathbf{B} platí:

$$\text{rng}(\mathbf{AB}) \subseteq \text{rng } \mathbf{A} \quad (3.13a)$$

$$\text{řádky } \mathbf{B} \text{ jsou lineárně nezávislé} \implies \text{rng}(\mathbf{AB}) = \text{rng } \mathbf{A} \quad (3.13b)$$

$$\text{null}(\mathbf{BA}) \supseteq \text{null } \mathbf{A} \quad (3.13c)$$

$$\text{sloupce } \mathbf{B} \text{ jsou lineárně nezávislé} \implies \text{null}(\mathbf{BA}) = \text{null } \mathbf{A} \quad (3.13d)$$

Důkaz.

- Inkluze (3.13a) říká, že jestliže soustava $\mathbf{z} = \mathbf{ABx}$ má řešení, pak i soustava $\mathbf{z} = \mathbf{Ay}$ má řešení. To ale platí, protože můžeme položit $\mathbf{y} = \mathbf{Bx}$.
- Rovnost (3.13b) pak plyne z implikace $3 \Rightarrow 4$ ve Větě 3.1.
- Inkluze (3.13c) platí, protože $\mathbf{Ax} = \mathbf{0}$ implikuje $\mathbf{BAX} = \mathbf{0}$ (po vynásobení maticí \mathbf{B} zleva).
- Rovnost (3.13d) platí, nebot' $\text{null } \mathbf{B} = \{\mathbf{0}\}$, což je implikace $3 \Rightarrow 1$ ve Větě 3.2. \square

Jako důsledek dostaneme slíbený důkaz nerovnosti (2.4). Z inkluze (3.13a) a rovnosti (3.10) máme $\text{rank}(\mathbf{AB}) \leq \text{rank } \mathbf{A}$. Ovšem díky (2.2) máme také

$$\text{rank}(\mathbf{AB}) = \text{rank}((\mathbf{AB})^T) = \text{rank}(\mathbf{B}^T \mathbf{A}^T) \leq \text{rank}(\mathbf{B}^T) = \text{rank } \mathbf{B}.$$

Dáno dohromady, máme $\text{rank}(\mathbf{AB}) \leq \min\{\text{rank } \mathbf{A}, \text{rank } \mathbf{B}\}$.

Dále uvedeme poměrně překvapivou větu, kterou budeme potřebovat později.

Věta 3.5. Pro libovolnou matici \mathbf{A} platí

$$\text{rng}(\mathbf{AA}^T) = \text{rng } \mathbf{A} \quad (3.14a)$$

$$\text{null}(\mathbf{AA}^T) = \text{null } \mathbf{A}^T. \quad (3.14b)$$

Důkaz. Dle (3.13c) je $\text{null}(\mathbf{AA}^T) \supseteq \text{null } \mathbf{A}^T$. Ale je také $\text{null}(\mathbf{AA}^T) \subseteq \text{null } \mathbf{A}^T$, nebot'

$$\mathbf{AA}^T \mathbf{x} = \mathbf{0} \implies \mathbf{x}^T \mathbf{AA}^T \mathbf{x} = (\mathbf{A}^T \mathbf{x})^T (\mathbf{A}^T \mathbf{x}) = 0 \implies \mathbf{A}^T \mathbf{x} = \mathbf{0}.$$

Zde druhá implikace platí proto, že pro libovolný vektor \mathbf{y} máme $\mathbf{y}^T \mathbf{y} = 0 \Rightarrow \mathbf{y} = \mathbf{0}$ (napište si součin $\mathbf{y}^T \mathbf{y}$ ve složkách!). Tedy jsme dokázali (3.14b).

Z (3.14b) a (3.12) máme $\dim \text{rng}(\mathbf{AA}^T) = \text{rank}(\mathbf{AA}^T) = \text{rank } \mathbf{A} = \dim \text{rng } \mathbf{A}$. Z (3.13a) máme $\text{rng}(\mathbf{AA}^T) \subseteq \text{rng } \mathbf{A}$. Ale pokud je podprostor podmnožinou jiného podprostoru a oba mají stejnou dimenzi, musí být stejný. To je jasné: libovolná báze $\text{rng}(\mathbf{AA}^T)$ leží také v $\text{rng } \mathbf{A}$, a protože oba podprostory mají stejnou dimenzi, je to také báze $\text{rng } \mathbf{A}$. \square

3.3 Afinní podprostor a zobrazení

Afinní kombinace vektorů $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$ je lineární kombinace (3.1), 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 affinních kombinací. **Afinní podprostor**² lineárního prostoru \mathbb{R}^n je množina $A \subseteq \mathbb{R}^n$, která je uzavřená vůči affinním kombinacím (tedy každá affinní kombinace vektorů z A leží v A).

² Všimněte si, že zde definujeme affinní *podprostor* lineárního prostoru, ale už ne affinní *prostor* sám o sobě. Definice affinního prostoru bez odkazu k nějakému lineárnímu prostoru existuje, ale neuvádíme ji.

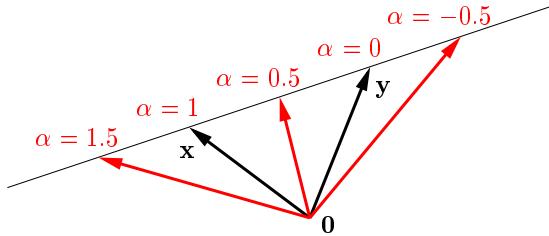
Příklad 3.6. Mějme dva lineárně nezávislé vektory $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^2$. Jejich lineární obal je množina

$$\text{span}\{\mathbf{x}, \mathbf{y}\} = \{ \alpha\mathbf{x} + \beta\mathbf{y} \mid \alpha, \beta \in \mathbb{R} \},$$

tedy rovina procházející těmito dvěma body a počátkem $\mathbf{0}$, tedy celý \mathbb{R}^2 . Jejich affinní obal je množina

$$\text{aff}\{\mathbf{x}, \mathbf{y}\} = \{ \alpha\mathbf{x} + \beta\mathbf{y} \mid \alpha, \beta \in \mathbb{R}, \alpha + \beta = 1 \} = \{ \alpha\mathbf{x} + (1 - \alpha)\mathbf{y} \mid \alpha \in \mathbb{R} \},$$

což je přímka procházející body \mathbf{x}, \mathbf{y} . Na obrázku jsou vektory $\alpha\mathbf{x} + (1 - \alpha)\mathbf{y}$ pro různé hodnoty α :



Podobně, lineární obal dvou lineárně nezávislých vektorů z \mathbb{R}^3 je rovina procházející těmito dvěma body a počátkem $\mathbf{0}$, avšak jejich affinní obal je přímka procházející těmito dvěma body. Affinní obal tří lineárně nezávislých bodů v \mathbb{R}^3 je rovina procházející těmito třemi body. \square

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

$$X + \mathbf{y} = \{ \mathbf{x} + \mathbf{y} \mid \mathbf{x} \in X \}. \quad (3.15)$$

Věta 3.6.

- Je-li A affinní podprostor \mathbb{R}^n a $\mathbf{x}_0 \in A$, pak množina $A - \mathbf{x}_0$ je lineární podprostor \mathbb{R}^n .
- Je-li X lineární podprostor \mathbb{R}^n a $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$, pak množina $X + \mathbf{x}_0$ je affinní podprostor \mathbb{R}^n .

Důkaz. Dokážeme jen první tvrzení, druhé se dokáže podobně. Chceme dokázat, že libovolná lineární kombinace vektorů z množiny $A - \mathbf{x}_0$ leží v $A - \mathbf{x}_0$. To znamená, že pro $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k \in A$ a $\alpha_1, \dots, \alpha_k \in \mathbb{R}$ musí být $\alpha_1(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0) + \dots + \alpha_k(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_0) \in A - \mathbf{x}_0$, tedy

$$\alpha_1(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0) + \dots + \alpha_k(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_0) + \mathbf{x}_0 = \alpha_1\mathbf{x}_1 + \dots + \alpha_k\mathbf{x}_k + (1 - \alpha_1 - \dots - \alpha_k)\mathbf{x}_0 \in A.$$

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

Věta ukazuje, že affinní podprostor není nic jiného než ‘posunutý’ lineární podprostor (tedy nemusí procházet počátkem, na rozdíl of lineárního podprostoru). **Dimenze affinního podprostoru** je dimenze tohoto lineárního podprostoru. Affinnímu podprostoru \mathbb{R}^n dimenze 0, 1, 2 a $n - 1$ se říká po řadě **bod**, **přímka**, **rovina** a **nadrovina**.

Zobrazení $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ nazveme **affinní**, pokud (3.3) platí pro všechna $\alpha_1 + \dots + \alpha_k = 1$, tedy zobrazení affinní kombinace je rovno affinní kombinaci zobrazení. Lze ukázat (proved'te!), že zobrazení $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ je affinní právě tehdy, když existuje matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ a vektor $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ tak, že

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{Ax} + \mathbf{b}. \quad (3.16)$$

Příklad 3.7. Zobrazení $\mathbf{f}: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$ definované jako $\mathbf{f}(x_1, x_2) = (x_1 + x_2 + 1, x_1 - x_2, 2x_1)$ je affinní. To bychom mohli dokázat ověřením podmínek (3.3) pro $\alpha_1 + \dots + \alpha_k = 1$. Ale je to patrné i z toho, že zobrazení lze vyjádřit ve tvaru (3.16):

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

□

Pro $m = 1$ je zobrazení (3.16) **affinní funkce**³ $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ a má tvar

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{a}^T \mathbf{x} + b = a_1 x_1 + \dots + a_n x_n + b, \quad (3.17)$$

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

3.4 Cvičení

- 3.1. Rozhodněte, zda následující množiny tvoří lineární nebo affinní podprostor \mathbb{R}^n a případně určete jeho dimenzi:
 - 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 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{Ax}$. Čemu je rovno \mathbf{A}^T ? Jakou hodnost 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 (3.4). Je toto zobrazení affinní? Pokud ano, napište ho ve formě (3.16). Obě odpovědi dokažte z definic.
- 3.4. Dokažte, že
 - a) množina řešení homogenní lineární soustavy $\mathbf{Ax} = \mathbf{0}$ je lineární podprostor,
 - b) množina řešení nehomogenní lineární soustavy $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ ($\mathbf{b} \neq \mathbf{0}$) je affinní podprostor.
- 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 hodnot 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 tedy co nejobecnější podmínky na rozměry matic, aby výroky byly pravdivé.

³ V lineární algebře známená slovo ‘lineární’ 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 affinní. Ovšem soustavě rovnic $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ se říká ‘lineární’ i v lineární algebře.

- 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. Najdi 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. Obecněji, máme k dvojic bodů $(\mathbf{p}_1, \mathbf{q}_1), \dots, (\mathbf{p}_k, \mathbf{q}_k)$, kde $\mathbf{p}_i \in \mathbb{R}^n$ a $\mathbf{q}_i \in \mathbb{R}^m$. Kolik dvojic potřebujeme, aby existovalo jediné afinní zobrazení \mathbf{f} tak, že $\mathbf{f}(\mathbf{p}_i) = \mathbf{q}_i$, $i = 1, \dots, k$?
- 3.10. Zjisti, zda existuje lineární funkce f splňující tyto podmínky:
- $f(1, 2) = 2$, $f(3, 4) = 3$.
 - $f(1, 2) = 2$, $f(3, 4) = 3$, $f(5, 6) = 4$.
 - $f(1, 0, 1) = -1$, $f(0, 1, 2) = 1$, $f(1, 1, 3) = 2$.
- 3.11. K dané matici \mathbf{A} hledáme libovolný nenulový vektor \mathbf{x} takový, že $\mathbf{Ax} = \mathbf{0}$.
- Navrhněte verzi Gaussovy eliminační metody, která takové \mathbf{x} najde, příp. pozná, že takové \mathbf{x} neexistuje.
 - Na základě toho navrhněte algoritmus, který najde bázi nulového prostoru matice \mathbf{A} .

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 $n = 1$ je množinou jediný bod, tedy afinní podprostor prostoru \mathbb{R} . Pro $n > 1$ je množina je prázdná (tedy není afinní podprostor), 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.

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

- 3.5.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. Rešíme soustavu $\mathbf{q}_i = \mathbf{A}\mathbf{p}_i + \mathbf{b}$, $i = 1, \dots, k$, pro \mathbf{A}, \mathbf{b} .

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.

3.11.b) Hledejte vektory báze jeden po druhém.

Kapitola 4

Ortogonalita

4.1 Standardní skalární součin

Prostor \mathbb{R}^n je přirozeně vybaven **standardním skalárním součinem**

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

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**¹

$$\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{\mathbf{x}^T \mathbf{x}} = (x_1^2 + \cdots + x_n^2)^{1/2},$$

Norma splňuje **trojúhelníkovou nerovnost** $\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\|_2 \leq \|\mathbf{x}\|_2 + \|\mathbf{y}\|_2$, která snadno plyne z Cauchyovy-Schwarzovy nerovnosti (umocněte a roznásobte). Norma měří *délku* vektoru \mathbf{x} . Úhel φ dvojice vektorů se spočítá jako

$$\cos \varphi = \frac{\mathbf{x}^T \mathbf{y}}{\|\mathbf{x}\|_2 \|\mathbf{y}\|_2}.$$

Eukleidovská norma indukuje **eukleidovskou metriku**

$$d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2,$$

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 vektory a podprostory

Dva vektory nazveme **ortogonální** (kolmé), pokud $\mathbf{x}^T \mathbf{y} = 0$, značíme také $\mathbf{x} \perp \mathbf{y}$.

Vektor $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ je **ortogonální** na podprostor $X \subseteq \mathbb{R}^n$ (což značíme $\mathbf{y} \perp X$), je-li $\mathbf{x} \perp \mathbf{y}$ pro každé $\mathbf{x} \in X$. Pro testování této podmínky stačí ověřit, že \mathbf{y} je kolmý na každý bázový vektor podprostoru X . Opravdu, platí-li $\mathbf{x}_i^T \mathbf{y} = 0$ pro každé $i = 1, \dots, k$, pak platí také $(\alpha_1 \mathbf{x}_1 + \cdots + \alpha_k \mathbf{x}_k)^T \mathbf{y} = 0$.

¹ Pro eukleidovskou normu používáme symbol $\|\cdot\|_2$ místo pouhého $\|\cdot\|$, neboť později potkáme i jiné normy.

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 $\mathbf{y} \in Y$. To lze napsat i jako $\mathbf{y} \perp X$ pro každé $\mathbf{y} \in Y$.

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

$$X^\perp = \{ \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{y} \perp X \} \quad (4.1)$$

všech vektorů z \mathbb{R}^n kolmých na podprostor X .

Příklad 4.1. Dvě na sebe kolmé přímky v \mathbb{R}^3 procházející počátkem jsou ortogonální podprostory, nejsou ale ortogonální doplněk jeden druhého. Ortogonální doplněk k přímce v \mathbb{R}^3 procházející počátkem je rovina procházející počátkem, která je na tuto přímku kolmá. \square

Příklad 4.2. Mějme podprostor $X = \text{span}\{(1, 2, 3), (0, 1, -1)\}$. Jeho ortogonální doplněk X^\perp je množina všech vektorů (x_1, x_2, x_3) splňujících soustavu rovnic

$$\begin{aligned} x_1 + 2x_2 + 3x_3 &= 0 \\ x_2 - x_3 &= 0. \end{aligned}$$

\square

Některé vlastnosti ortogonálního doplňku:

- $(X^\perp)^\perp = X$. Z toho plyne, že pokud $X^\perp = Y$, pak také $Y^\perp = X$. Tedy podprostory X, Y jsou ortogonálním doplňkem jeden druhého.
- $\dim X + \dim(X^\perp) = n$

4.2.1 Čtyři podprostory definované maticí

Každá matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ generuje čtyři **základní podprostory**:

- $\text{rng } \mathbf{A} = \{ \mathbf{Ax} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \} \subseteq \mathbb{R}^m$ je lineární obal sloupců \mathbf{A} ,
- $\text{null } \mathbf{A} = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{Ax} = \mathbf{0} \} \subseteq \mathbb{R}^n$ je množina 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 množina všech vektorů kolmých na sloupce \mathbf{A} .

(viz rovnosti (3.7) a (3.8)). Tyto podprostory jsou svázány vztahy

$$(\text{rng } \mathbf{A})^\perp = \text{null}(\mathbf{A}^T). \quad (4.2a)$$

$$(\text{null } \mathbf{A})^\perp = \text{rng}(\mathbf{A}^T), \quad (4.2b)$$

Tyto vztahy okamžitě plynou z definice ortogonálního doplňku. Stačí si uvědomit (dokažte!), že $\mathbf{y} \perp \text{span}\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k\}$ platí právě tehdy, když $\mathbf{y} \perp \mathbf{x}_i$ pro každé $i = 1, \dots, k$. Tedy jsou-li např. $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n$ sloupce matice \mathbf{A} , je

$$(\text{rng } \mathbf{A})^\perp = \{ \mathbf{y} \in \mathbb{R}^m \mid \mathbf{y} \perp \text{span}\{\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n\} \} = \{ \mathbf{y} \in \mathbb{R}^m \mid \mathbf{a}_1^T \mathbf{y} = \dots = \mathbf{a}_n^T \mathbf{y} = 0 \} = \text{null}(\mathbf{A}^T).$$

4.3 Matice s ortonormálními sloupcemi

Vektor \mathbf{u} nazveme **normalizovaný**, pokud má jednotkovou délku ($\|\mathbf{u}\|_2 = 1 = \mathbf{u}^T \mathbf{u}$). Množinu vektorů $\{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n\}$ nazveme **ortonormální**, pokud každý vektor z této množiny je normalizovaný a každá dvojice vektorů z této množiny je ortogonální, tedy

$$\mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_j = \begin{cases} 0 & \text{když } i \neq j, \\ 1 & \text{když } i = j. \end{cases} \quad (4.3)$$

Ortonormální množina vektorů je lineárně nezávislá. Pro důkaz vynásobme levou stranu implikace (3.2) skalárně vektorem \mathbf{u}_i , což dá

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

tedy $\alpha_i = 0$. Když toto uděláme pro každé i , máme $\alpha_1 = \cdots = \alpha_n = 0$.

Necht' sloupce matice $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ tvoří ortonormální množinu vektorů. Protože ortonormální vektory jsou lineárně nezávislé, je nutně $m \geq n$. Podmínu ortonormality (4.3) sloupců matice \mathbf{U} lze psát stručně jako

$$\mathbf{U}^T \mathbf{U} = \mathbf{I}_n. \quad (4.4)$$

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

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

Pro $\mathbf{x} = \mathbf{y}$ dostaneme, že se zachovává také eukleidovská norma, $\|\mathbf{f}(\mathbf{x})\|_2 = \|\mathbf{U}\mathbf{x}\|_2 = \|\mathbf{x}\|_2$. Tedy zobrazení \mathbf{f} zachovává délky a úhly. Taková zobrazení se nazývají **isometrie**.

Pokud je matice \mathbf{U} čtvercová ($m = n$), následující podmínky jsou ekvivalentní:

$$\mathbf{U}^T \mathbf{U} = \mathbf{I} \iff \mathbf{U}^T = \mathbf{U}^{-1} \iff \mathbf{U}\mathbf{U}^T = \mathbf{I}. \quad (4.5)$$

Důkaz není těžký. Protože sloupce \mathbf{U} jsou ortonormální, jsou lineárně nezávislé a \mathbf{U} je regulární. Vynásobením levé rovnice maticí \mathbf{U}^{-1} zprava získáme prostřední rovnici. Vynásobením prostřední rovnice maticí \mathbf{U} zleva získáme pravou rovnici. Zbylé implikace dokážeme analogicky.

Ekvivalence (4.5) říká, že má-li čtvercová matice ortonormální sloupce, má ortonormální i řádky. Dále říká, že inverze takové matice se spočítá jednoduše transpozicí. Čtvercové matici splňující podmínky (4.5) se říká **ortogonální matice**.

Zdůrazněme, že pokud \mathbf{U} je obdélníková s ortonormálními sloupcemi, neplatí $\mathbf{U}\mathbf{U}^T = \mathbf{I}$. Dále, pokud má \mathbf{U} ortogonální (ne však ortonormální) sloupce, nemusí mít ortogonální řádky².

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 $\det \mathbf{U}$ může nabývat dvou hodnot:

- Pokud $\det \mathbf{U} = 1$, matici se říká **speciální ortogonální** nebo také **rotační**, protože zobrazení $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{U}\mathbf{x}$ (což je 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 $\det \mathbf{U} = -1$, zobrazení \mathbf{f} je složením otočení a *zrcadlení* (reflexe) kolem nadroviny procházející počátkem.

Příklad 4.3. 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

² To je možná důvod, proč se čtvercové matici s ortonormálními sloupcemi (tedy i řádky) neříká 'ortonormální', ale 'ortogonální'. Obdélníková matice s ortonormálními sloupcemi a čtvercová matice s ortogonálními (ne však ortonormálními) sloupcemi zvláštní jména nemají.

Příklad 4.4. Zrcadlení (neboli reflexe) v \mathbb{R}^2 kolem přímky procházející počátkem a směrnicí $\tan(\varphi/2)$ je reprezentováno ortogonální maticí

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

Příklad 4.5. Permutační matice je čtvercová matice, jejíž sloupce jsou permutované vektory standardní báze. Např.

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

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

4.4 QR rozklad

Matice \mathbf{A} je **horní trojúhelníková**, pokud $a_{ij} = 0$ pro každé $i > j$ (neboli pod hlavní diagonálou jsou nuly) a je **dolní trojúhelníková**, pokud $a_{ij} = 0$ pro každé $i < j$ (neboli nad hlavní diagonálou jsou nuly). Horní/dolní trojúhelníková matice nemusí být čtvercová.

Věta 4.1. Každou matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ lze rozložit na součin

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{R}, \quad (4.6)$$

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.

Pokud \mathbf{A} je obdélníková úzká ($m > n$), má matice \mathbf{R} posledních $m - n$ řádků nulových (viz definice dolní trojúhelníkové matice) a tedy

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{R} = [\mathbf{Q}_1 \quad \mathbf{Q}_2] \begin{bmatrix} \mathbf{R}_1 \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} = \mathbf{Q}_1 \mathbf{R}_1 \quad (4.7)$$

kde $\mathbf{Q}_1 \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\mathbf{Q}_2 \in \mathbb{R}^{m \times (n-m)}$, $\mathbf{R}_1 \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Rozkladu $\mathbf{A} = \mathbf{Q}_1 \mathbf{R}_1$ se říká *redukovaný QR rozklad* a rozkladu (4.6) *plný QR rozklad*. V Matlabu je plný QR rozklad implementován příkazem `[Q,R]=qr(A)` a redukovaný příkazem `[Q,R]=qr(A,0)`. Zkoumejte tyto příkazy pomocí `help qr!`

Zajímavé vlastnosti QR rozkladu:

- Jelikož sloupce \mathbf{Q} jsou lineárně nezávislé, podle (3.13d) je $\text{null } \mathbf{A} = \text{null } \mathbf{R}$. Z rovnosti (3.12) pak máme $\text{rank } \mathbf{A} = \text{rank } \mathbf{R}$.
- Pokud \mathbf{A} má lineárně nezávislé sloupce, vztah $\text{rank } \mathbf{A} = \text{rank } \mathbf{R}$ znamená, že \mathbf{R}_1 je regulární. Podle (3.13b) je tedy $\text{rng } \mathbf{A} = \text{rng } \mathbf{Q}_1$. Vidíme, že v tomto případě lze redukovaný QR rozklad chápout jako nalezení ortonormální báze podprostoru $\text{rng } \mathbf{A}$.
- Jelikož \mathbf{Q} je ortogonální a $\mathbf{Q}_1, \mathbf{Q}_2$ mají ortonormální sloupce, je $(\text{rng } \mathbf{Q}_1)^\perp = \text{rng } \mathbf{Q}_2$.

QR rozklad má mnoho aplikací. 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

$$\mathbf{Rx} = \mathbf{Q}^T \mathbf{b}. \quad (4.8)$$

Toto je ekvivalentní úprava, nebot' \mathbf{Q} je regulární. Ale protože je \mathbf{R} trojúhelníková, soustavu jsme velmi zjednodušili. Např. pokud je \mathbf{A} čtvercová regulární, jediné řešení soustavy (4.8) lze levně najít zpětnou substitucí.

4.4.1 (*) Gramm-Schmidtova ortonormalizace

Gramm-Schmidtova ortonormalizace je algoritmus, který pro dané lineárně nezávislé vektory $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n \in \mathbb{R}^m$ najde vektory $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n \in \mathbb{R}^m$ takové, že

- $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n$ jsou ortonormální,
- pro každé $k = 1, \dots, n$ platí $\text{span}\{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_k\} = \text{span}\{\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_k\}$.

Myšlenka algoritmu je následující. Předpokládejme, že již máme vektory $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_{k-1}$. K vektoru \mathbf{a}_k přičteme takovou lineární kombinaci vektorů $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_{k-1}$, aby výsledek byl na všechny z nich ortogonální. Poté tento vektor normalizujeme. Tedy

$$\mathbf{q}'_k = \mathbf{a}_k - \sum_{j=1}^{k-1} r_{jk} \mathbf{q}_j, \quad \mathbf{q}_k = \frac{\mathbf{q}'_k}{\|\mathbf{q}'_k\|_2}. \quad (4.9)$$

Jak najdeme koeficienty r_{jk} ? Z iterace (4.9) vyplývá, že

$$\mathbf{a}_k = \sum_{j=1}^{k-1} r_{jk} \mathbf{q}_j + r_{kk} \mathbf{q}_k = \sum_{j=1}^k r_{jk} \mathbf{q}_j, \quad (4.10)$$

kde jsme označili $\|\mathbf{q}'_k\|_2 = r_{kk}$. Vztah (4.10) nám dovoluje spočítat koeficienty r_{jk} z požadavku na ortonormalitu vektorů $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_k$. Jeho vynásobením vektorem \mathbf{q}_i (pro libovolné i) dostaneme

$$r_{ik} = \mathbf{q}_i^T \mathbf{a}_k. \quad (4.11)$$

Algoritmus provede iteraci (4.9) pro $k = 1, \dots, n$. Zde je běh algoritmu pro $n = 3$:

$$\begin{aligned} \mathbf{q}'_1 &= \mathbf{a}_1, & \mathbf{q}_1 &= \mathbf{q}'_1 / \|\mathbf{q}'_1\|_2 \\ \mathbf{q}'_2 &= \mathbf{a}_2 - (\mathbf{q}_1^T \mathbf{a}_2) \mathbf{q}_1, & \mathbf{q}_2 &= \mathbf{q}'_2 / \|\mathbf{q}'_2\|_2 \\ \mathbf{q}'_3 &= \mathbf{a}_3 - (\mathbf{q}_1^T \mathbf{a}_3) \mathbf{q}_1 - (\mathbf{q}_2^T \mathbf{a}_3) \mathbf{q}_2, & \mathbf{q}_3 &= \mathbf{q}'_3 / \|\mathbf{q}'_3\|_2 \end{aligned}$$

Všimněte si, že výraz $(\mathbf{q}_j^T \mathbf{a}_i) \mathbf{q}_j$ je ortogonální projekce vektoru \mathbf{a}_i do jednotkového vektoru \mathbf{q}_j (viz §5.1.2).

Všechny rovnosti (4.10) lze napsat v maticovém tvaru $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$, kde vektory $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n$ jsou sloupce matice \mathbf{A} , vektory $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n$ jsou sloupce matice \mathbf{Q} , a matice $\mathbf{R} = [r_{ik}]$ je horní trojúhelníková. Vynásobením rovnosti $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$ zleva maticí \mathbf{Q}^T dostaneme $\mathbf{Q}^T \mathbf{A} = \mathbf{R}$, což jsou (dle (2.8)) rovnosti (4.11).

Vylepšenou formu Gramm-Schmidtovy ortonormalizace lze použít pro počítání QR rozkladu (čímž bychom tedy dokázali Větu 4.1). Vylepšení jednak zmenší zaokrouhlovací chyby a jednak dovolí lineární závislost sloupců \mathbf{A} .

4.5 Cvičení

- 4.1. Najděte bázi ortogonálního doplňku prostoru $\text{span}\{(0, 1, 1), (1, 2, 3)\}$.
- 4.2. Najděte ortonormální bázi podprostoru $\text{span}\{(1, 1, 1, -1), (2, -1, -1, 1), (-1, 2, 2, 1)\}$ pomocí QR rozkladu (použijte Matlab).
- 4.3. Dokažte, že součin ortogonálních matic je ortogonální matice.

- 4.4. Pro jaké n je matice $\text{diag}(-\mathbf{1}_n)$ (tedy diagonální matice se samými mínus jedničkami na diagonále) rotační?
- 4.5. Počet nezávislých parametrů (stupňů volnosti) ortogonální matice $n \times n$ se získá jako rozdíl počtu prvků matice (n^2) a počtu nezávislých rovnic v podmínce $\mathbf{U}^T \mathbf{U} = \mathbf{I}$. Nefornálně 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 .
- 4.6. 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.

- 4.7. Pokud $\|\mathbf{x}\|_2 = \|\mathbf{y}\|_2$, 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. Mějme 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 jsou vzájemně ortogonální. Najděte nenulový vektor \mathbf{x}_4 , který je ortogonální na vektory $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3$.
- 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 $\frac{1}{3} \begin{bmatrix} -1 & 2 & 2 \\ 2 & -1 & 2 \\ 2 & 2 & -1 \end{bmatrix}$.
- 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:
- $X \subseteq Y \implies X^\perp \supseteq Y^\perp$
 - $X + Y = \text{span}\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k, \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_l\}$ kde $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k\}$ je báze podprostoru X a $\{\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_l\}$ je báze podprostoru Y
 - (*) $(X + Y)^\perp = X^\perp \cap Y^\perp$
 - $(X \cap Y)^\perp = X^\perp + Y^\perp$
- 4.12. Jak byste levně spočítali absolutní hodnotu determinantu matice z jejího QR rozkladu?
- 4.13. Máme ortogonální matici $\mathbf{U} = [\mathbf{U}_1 \ \mathbf{U}_2]$ složenou ze dvou bloků \mathbf{U}_1 a \mathbf{U}_2 . Dokažte, že
- $\mathbf{U}_1^T \mathbf{U}_1 = \mathbf{I}$, $\mathbf{U}_2^T \mathbf{U}_2 = \mathbf{I}$
 - $\text{rng } \mathbf{U}_1 = (\text{rng } \mathbf{U}_2)^\perp$
 - $\mathbf{U}_1 \mathbf{U}_1^T + \mathbf{U}_2 \mathbf{U}_2^T = \mathbf{I}$

Nápověda a řešení

- 4.1. Např. $(1, 1, -1)$
- 4.2. Báze je $\{(1, 1, 1, -1)/2, (3, -1, -1, 1)/\sqrt{12}, (0, 1, 1, 2)/\sqrt{6}\}$
- 4.4. Musí být $\det \text{diag}(-\mathbf{1}_n) = (-1)^n > 0$, tedy pro sudá n .

- 4.5. $\binom{n}{2} = n(n - 1)/2$
- 4.8. $\mathbf{x}_4 = (-1, 1, 0, 1)$.
- 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 Gramm-Smidtovy ortogonalizace.)
- 4.10. Není matice náhodou ortogonální?
- 4.11.c) Plyne z (b).
- 4.11.d) Plyne z (c) s použitím $(X^\perp)^\perp = X$.

Kapitola 5

Nehomogenní lineární soustavy

Mějme soustavu m lineárních rovnic o n neznámých

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \quad (5.1)$$

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 tehdy, 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 affinní podprostor \mathbb{R}^n (viz Cvičení 3.4).

Soustava je **homogenní** pokud $\mathbf{b} = \mathbf{0}$ a **nehomogenní** pokud $\mathbf{b} \neq \mathbf{0}$. V této kapitole se zaměříme pouze na nehomogenní soustavy. Rozlišme tři případy:

- Soustava nemá řešení. To nastane právě tehdy, když $\mathbf{b} \notin \text{rng } \mathbf{A}$. Taková soustava se často nazývá **přeuročená**. 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 často nazývá **nedourčená**. V tom případě můžeme chtít z množiny řešení vybrat jediné, což je tématem §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 *rezidu*) byla co nejmenší. Úloha se nezmění (proč?), když místo eukleidovské normy budeme minimalizovat její čtverec $\|\mathbf{r}\|_2^2 = \mathbf{r}^T \mathbf{r} = r_1^2 + \cdots + r_m^2$. Tedy řešíme úlohu

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2. \quad (5.2)$$

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

Příklad 5.1. Soustava třech rovnic o dvou neznámých

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

je přeuročená. 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

Příklad 5.2. Hledejme příčku (nejkratší spojnice) dvou mimoběžných přímek v prostoru \mathbb{R}^n . Necht' i -tá přímka je zadána dvěma body, které na ní leží, označme je $\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i \in \mathbb{R}^n$ pro $i = 1, 2$. Chceme tuto úlohu zformulovat ve tvaru (5.2). Řešíme přeuročenou soustavu

$$\mathbf{p}_1 + t_1(\mathbf{q}_1 - \mathbf{p}_1) \approx \mathbf{p}_2 + t_2(\mathbf{q}_2 - \mathbf{p}_2)$$

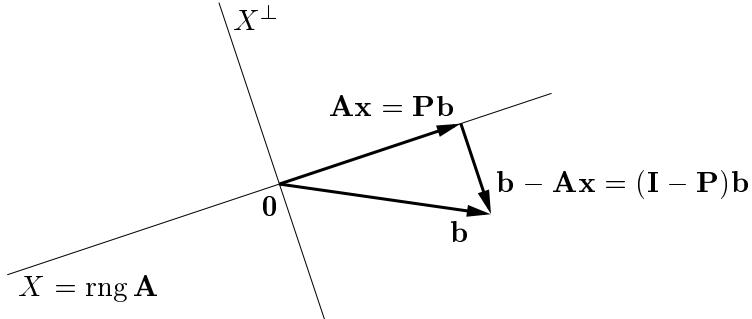
n rovnic a 2 neznámých ve smyslu nejmenších čtverců, tedy řešíme úlohu

$$\min_{t_1, t_2} \|(\mathbf{p}_1 + t_1(\mathbf{q}_1 - \mathbf{p}_1)) - (\mathbf{p}_2 + t_2(\mathbf{q}_2 - \mathbf{p}_2))\|_2^2.$$

To jde napsat jako (5.2), kde

$$\mathbf{A} = [\mathbf{q}_1 - \mathbf{p}_1 \quad \mathbf{q}_2 - \mathbf{p}_2] \in \mathbb{R}^{n \times 2}, \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} t_1 \\ t_2 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^2, \quad \mathbf{b} = \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1 \in \mathbb{R}^n. \quad \square$$

Úlohu (5.2) vyřešíme následující úvahou. Pokud $\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2$ (tedy vzdálenost bodů \mathbf{Ax} a \mathbf{b}) má být minimální, musí být vektor $\mathbf{b} - \mathbf{Ax}$ kolmý na prostor $\text{rng } \mathbf{A}$, tedy na každý sloupec matice \mathbf{A} . Obrázek ukazuje situaci:



Tuto podmínu lze zapsat jako $\mathbf{A}^T(\mathbf{Ax} - \mathbf{b}) = \mathbf{0}$, tedy

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

Soustava (5.3) se proto nazývá **normální rovnice** (normála = kolmice). Je to soustava n rovnic o n neznámých.

Soustava (5.3) má řešení pro libovolné \mathbf{A} a \mathbf{b} . To je sice intuitivně zřejmé z naší geometrické úvahy, ovšem není to důkaz. Důkaz plyne z rovnosti (3.14a), neboť $\mathbf{A}^T \mathbf{b} \in \text{rng}(\mathbf{A}^T) = \text{rng}(\mathbf{A}^T \mathbf{A})$, kde $\text{rng}(\mathbf{A}^T \mathbf{A}) = \text{rng}(\mathbf{A}^T)$ je rovnost (3.14a) použitá na matici \mathbf{A}^T .

Dle rovnosti (3.14a) je matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ regulární právě tehdy, když matice \mathbf{A} má hodnost n (tedy lineárně nezávislé sloupce). V tom případě můžeme soustavu (5.3) řešit pomocí inverze. Řešením je vektor $\mathbf{x} = \mathbf{A}^+ \mathbf{b}$, kde

$$\mathbf{A}^+ = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T. \quad (5.4)$$

Matrice (5.4) se nazývá **pseudoinverze úzké matice \mathbf{A}** . 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 (5.4) nelze použít. V tom případě soustava (5.3), a tedy i úloha (5.2), mají nekonečně mnoho (affinní podprostor) řešení (pozor, to je něco jiného, než že soustava (5.1) má nekonečně mnoho řešení!).

5.1.1 Řešení pomocí QR rozkladu

I když má matice \mathbf{A} lineárně nezávislé sloupce, řešení pomocí pseudoinverze (5.4) nemusí být vhodné pro numerické výpočty, kdy nezbytně používáme aritmetiku s konečnou přesností.

Příklad 5.3. Řešme soustavu $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ 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 $\mathbf{A}^T \mathbf{Ax} = \mathbf{A}^T \mathbf{b}$, 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 $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ došlo k zaokrouhlení a výsledná matice je singulární. Tedy soustava $\mathbf{A}^T \mathbf{Ax} = \mathbf{A}^T \mathbf{b}$ 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 $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$. Po dosazení do normální rovnice máme $\mathbf{R}^T \mathbf{Q}^T \mathbf{QRx} = \mathbf{R}^T \mathbf{Q}^T \mathbf{b}$. Po užití $\mathbf{Q}^T \mathbf{Q} = \mathbf{I}$ a násobení maticí \mathbf{R}^{-T} zleva (což je ekvivalentní operace) máme

$$\mathbf{Rx} = \mathbf{Q}^T \mathbf{b}. \quad (5.5)$$

To je formálně stejný vzorec jako (4.8), rozdíl je ale v tom, že v (4.8) jsme použili *plný* QR rozklad, zatímco zde redukovaný. Tedy soustava (5.5) není ekvivalentní původní soustavě $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ (protože \mathbf{Q} není čtvercová).

V Matlabu je řešení nehomogenní lineární soustavy implementováno v operátoru \backslash (*zpětné lomítko*). Pokud je soustava přeurovená, výsledkem je přibližné řešení ve smyslu nejmenších čtverců, přičemž použitý algoritmus používá QR rozklad. Pochopete všechny funkce operátoru *lomítko* a *zpětné lomítko* pomocí studia příkazů `help mrdivide` a `help mldivide`!

5.1.2 Více o ortogonální projekci

Rozvíjme geometrickou úvahu, pomocí niž jsme odvodili normální rovnici. Pokud \mathbf{x} je řešení normální rovnice, vektor \mathbf{Ax} 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 (5.4) máme $\mathbf{Ax} = \mathbf{Pb}$, kde

$$\mathbf{P} = \mathbf{AA}^+ = \mathbf{A}(\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \in \mathbb{R}^{m \times m}. \quad (5.6)$$

Dostali jsme důležitý výsledek: ortogonální projekce vektoru na podprostor X je lineární zobrazení reprezentované maticí \mathbf{P} . Proto se tato matice často nazývá **projektor**. Speciální případy:

- Pokud X je reprezentován ortonormální bází, tedy $\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{I}$, výraz (5.6) se zjednoduší na $\mathbf{P} = \mathbf{AA}^T$. Připomeňme (viz §4.3), že obdélníková matice \mathbf{A} s ortonormálními sloupcí nemusí mít ortonormální řádky, neboli $\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{I}$ neimplikuje $\mathbf{AA}^T = \mathbf{I}$. Nabízela se otázka, co je tedy matice \mathbf{AA}^T . Zde jste dostali odpověď!

- Speciálním případem ortogonální projekce je případ $\dim X = 1$, tedy projekce na přímku. Necht' $X = \text{span}\{\mathbf{a}\}$, kde předpokládáme $\|\mathbf{a}\|_2 = 1$. Pak $\mathbf{P} = \mathbf{a}\mathbf{a}^T$. Vzoreček

$$\mathbf{P}\mathbf{b} = \mathbf{a}\mathbf{a}^T\mathbf{b} = (\mathbf{a}^T\mathbf{b})\mathbf{a} \quad (5.7)$$

pro¹ průmět vektoru \mathbf{b} na normalizovaný vektor \mathbf{a} máte znát ze střední školy: skalární součin $\mathbf{a}^T\mathbf{b}$ je délka průmětu a $(\mathbf{a}^T\mathbf{b})\mathbf{a}$ je vektor o této délce ve směru vektoru \mathbf{a} .

Z naší geometrické úvahy dále snadno vidíme, co je prostorem obrazů a nulovým prostorem projektoru. Libovolný vektor z \mathbb{R}^m se promítne na podprostor X . Libovolný vektor kolmý na X se promítne do nulového vektoru $\mathbf{0}$. Tedy

$$\text{rng } \mathbf{P} = X = \text{rng } \mathbf{A}, \quad (5.8a)$$

$$\text{null } \mathbf{P} = X^\perp = (\text{rng } \mathbf{A})^\perp. \quad (5.8b)$$

Z obrázku je dále patrno, že vektor $\mathbf{b} - \mathbf{Ax} = \mathbf{b} - \mathbf{Pb} = (\mathbf{I} - \mathbf{P})\mathbf{b}$ je ortogonální projekcí vektoru \mathbf{b} na X^\perp . Tedy projektor na X^\perp je matice $\mathbf{I} - \mathbf{P}$. Projekce na X^\perp má přirozenou úlohu v problému (5.2): hodnota jeho minima je $\|\mathbf{b} - \mathbf{Ax}\|_2^2 = \|\mathbf{b} - \mathbf{Pb}\|_2^2 = \|(\mathbf{I} - \mathbf{P})\mathbf{b}\|_2^2$.

Poznámka. Obecnou projekcí se v lineární algebře rozumí každé lineární zobrazení $\mathbf{f}(\mathbf{y}) = \mathbf{Py}$, které splňuje $\mathbf{f}(\mathbf{f}(\mathbf{y})) = \mathbf{f}(\mathbf{y})$, tedy $\mathbf{PP} = \mathbf{P}^2 = \mathbf{P}$. To vyjadřuje pochopitelný požadavek, že když jednou vektor promítneme, tak další promítnutí na stejný podprostor ho již nezmění. Projekce obecně nemusí být ortogonální, může být šikmá – pak promítáme 've směru' podprostoru null \mathbf{P} na podprostor rng \mathbf{P} . Projekce je ortogonální, když² null $\mathbf{P} \perp \text{rng } \mathbf{P}$. To nastane právě tehdy, když kromě $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}$ platí navíc $\mathbf{P}^T = \mathbf{P}$ (důkaz tohoto tvrzení vynecháme). Zkontrolujte si, že projektor definovaný vzorcem (5.6) splňuje $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P} = \mathbf{P}^T$! □

5.1.3 Příklad použití: lineární regrese

Regrese je modelování závislosti proměnné $y \in \mathbb{R}$ na proměnné $t \in T$ regresní funkcí

$$y = f(t, \mathbf{x}),$$

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

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

Zvolme regresní funkci tak, aby pro každé t byla lineární funkcií parametrů \mathbf{x} . V to případě mluvíme o **lineární regresi**. Taková funkce je lineární kombinací

$$f(t, \mathbf{x}) = x_1\varphi_1(t) + \dots + x_n\varphi_n(t) = \boldsymbol{\varphi}(t)^T \mathbf{x} \quad (5.10)$$

¹Závorka ve výrazu $(\mathbf{a}^T\mathbf{b})\mathbf{a}$ je nutná, protože součin výrazů $\mathbf{a}^T\mathbf{b}$ a \mathbf{a} není maticový součin, ale násobení vektoru skalárem. Výraz bez závorky $\mathbf{a}^T\mathbf{b}\mathbf{a}$ by byl syntakticky chybný, protože matice \mathbf{b} a \mathbf{a} nelze vynásobit. Biz poznámka v §2.1.

² Pro obecnou čtvercovou matici samozřejmě neplatí, že její nulový prostor a prostor obrazů jsou navzájem ortogonální, tím méně ortogonálním doplňkem. Neplést se vztahy (4.2)!

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

$$\sum_{i=1}^m (y_i - f(t_i, \mathbf{x}))^2 = \|\mathbf{y} - \mathbf{Ax}\|_2^2,$$

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

Příklad 5.4. *Polynomiální regrese*⁴. Necht' $T = \mathbb{R}$ a $\varphi_j(t) = t^{j-1}$. Pak regresní funkce je polynom stupně $n-1$,

$$f(t, \mathbf{x}) = x_1 + x_2 t + x_3 t^2 + \cdots + x_n t^{n-1}.$$

Matice

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & t_1 & t_1^2 & \cdots & t_1^{n-1} \\ 1 & t_2 & t_2^2 & \cdots & t_2^{n-1} \\ & & & \vdots & \\ 1 & t_m & t_m^2 & \cdots & t_m^{n-1} \end{bmatrix}$$

je známá jako *Vandermondova matici*.

Speciálně pro $n=1$ úloha (5.9) je $\min_x \sum_i (y_i - x)^2$. Řešením je aritmetický průměr $x = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m y_i$ (ověřte!). \square

5.1.4 Statistické odůvodnění kritéria nejmenších čtverců

Možná se ptáte, proč se má nalezení přibližného rešení přeurovené soustavy formulovat zrovna jako (5.2). Nyní podáme statistický důvod, odkud se kritérium nejmenších čtverců vzalo.

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

$$\mathbf{y} = \mathbf{Ax} + \mathbf{r}, \quad (5.11)$$

kde $\mathbf{r} = (r_1, \dots, r_m)$ jsou náhodné proměnné modelující chyby měření $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_m)$. 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

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

³ Funkce φ_j se často nazývají *bázové funkce*, a to i tehdy (což je protimluv), když jsou lineárně závislé.

⁴ Nedejte 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 \mathbf{x} .

Dále použijeme *princip maxima věrohodnosti*. Ten říká, že parametry \mathbf{x} se mají najít tak, aby $p(\mathbf{r}) = p(\mathbf{y} - \mathbf{Ax})$ 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 $\sum_i r_i^2$.

5.2 Řešení s nejmenší normou

Předpokládejme nyní, že soustava (5.1) je nedourčená, neboli má nekonečně mnoho řešení. Necht' \mathbf{x}' je libovolný vektor splňující $\mathbf{Ax}' = \mathbf{b}$ (tzv. **partikulární řešení** soustavy). Protože pro každé $\mathbf{x} \in \text{null } \mathbf{A}$ je $\mathbf{A}(\mathbf{x}' + \mathbf{x}) = \mathbf{Ax}' = \mathbf{b}$, množinu řešení soustavy lze psát parametricky jako

$$\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{Ax} = \mathbf{b} \} = \{ \mathbf{x}' + \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in \text{null } \mathbf{A} \} = \mathbf{x}' + \text{null } \mathbf{A}. \quad (5.13)$$

Množina (5.13) je affinní podprostor prostoru \mathbb{R}^m , je to lineární podprostor $\text{null } \mathbf{A}$ prostoru \mathbb{R}^n posunutý o vektor \mathbf{x}' (viz §3.3).

Je často užitečné z této množiny řešení vybrat jediné podle nějakého kritéria. Přirozeným kritériem je minimalizovat euklidovskou normu (tedy vzdálenost od počátku) řešení, což vede na úlohu

$$\min \{ \| \mathbf{x} \|_2^2 \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{Ax} = \mathbf{b} \}. \quad (5.14)$$

Místo normy $\| \mathbf{x} \|_2$ opět minimalizujeme její čtverec. Tato úloha je známa jako řešení nehomogenní lineární soustavy **s nejmenší normou** (*least norm solution*). Podotkněme, že někdy je vhodné použít jiná kritéria než nejmenší euklidovskou normu, viz např. Cvičení 9.25.

Příklad 5.5. Soustava dvou rovnic o třech neznámých

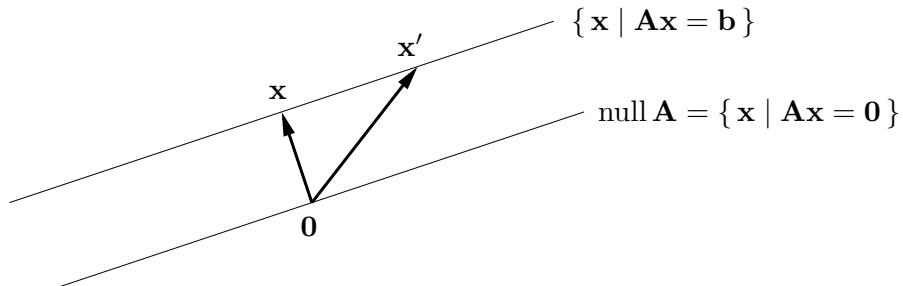
$$\begin{aligned} x + 2y + z &= 1 \\ -x + y + 2z &= 2 \end{aligned}$$

je nedourčená, tj. má nekonečně mnoho řešení. Množina řešení je

$$(x_0, y_0, z_0) + \text{null } \mathbf{A} = (1, -1, 2) + \text{span}\{(1, -1, 1)\} = \{ (1 + \alpha, -1 - \alpha, 2 + \alpha) \mid \alpha \in \mathbb{R} \}.$$

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

Úloha (5.14) by se pohodlně řešila metodou Lagrangeových multiplikátorů, to se ale naučíme až v pozdější kapitole. Nyní ji vyřešíme geometrickou úvahou. Tato úvaha bude naopak rozvíjkou pro pozdější odvození metody Lagrangeových multiplikátorů v §9.4.



Vektory \mathbf{x} a \mathbf{x}' jsou dvě různá řešení soustavy, ale pouze \mathbf{x} má nejmenší normu. Z obrázku je vidět, že řešení \mathbf{x} má nejmenší normu právě tehdy, když vektor \mathbf{x} je kolmý na nulový prostor matice \mathbf{A} . Tedy $\mathbf{x} \in (\text{null } \mathbf{A})^\perp = \text{rng}(\mathbf{A}^T)$, kde poslední rovnost je (4.2b). To znamená, že \mathbf{x} je lineární kombinací řádků \mathbf{A} . To znamená, že existuje vektor $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m$ takový, že $\mathbf{x} = \mathbf{A}^T \boldsymbol{\lambda}$. Pro vyřešení úlohy (5.14) tedy musíme vyřešit soustavu rovnic

$$\mathbf{A}^T \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{x}, \quad (5.15a)$$

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}. \quad (5.15b)$$

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

Vyřešme tuto soustavu. Dosadíme \mathbf{x} do druhé rovnice, $\mathbf{A}\mathbf{A}^T \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{b}$. Předpokládejme, že matice $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$ má plnou hodnost, což dle rovnosti (3.14a) nastane právě tehdy, když matice \mathbf{A} má hodnost m (tedy lineárně nezávislé řádky). Potom $\boldsymbol{\lambda} = (\mathbf{A}\mathbf{A}^T)^{-1}\mathbf{b}$. Dosazením do první rovnice dostaneme $\mathbf{x} = \mathbf{A}^+ \mathbf{b}$, kde

$$\mathbf{A}^+ = \mathbf{A}^T (\mathbf{A}\mathbf{A}^T)^{-1}. \quad (5.16)$$

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

Všimněte si, že úlohu (5.14) lze také vnímat jako hledání vzdálenosti afinního podprostoru $X = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \}$ od počátku $\mathbf{0}$. Čtverec této vzdálenosti je roven optimální hodnotě úlohy (5.14), tedy

$$d(X, \mathbf{0})^2 = (\mathbf{A}^+ \mathbf{b})^T (\mathbf{A}^+ \mathbf{b}) = \mathbf{b}^T (\mathbf{A}\mathbf{A}^T)^{-T} \mathbf{A}\mathbf{A}^T (\mathbf{A}\mathbf{A}^T)^{-1} \mathbf{b} = \mathbf{b}^T (\mathbf{A}\mathbf{A}^T)^{-1} \mathbf{b}. \quad (5.17)$$

5.2.1 Pseudoinverze obecné matice s plnou hodností

Pseudoinverzi úzké matice jsme definovali dříve vzorcem (5.4). Nyní shrňme: má-li matice \mathbf{A} plnou hodnost (tedy $\min\{m, n\}$), definujeme její pseudoinverzi jako

$$\mathbf{A}^+ = \begin{cases} (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T & \text{když } m \geq n, \\ \mathbf{A}^T (\mathbf{A}\mathbf{A}^T)^{-1} & \text{když } m \leq n. \end{cases} \quad (5.18)$$

Vektor $\mathbf{x} = \mathbf{A}^+ \mathbf{b}$ je v prvním případě řešení soustavy $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ ve smyslu nejmenších čtverců, ve druhém případě řešení soustavy s nejmenší normou. Pokud $m = n$, je v obou případech $\mathbf{A}^+ = \mathbf{A}^{-1}$ (ověřte!).

V případě, že \mathbf{A} nemá plnou hodnost, vzorec (5.18) nelze použít a pseudoinverzi definujeme jinak. K tomu se vrátíme později v §7.5.

5.3 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.
 - a) Pokud $m < n$, pak soustava má vždy řešení.
 - b) Pokud $m > n$, pak soustava nemá nikdy řešení.
 - c) 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 $\min_{\mathbf{u}} \|\mathbf{P}\mathbf{u} - \mathbf{q}\|_2^2$. Jako výsledek napište matice $\mathbf{P}, \mathbf{q}, \mathbf{u}$. Vzorem je Příklad 5.2.

- a) Hledá se bod $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$, který minimalizuje součet čtverců vzdáleností k daným bodům $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n \in \mathbb{R}^m$, tj. výraz $\sum_{i=1}^n \|\mathbf{a}_i - \mathbf{x}\|_2^2$. Dokažte navíc, že minimum se nabývá v těžišti $\mathbf{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{a}_i$.
- b) Jsou dány $\mathbf{a}, \mathbf{s}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$. Hledá se vzdálenost bodu \mathbf{y} od přímky $\{\mathbf{a} + t\mathbf{s} \mid t \in \mathbb{R}\}$.
- c) 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.
- d) Máme m nadrovin v prostoru \mathbb{R}^n , kde i -tá nadrovena 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.
- e) 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:
 1. Kolik řešení má soustava $\mathbf{P}\mathbf{u} = \mathbf{q}$? Dokažte algebraicky a objasňte fyzikální význam.
 2. Jsou sloupce \mathbf{P} lineárně nezávislé?

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

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' $X = \text{span}\{(-\frac{3}{5}, 0, \frac{4}{5}, 0), (0, 0, 0, 1), (\frac{4}{5}, 0, \frac{3}{5}, 0)\}$. Najdi projektry 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 singulární matice. Kdy je \mathbf{P} regulární? Jaká je v tom případě matice \mathbf{A} ve vzorci (5.6) a podprostor $X = \text{rng } \mathbf{A}^T$? Jaký je geometrický význam této situace?
- 5.9. (*) Pro $\|\mathbf{a}\|_2 = 1$ je $\mathbf{H} = \mathbf{I} - 2\mathbf{aa}^T$ známa jako *Householderova matic*. Transformace \mathbf{Hx} je zrcadlení vektoru \mathbf{x} kolem nadroviny s normálovým vektorem \mathbf{a} , proto se \mathbf{H} také někdy nazývá *elementární reflektor*.
- Odvod'te vzorec $\mathbf{H} = \mathbf{I} - 2\mathbf{aa}^T$ podobnou úvahou, jako jsme odvodili projektor.
 - Ukažte, že $\mathbf{H} = \mathbf{H}^T$ a $\mathbf{H}^T\mathbf{H} = \mathbf{I}$ (tj. matice je symetrická a ortogonální).
 - Ukažte, že $\det \mathbf{H} = -1$.
 - Co je \mathbf{Ha} ? Co je \mathbf{Hx} , když $\mathbf{a}^T\mathbf{x} = 0$? Ukažte algebraicky a odůvodněte geometricky.
- 5.10. (*) *RQ rozklad* rozloží matici $\mathbf{A} = \mathbf{RQ}$, kde \mathbf{R} je horní trojúhelníková a \mathbf{Q} je ortogonální. Jak byste spočítali RQ rozklad z QR rozkladu?
- 5.11. (*) Matice \mathbf{A} se nazývá *normální*, pokud $\mathbf{A}^T\mathbf{A} = \mathbf{AA}^T$. Příkladem je symetrické matice (ale ne každá normální matice je symetrická). Dokažte, že pro normální matice platí $\text{rng } \mathbf{A} \perp \text{null } \mathbf{A}$.
- 5.12. Dokažte následující vlastnosti pseudoinverze ze vztahu (5.18) pro libovolné matice plné hodnot:
- $\mathbf{A}^+ = \mathbf{A}^{-1}$ když \mathbf{A} je čtvercová
 - $(\mathbf{A}^+)^+ = \mathbf{A}$
 - $(\mathbf{A}^T)^+ = (\mathbf{A}^+)^T$
 - $\mathbf{AA}^+\mathbf{A} = \mathbf{A}$, $\mathbf{A}^+\mathbf{AA}^+ = \mathbf{A}^+$, $(\mathbf{AA}^+)^T = \mathbf{AA}^+$, $(\mathbf{A}^+\mathbf{A})^T = \mathbf{A}^+\mathbf{A}$
 - $\mathbf{A}^T = \mathbf{A}^T\mathbf{AA}^+ = \mathbf{A}^+\mathbf{AA}^T$
 - $(\mathbf{A}^T\mathbf{A})^+ = \mathbf{A}^+(\mathbf{A}^T)^+$, $(\mathbf{AA}^T)^+ = (\mathbf{A}^T)^+\mathbf{A}^+$
- 5.13. Uvažujme projektor (5.6). Báze podprostoru X , na který promítáme, je tvořena sloupci matice \mathbf{A} . Projektor \mathbf{P} se nesmí změnit, vezmemeli jinou bázi podprostoru. Různé báze podprostoru jsou dány sloupci matice $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{AC}$ pro různé regulární matice $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ (tedy \mathbf{C} je matice přechodu k jiné bázi). Ověřte, že vskutku $\tilde{\mathbf{A}}(\tilde{\mathbf{A}}^T\tilde{\mathbf{A}})^{-1}\tilde{\mathbf{A}}^T = \mathbf{A}(\mathbf{A}^T\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T$.
- 5.14. Jaké bude řešení normálních rovnic (5.3) v případě, že $\mathbf{b} \perp \text{rng } \mathbf{A}$? Vyřešte geometrickou úvahou a pak zkuste dokázat algebraicky.
- 5.15. Hledáme vektor \mathbf{x} , který minimalizuje $\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2 + \mu\|\mathbf{x}\|_2^2$. Převed'te na tvar (5.2).
- 5.16. Ze Cvičení 4.13 víme, že pro ortogonální matici $\mathbf{U} = [\mathbf{U}_1 \quad \mathbf{U}_2]$ platí $\mathbf{U}_1\mathbf{U}_1^T + \mathbf{U}_2\mathbf{U}_2^T = \mathbf{I}$. Jakou má tento vzorec souvislost s projekcí na podprostory $\text{rng } \mathbf{U}_1$ a $\text{rng } \mathbf{U}_2$?
- 5.17. Vztahy (5.8) jsme odvodili geometrickou úvahou. Dokažte je algebraicky.
- 5.18. Pomocí (5.17) odvod'te vzoreček pro vzdálenost nadroviny $\mathbf{a}^T\mathbf{x} = b$ od počátku, který máte znát ze střední školy.

Nápověda a řešení

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

- 5.2. $(x_1, x_2, x_3) = (2, 1, 0)/3$
- 5.3.c) Minimalizujte přes proměnné $\mathbf{y}, t_1, \dots, t_m$.
- 5.3.d) Nejprve si vzpomeňte či odvodíte, jak se spočítá vzdálenost bodu \mathbf{y} od nadroviny $\mathbf{a}^T \mathbf{x} = b$.
- 5.4. $f(\mathbf{x}) = (\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b})^T \mathbf{W}(\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b})$.
- 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) $(0, 0, 0)$
- 5.8. \mathbf{A} je regulární, tedy $X = \mathbb{R}^m$. Projektor je identita.
- 5.11. Vycházejte z rovnosti (3.14a).
- 5.14. $\mathbf{x} = \mathbf{0}$
- 5.17. Použijte (3.13) a (4.2).
- 5.18. $|b|/\|\mathbf{a}\|_2$

Kapitola 6

Kvadratické funkce

Ze základní školy znáte polynomy jedné proměnné, co jsou ale polynomy více proměnných?

Monom k -tého stupně n proměnných je výraz

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

kde $a_{k_1 \dots k_n} \in \mathbb{R}$, $k_1, \dots, k_n \in \{0, 1, \dots, k\}$, $k_1 + \dots + k_n = k$. **Polynom** n proměnných je lineární kombinace monomů, přičemž **stupeň polynomu** je stupeň jeho monomu 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 tří.

Vidíme, že affinní funkce (3.17) je jen jiný název pro polynom prvního stupně a lineární funkce (3.5) (také zvaná lineární forma) je jiný název pro homogenní polynom prvního stupně. Polynom druhého stupně se nazývá *kvadratická funkce* a homogenní polynom druhého stupně *kvadratická forma*¹. 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

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

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

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

To je soustava homogenních lineárních rovnic pro \mathbf{v} , která má netriviální řešení právě tehdy, když matice $\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}$ je singulární. Tedy vlastní čísla jsou kořeny polynomu

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

¹Názvosloví není zcela konzistentní, což je opět dáno tím, že některá jména pocházejí z lineární algebry a některá z matematické analýzy.

který 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 $\mathbf{0}$).

Příklad 6.1. Najděte vlastní čísla matice $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}$. Charakteristická rovnice je

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

Tato kvadratická rovnice má dva kořeny $\lambda = (5 \pm \sqrt{33})/2$. To jsou 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 (rozmyslete!), že charakteristický polynom má stupeň n . Podle základní věty algebry má tedy n komplexních kořenů, z nichž některé mohou být násobné. Označíme-li kořeny $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, platí

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

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

Nechť $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ jsou vlastní čísla matice a $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n$ jsou jim příslušné vlastní vektory. Rovnice (6.2) lze pro ně napsat jako jedinou maticovou rovnici (rozmyslete!)

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

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

Vlastní vektory mohou být lineárně závislé. Tato otázka není jednoduchá a podrobně ji zde diskutovat nebudeme. Řekneme jen, že existuje dobrý důvod vlastní vektory vybrat tak, aby hodnota matice \mathbf{V} byla největší možná.

Jak se počítají vlastní čísla a vektory? Charakteristický polynom je hlavně teoretičký nástroj a přímé hledání jeho kořenů není vhodné pro numerický výpočet². Pro větší matice se používají numerické iterační algoritmy, přičemž pro matice různého typu jsou vhodné různé algoritmy. Matlabská funkce `[V,D]=eig(A)` spočítá matice \mathbf{V} a Λ splňující (6.5).

6.1.1 Spektrální rozklad

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

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

²Naopak, hledání kořenů libovolného polynomu lze převést na hledání vlastních čísel matice, která se nazývá *doprovodná matice (companion matrix)* polynomu.

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

Je známo několik vlastností matic, které postačují pro diagonalizovatelnost. Nejznámější z nich je symetrie.

Věta 6.1. Necht' matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je symetrická. Pak všechna její vlastní čísla jsou reálná a existuje ortonormální množina n jejích vlastních vektorů.

Této větě se někdy říká **spektrální věta**. Podle ní pro každou symetrickou \mathbf{A} je v (6.5) matici $\mathbf{\Lambda}$ reálná a \mathbf{V} může být zvolena jako ortogonální ($\mathbf{V}^{-1} = \mathbf{V}^T$). Tedy

$$\mathbf{A} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^T = \sum_{i=1}^n \lambda_i \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i^T. \quad (6.7)$$

Zároveň jsme vpravo uvedli i druhou formu rozkladu (zkontrolujte, že druhá rovnost v (6.7) platí!), která je někdy vhodnější než maticová forma $\mathbf{V}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^T$. Všimněte si, že $\mathbf{v}_i \mathbf{v}_i^T$ jsou matice hodnosti 1.

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

6.2 Kvadratická forma

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

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} x_i x_j \quad (6.8)$$

pro nějakou matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

Příklad 6.2. Příkladem kvadratické formy dvou proměnných je funkce

$$f(x, y) = 2x^2 - 2xy + y^2 = \begin{bmatrix} x & y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}. \quad \square$$

Každou čtvercovou matici můžeme psát jako součet symetrické a antisymetrické matice:

$$\mathbf{A} = \underbrace{\frac{1}{2}(\mathbf{A} + \mathbf{A}^T)}_{\text{symetrická}} + \underbrace{\frac{1}{2}(\mathbf{A} - \mathbf{A}^T)}_{\text{antisymetrická}}$$

(viz Cvičení 2.11). Ale

$$\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T (\mathbf{A} + \mathbf{A}^T) \mathbf{x} + \frac{1}{2} \underbrace{\mathbf{x}^T (\mathbf{A} - \mathbf{A}^T) \mathbf{x}}_0,$$

nebot' $\mathbf{x}^T (\mathbf{A} - \mathbf{A}^T) \mathbf{x} = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{x}^T \mathbf{A}^T \mathbf{x} = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} - (\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x})^T = 0$, 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. Dále proto budeme předpokládat, že \mathbf{A} je symetrická.

Definice 6.1. Symetrická matice \mathbf{A} je

- 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, je zvykem hovořit o těchto vlastnostech jen pro symetrické matice. Někdy se tyto vlastnosti definují ne pro matici, ale abstraktльнěji pro kvadratickou formu.

Z Definice 6.1 je jasné, má-li kvadratická forma extrém a případně jaký:

- Je-li \mathbf{A} pozitivně [negativně] semidefinitní, pak v počátku se nabývá minimum [maximum].
- Je-li \mathbf{A} pozitivně [negativně] definitní, pak v počátku se nabývá ostré minimum [maximum].
- Je-li \mathbf{A} indefinitní, pak kvadratická forma nemá minimum ani maximum.

Tato tvrzení je snadné dokázat. Je-li \mathbf{A} pozitivně semidefinitní, kvadratická forma nemůže být 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} 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 nemůže to být minimum, protože pro nějaké \mathbf{y} je $\mathbf{y}^T \mathbf{A} \mathbf{y} < 0$.

Věta 6.2. 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.

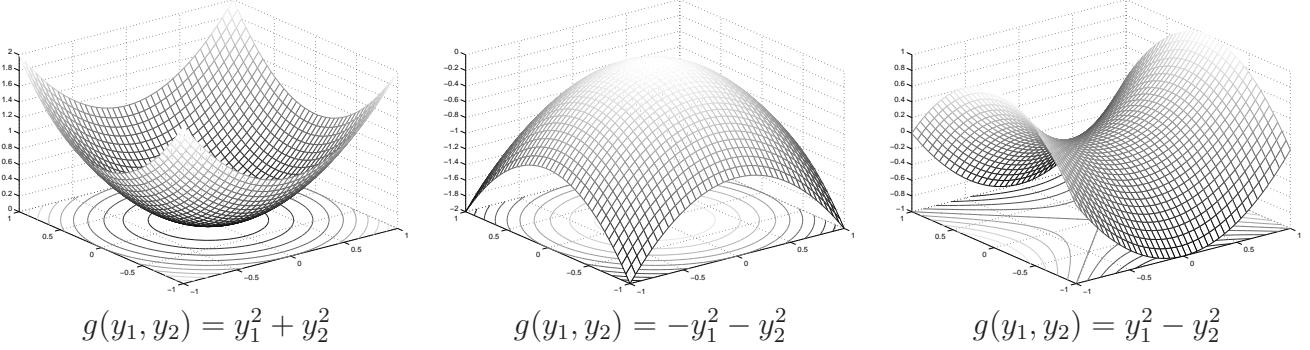
Důkaz. Z rozkladu podle vlastních čísel (6.7) máme

$$\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{x}^T \mathbf{V} \Lambda \mathbf{V}^T \mathbf{x} = \mathbf{y}^T \Lambda \mathbf{y} = \lambda_1 y_1^2 + \cdots + \lambda_n y_n^2, \quad (6.9)$$

kde $\mathbf{y} = \mathbf{V}^T \mathbf{x}$. Substituce $\mathbf{x} = \mathbf{V} \mathbf{y}$ tedy diagonalizovala matici kvadratické formy. Protože \mathbf{V} je regulární, definitnost matice \mathbf{A} je stejná jako definitnost matice Λ . Ale protože Λ je diagonální, její definitnost je okamžitě patrná ze znamének čísel λ_i . Např. výraz (6.9) je nezáporný pro každé \mathbf{y} právě tehdy, když všechna λ_i jsou nezáporná. \square

Označíme-li $g(\mathbf{y}) = \mathbf{y}^T \Lambda \mathbf{y}$, máme $f(\mathbf{x}) = g(\mathbf{V}^T \mathbf{x})$. Protože matice \mathbf{V} je ortogonální, transformace $\mathbf{y} = \mathbf{V}^T \mathbf{x}$ je isometrie, tedy funkce f a g se liší jen otočením (příp. zrcadlením) v prostoru vzorů.

Pro případ dvou proměnných ($n = 2$) si grafy diagonální formy g snadno představíme. Jsou-li obě vlastní čísla kladná, funkce g vypadá jako ‘dolík’. Jsou-li obě vlastní čísla záporná, funkce g vypadá jako ‘kopec’. Mají-li vlastní čísla opačná znaménka, tvarem je ‘sedlo’:



6.3 Kvadratická funkce

Kvadratická funkce je polynom (ne nutně homogenní) druhého stupně. Lze jej psát v maticovém tvaru

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c, \quad (6.10)$$

kde $\mathbf{A}^T = \mathbf{A} \neq \mathbf{0}$. Oproti kvadratické formě tedy přibyly lineární a konstantní členy. Všimněte si, že pro $n = 1$ je (6.10) 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 vektor $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$ a skalár y_0 takové, že

$$\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c = (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^T \mathbf{A} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + y_0. \quad (6.11)$$

Výraz na pravé straně je kvadratická forma s počátkem posunutým do bodu \mathbf{x}_0 , plus konstanta. Této úpravě se říká **doplňení na čtverec**. Znáte ji pro případ $n = 1$, neboť tak se na základní škole odvozuje vzorec pro kořeny kvadratické rovnice jedné proměnné. Spočtěme \mathbf{x}_0, y_0 z daných $\mathbf{A}, \mathbf{b}, c$. Roznásobením pravé strany dostaneme

$$\begin{aligned} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^T \mathbf{A} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + y_0 &= \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_0^T \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{x}_0^T \mathbf{A} \mathbf{x}_0 + y_0 \\ &= \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} - 2\mathbf{x}_0^T \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{x}_0^T \mathbf{A} \mathbf{x}_0 + y_0. \end{aligned}$$

Porovnáním členů stejněho stupně máme

$$\mathbf{b} = -2\mathbf{A} \mathbf{x}_0, \quad (6.12a)$$

$$c = \mathbf{x}_0^T \mathbf{A} \mathbf{x}_0 + y_0, \quad (6.12b)$$

z čehož spočítáme \mathbf{x}_0 a y_0 . Pokud soustava (6.12a) není řešitelná, 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.

Příklad 6.3. 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 6.4. 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

Příklad 6.5. Řešme znovu úlohu (5.2). Hledáme minimum kvadratické funkce

$$\begin{aligned} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2 &= (\mathbf{Ax} - \mathbf{b})^T (\mathbf{Ax} - \mathbf{b}) \\ &= (\mathbf{x}^T \mathbf{A}^T - \mathbf{b}^T) (\mathbf{Ax} - \mathbf{b}) \\ &= \mathbf{x}^T \mathbf{A}^T \mathbf{Ax} - \mathbf{x}^T \mathbf{A}^T \mathbf{b} - \mathbf{b}^T \mathbf{Ax} + \mathbf{b}^T \mathbf{b} \\ &= \mathbf{x}^T \mathbf{A}^T \mathbf{Ax} - 2\mathbf{b}^T \mathbf{Ax} + \mathbf{b}^T \mathbf{b}, \end{aligned} \quad (6.13)$$

kde jsme použili skutečnost, že skalár je roven své transpozici a tedy $\mathbf{b}^T \mathbf{Ax} = (\mathbf{b}^T \mathbf{Ax})^T = \mathbf{x}^T \mathbf{A}^T \mathbf{b}$. Extrém této kvadratické funkce můžeme najít doplněním na čtverec (viz §6.3). Soustava (6.12a) bude mít tvar $\mathbf{A}^T \mathbf{Ax}_0 = \mathbf{A}^T \mathbf{b}$ (pozor: \mathbf{A}, \mathbf{b} znamená něco jiného v (6.13) a v (6.12a)), tedy dostali jsme normální rovnici (5.3). Zároveň je jasné, že matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ je pozitivně semidefinitní, nebot' pro každé $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ máme

$$\mathbf{x}^T \mathbf{A}^T \mathbf{Ax} = (\mathbf{Ax})^T \mathbf{Ax} = \|\mathbf{Ax}\|_2^2 \geq 0. \quad (6.14)$$

Tedy v bodě \mathbf{x}_0 bude minimum. \square

6.3.1 Kvadrika

Vrstevnice kvadratické funkce se nazývá **kvadrika** (*quadric, quadric surface*). Tedy kvadrika je množina

$$\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c = 0 \}. \quad (6.15)$$

Pro $n = 2$ se kvadrika nazývá **kuželosečka** (*conic*). Důležitým speciálním případem kvadriky je **elipsoidní povrch**³, což je množina $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} = 1 \}$ pro \mathbf{A} pozitivně definitní.

6.4 Cvičení

- 6.1. Spočítejte vlastní čísla a vlastní vektory matic $\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ -1 & -3 \end{bmatrix}$, $\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$.

³ Někdy se nazývá též *elipsoid*, ale názvosloví není jednoznačné a někteří autoři elipsoidem rozumí množinu $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \leq 1 \}$. Rozdíl je stejný jako mezi sférou a koulí.

- 6.2. Napište rovnici, jejímiž kořeny jsou vlastní čísla matice $\begin{bmatrix} 2 & 0 & 3 \\ 0 & -2 & -1 \\ 3 & -1 & 2 \end{bmatrix}$.
- 6.3. Najděte všechna vlastní čísla a vlastní vektory (a) nulové, (b) jednotkové, (c) diagonální matice. Najděte vlastní čísla trojúhelníkové matice.
- 6.4. Známe vlastní čísla a vektory matice \mathbf{A} . Jaké jsou vlastní čísla a vektory matice $\mathbf{A} + \alpha \mathbf{I}$?
- 6.5. Máme kvadratickou formu dvou proměnných $f(x, y) = 3x^2 + 2xy + 3y^2$.
- Napište ji ve tvaru $f(x, y) = [x \ y] \mathbf{A} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$ se symetrickou \mathbf{A} .
 - Najděte $a, b \in \mathbb{R}$ a ortogonální \mathbf{U} tak, že $f(x, y) = au^2 + bv^2$, kde $\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = \mathbf{U} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$.
 - Nakreslete množinu bodů (u, v) splňujících $au^2 + bv^2 = 1$.
 - Transformujte tuto množinu do souřadnic (x, y) a nakreslete.
- 6.6. Kvadratickou funkci $f(x, y) = 2x^2 + 2xy - 3y^2 - x + 2y$ napište ve tvaru (6.10) se symetrickou \mathbf{A} .
- 6.7. Je množina $\{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid x^2 - 3xy + y^2 = 1\}$ elipsa nebo hyperbola? Odůvodněte.
- 6.8. Je známo, že libovolnou rotaci ve třírozměrném prostoru lze realizovat jako rotaci kolem jisté přímky (jdoucí počátkem) o jistý úhel. Geometrickou úvahou (tj. bez počítání) zjistěte co nejvíce o vlastních číslech a vektorech rotační matice rozměru 3×3 .
- 6.9. Ukažte, že je-li $\mathbf{A} = \mathbf{V}\Lambda\mathbf{V}^T$ spektrální rozklad symetrické matice \mathbf{A} , platí $\mathbf{A}^n = \mathbf{V}\Lambda^n\mathbf{V}^T$.
- 6.10. (\star) Ukažte, že dvě čtvercové matice komutují, právě když mají stejné vlastní vektory.
- 6.11. (\star) Nechť $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ a $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times m}$. Ukažte, že nenulová vlastní čísla matic \mathbf{AB} a \mathbf{BA} jsou stejná.
- 6.12. Pro dané matice určete, zda jsou pozitivně/negativně (semi)definitní nebo indefinitní:
- $$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$
- 6.13. Zjistěte, zda mají následující kvadratické funkce extrém a pokud ano, extrém najděte a určete jeho druh (minimum nebo maximum). Použijte doplnění na čtverec.
- $f(x, y) = x^2 + 4xy - 2y^2 + 3x - 6y + 5$
 - $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix} \mathbf{x} + [2 \ -1] \mathbf{x}$
- 6.14. Mějme matici $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & -3 \\ 2 & -4 \end{bmatrix}$. Která z následujících tvrzení jsou pravdivá?
- Výraz $\mathbf{x}^T \mathbf{Ax}$ je nezáporný pro každé $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$.
 - Výraz $\mathbf{x}^T \mathbf{Ax}$ je nekladný pro každé $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$.
 - Funkce $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{Ax}$ má v bodě $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ extrém.
- 6.15. (\star) Napište v Matlabu funkci `ellipse(Q)`, která vykreslí elipsu s rovnicí $\mathbf{x}^T \mathbf{Ax} = 1$ pro pozitivně definitní \mathbf{A} . Zamyslete se, jak byste postupovali při návrhu funkce `conic(Q)`, která vykreslí kuželosečku $\mathbf{x}^T \mathbf{Ax} = 1$ pro \mathbf{A} libovolné definitnosti (nezapomeňte, že obecná kuželosečka může být neomezená, tedy je nutno ji oříznout do daného obdélníku).

- 6.16. Dokažte, že matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ je pozitivně semidefinitní pro každou matici \mathbf{A} .
- 6.17. Dokažte, že matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \mu \mathbf{I}$ je pozitivně definitní pro každou matici \mathbf{A} a každé $\mu > 0$.
- 6.18. Dokažte, že (čtvercová symetrická) matice je pozitivně definitní právě tehdy, když její inverze je pozitivně definitní. Dokažte to nejdříve s použitím spektrálního rozkladu a pak bez použití spektrálního rozkladu.
- 6.19. Musí mít pozitivně semidefinitní matice na diagonále nezáporné prvky? Odpověď dokažte.
- 6.20. (*) Pozitivně semidefinitní symetrické matice lze vnímat jako zobecnění nezáporných čísel. Proto se někdy pozitivní semidefinitnost značí $\mathbf{A} \succeq 0$. Zápis $\mathbf{A} \succeq \mathbf{B}$ je pak zkratkou $\mathbf{A} - \mathbf{B} \succeq 0$. Na základě této analogie bychom očekávali, že:
- Pokud $\mathbf{A} \succeq \mathbf{B}$ a $\mathbf{C} \succeq \mathbf{D}$, potom $\mathbf{A} + \mathbf{C} \succeq \mathbf{B} + \mathbf{D}$.
 - Pokud $\mathbf{A} \succeq 0$ a $\alpha \geq 0$, potom $\alpha \mathbf{A} \succeq 0$.
 - Pokud $\mathbf{A} \succeq 0$, potom $\mathbf{A}^2 \succeq 0$.
 - Pokud $\mathbf{A} \succeq 0$ a $\mathbf{B} \succeq 0$, potom $\mathbf{AB} \succeq 0$.
 - Pokud $\mathbf{A} \succeq 0$ a $\mathbf{B} \succeq 0$, potom $\mathbf{ABA} \succeq 0$.

Které z těchto tvrzení platí? Dokažte nebo najděte protipříklady.

- 6.21. Dokažte, že relace \succeq z předchozího cvičení je částečné uspořádání, tj. reflexívni, tranzitivní a antisymetrická relace na množině symetrických matic $n \times n$.
- 6.22. Jsou-li λ_i vlastní čísla matice \mathbf{A} , dokažte $\lambda_1 \times \cdots \times \lambda_n = \det \mathbf{A}$ pro
- libovolnou diagonalizovatelnou matici,
 - (*) pro libovolnou čtvercovou matici.
- 6.23. V §5.1.2 jsme definovali projekci jako matici \mathbf{P} splňující $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}$. Geometrickou úvahou (tedy bez počítání) najděte aspoň jedno vlastní číslo a příslušný vlastní vektor projekce.
- 6.24. Dokažte, že pro symetrickou matici \mathbf{A} je výraz

$$\min_{\mathbf{x} \neq \mathbf{0}} \frac{\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}}{\mathbf{x}^T \mathbf{x}} = \min_{\mathbf{x}^T \mathbf{x} = 1} \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \quad (6.16)$$

roven nejmenšímu vlastnímu číslu matice \mathbf{A} .

- 6.25. (*) Geometrickou úvahou najděte aspoň dva vlastní vektory a příslušná vlastní čísla Hou-seholderovy matice ze Cvičení 5.9.
- 6.26. Pro libovolnou matici \mathbf{A} platí, že nenulová vlastní čísla matic $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ a \mathbf{AA}^T jsou stejná. Dokažte.

Nápověda a řešení

- 6.4. Vlastní čísla se zmenší o α . Vlastní vektory jsou stejné.

6.5.a) $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix}$

6.5.b) $a = 2, b = 4, \mathbf{U} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$

6.6. $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & -3 \end{bmatrix}, \mathbf{b} = [-1 \ 2], c = 0$

- 6.7. Hyperbola.
- 6.12. indefinitní, pozitivně definitní, indefinitní, pozitivně semidefinitní
- 6.13.a) Nemá extrém (má sedlo v bodě $(2, \frac{7}{4})$).
- 6.13.b) Má minimum v bodě $-(3, 1)/2$.
- 6.14. Žádné tvrzení neplatí. Ná pověda: je matice symetrická?
- 6.19. Musí.
- 6.22.a) Použijte spektrální rozklad $\mathbf{A} = \mathbf{V}^{-1} \boldsymbol{\Lambda} \mathbf{V}$.
- 6.24. Spektrálním rozkladem převed'te na problém $\min_{\mathbf{y}^T \mathbf{y} = 1} \mathbf{y}^T \boldsymbol{\Lambda} \mathbf{y}$.
- 6.26. Vynásobte rovnici $\mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{v} = \lambda \mathbf{v}$ zleva maticí \mathbf{A} .

Kapitola 7

Rozklad podle singulárních čísel (SVD)

Věta 7.1. Každou matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ lze rozložit jako

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^T \quad (7.1)$$

kde matice $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ je diagonální a $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ a $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ jsou ortogonální.

Diagonální prvky matice \mathbf{S} se nazývají **singulární čísla** matice \mathbf{A} a budeme je značit s_1, \dots, s_p , kde $p = \min\{m, n\}$. Je zvykem je sestupně seřadit,

$$s_1 \geq \dots \geq s_p \geq 0,$$

což lze vždy zajistit permutací sloupců \mathbf{U} a \mathbf{V} . Sloupce matice \mathbf{U} příp. \mathbf{V} se nazývají levé příp. pravé **singulární vektory** matice \mathbf{A} . Rozklad (7.1) se nazývá **rozklad podle singulárních čísel (Singular Value Decomposition, SVD)**.

Nechť $r = \text{rank } \mathbf{S}$ je počet nenulových singulárních čísel. Z rovnosti (3.13b) (použité na výraz (7.1) a na jeho transpozici) je $\text{rank } \mathbf{A} = \text{rank } \mathbf{S} = r$. Pišme (7.1) jako

$$\mathbf{A} = \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{U}_1 & \mathbf{U}_2 \end{bmatrix}}_{\mathbf{U}} \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{S}_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}}_{\mathbf{S}} \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{V}_1^T \\ \mathbf{V}_2^T \end{bmatrix}}_{\mathbf{V}^T} = \mathbf{U}_1 \mathbf{S}_1 \mathbf{V}_1^T \quad (7.2)$$

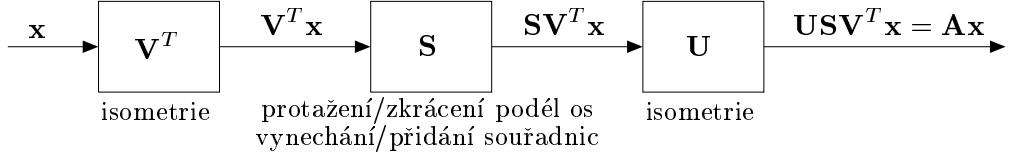
kde $\mathbf{S}_1 = \text{diag}(s_1, \dots, s_r) \in \mathbb{R}^{r \times r}$ je čtvercová diagonální matice, na jejíž diagonále jsou všechna nenulová singulární čísla. Velikosti bloků $\mathbf{U}_1, \mathbf{U}_2, \mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2$ a nulových bloků jsou určeny velikostí matice \mathbf{S}_1 (pokud nějaký blok má jeden rozměr nulový, považujeme ho za prázdný). Rozklad $\mathbf{A} = \mathbf{U}_1 \mathbf{S}_1 \mathbf{V}_1^T$ se nazývá **redukované SVD**.

Redukované SVD se tedy z plného SVD (7.1) získá tak, že matici \mathbf{S} ořízneme na čtvercovou $r \times r$, z matice \mathbf{U} vynecháme posledních $m - r$ sloupců a z matice \mathbf{V} vynecháme posledních $n - r$ sloupců. Plné SVD se z redukovaného SVD získá tak, že úzké matice \mathbf{U}_1 a \mathbf{V}_1 doplníme přidáním sloupců na čtvercové ortogonální, a čtvercovou matici \mathbf{S} doplníme nulami na obdélníkovou stejněho rozměru jako \mathbf{A} .

Příklad 7.1. Zde je příklad plného a redukovaného SVD matice 2×3 :

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \begin{bmatrix} 3 & 2 & 2 \\ 2 & 3 & -2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 1/\sqrt{18} & -1/\sqrt{18} & 4/\sqrt{18} \\ 2/3 & -2/3 & 1/3 \end{bmatrix} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^T \\ &= \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 1/\sqrt{18} & -1/\sqrt{18} & 4/\sqrt{18} \end{bmatrix} = \mathbf{U}_1 \mathbf{S}_1 \mathbf{V}_1^T \quad \square \end{aligned}$$

Vztah (7.1) říká, že každé lineární zobrazení je složením tří jednodušších lineárních zobrazení, a to isometrie \mathbf{V}^T , diagonálního zobrazení \mathbf{S} a isometrie \mathbf{U} . Lineární zobrazení reprezentované diagonální maticí je jednoduše protažení nebo zkrácení podél souřadnicových os, případně (pokud je matice široká) vynechání některých souřadnic nebo (pokud je matice úzká) přidání nulových souřadnic.



V řeči bází to znamená, že pro každé lineární zobrazení lze najít takové ortonormální báze prostoru vzorů a prostoru obrazů, že vzhledem k témtoto bázím je zobrazení diagonální.

SVD najde ortonormální báze všech čtyř podprostorů generovaných maticí (viz §4.2.1):

$$\text{rng } \mathbf{U}_1 = \text{rng } \mathbf{A}, \quad (7.3a)$$

$$\text{rng } \mathbf{V}_1 = \text{rng}(\mathbf{A}^T), \quad (7.3b)$$

$$\text{rng } \mathbf{U}_2 = \text{null}(\mathbf{A}^T), \quad (7.3c)$$

$$\text{rng } \mathbf{V}_2 = \text{null } \mathbf{A}. \quad (7.3d)$$

Rovnost (7.3a) plyne ze (3.13b), nebot' $\text{rng } \mathbf{A} = \text{rng}(\mathbf{U}_1 \mathbf{S}_1 \mathbf{V}_1^T) = \text{rng}(\mathbf{U}_1 \mathbf{S}_1) = \text{rng } \mathbf{U}_1$. Rovnost (7.3b) plyne z (7.3a), nebot' $\mathbf{A}^T = (\mathbf{U}_1 \mathbf{S}_1 \mathbf{V}_1)^T = \mathbf{V}_1 \mathbf{S}_1^T \mathbf{U}_1^T = \mathbf{V}_1 \mathbf{S}_1 \mathbf{U}_1^T$. Rovnosti (7.3c) a (7.3d) nyní plynou z (4.2) a Cvičení 4.13.

7.1 SVD ze spektrálního rozkladu

Dokažme nyní Větu 7.1.

Důkaz. Protože matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ je symetrická, ze spektrálního rozkladu (6.7) máme

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{V} \Lambda \mathbf{V}^T = [\mathbf{V}_1 \ \mathbf{V}_2] \begin{bmatrix} \Lambda_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{V}_1^T \\ \mathbf{V}_2^T \end{bmatrix}, \quad (7.4)$$

kde $\mathbf{V} = [\mathbf{V}_1 \ \mathbf{V}_2] \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je ortogonální a $\Lambda_1 \in \mathbb{R}^{r \times r}$ je diagonální regulární (má na diagonále nenulová vlastní čísla matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$). Matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ je pozitivně semidefinitní (Cvičení 6.16), tedy Λ má kladné diagonální prvky. Položme

$$\mathbf{S}_1 = \Lambda_1^{1/2}, \quad (7.5a)$$

$$\mathbf{U}_1 = \mathbf{A} \mathbf{V}_1 \mathbf{S}_1^{-1}, \quad (7.5b)$$

kde $\Lambda_1^{1/2} = \text{diag}(\sqrt{\lambda_1}, \dots, \sqrt{\lambda_n})$, takže $\Lambda_1^{1/2} \Lambda_1^{1/2} = \Lambda_1$. Ověříme

$$\mathbf{U}_1^T \mathbf{U}_1 = \mathbf{S}_1^{-1} \mathbf{V}_1^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{V}_1 \mathbf{S}_1^{-1} = \mathbf{S}_1^{-1} \mathbf{V}_1^T \mathbf{V}_1 \Lambda_1 \mathbf{V}_1^T \mathbf{V}_1 \mathbf{S}_1^{-1} = \mathbf{S}_1^{-1} \Lambda_1 \mathbf{S}_1^{-1} = \mathbf{I}, \quad (7.6a)$$

$$\mathbf{U}_1 \mathbf{S}_1 \mathbf{V}_1^T = \mathbf{A} \mathbf{V}_1 \mathbf{S}_1^{-1} \mathbf{S}_1 \mathbf{V}_1^T = \mathbf{A} \mathbf{V}_1 \mathbf{V}_1^T = \mathbf{A}. \quad (7.6b)$$

Matici \mathbf{U}_2 zvolíme libovolně tak, aby $\mathbf{U} = [\mathbf{U}_1 \ \mathbf{U}_2]$ byla ortogonální.

Rovnost (7.6b) je očividná, pokud \mathbf{V}_1 je čtvercová a tedy $\mathbf{V}_1\mathbf{V}_1^T = \mathbf{I}$. Tato rovnost ale platí, i když \mathbf{V}_1 není čtvercová (tedy je obdélníková úzká). To ukážeme např. takto. Vynásobíme-li (7.4) maticí \mathbf{V}^T zleva a \mathbf{V} zprava, dostaneme

$$\begin{bmatrix} \mathbf{V}_1^T \\ \mathbf{V}_2^T \end{bmatrix} \mathbf{A}^T \mathbf{A} [\mathbf{V}_1 \quad \mathbf{V}_2] = \begin{bmatrix} \mathbf{\Lambda}_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}. \quad (7.7)$$

Roznásobením levé strany získáme $(\mathbf{A}\mathbf{V}_2)^T \mathbf{A}\mathbf{V}_2 = \mathbf{0}$, tedy (dle (3.14a)) $\mathbf{A}\mathbf{V}_2 = \mathbf{0}$. Dále je $\mathbf{V}_1\mathbf{V}_1^T + \mathbf{V}_2\mathbf{V}_2^T = \mathbf{I}$ (Cvičení 4.13). Nyní

$$\mathbf{A}\mathbf{V}_1\mathbf{V}_1^T = \mathbf{A}(\mathbf{I} - \mathbf{V}_2\mathbf{V}_2^T) = \mathbf{A} - \mathbf{A}\mathbf{V}_2\mathbf{V}_2^T = \mathbf{A}. \quad \square$$

Důkaz ukazuje, že SVD lze spočítat ze spektrálního rozkladu matice¹ $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$. Tento způsob ale není numericky nejvhodnější, protože výpočet součinu $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ může vést ke zbytečným zao-krouhlovacím chybám (viz §5.1.1). Na SVD se proto používají algoritmy, které se explicitnímu výpočtu $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ vyhýbají².

Matlabský příkaz `[U,S,V]=svd(A)` počítá plné SVD. Redukované SVD není přímo implementované, dostaneme jej ale z příkazu `[U,S,V]=svd(A, 'econ')`, který vrátí $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m \times p}$, $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{p \times p}$ a $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n \times p}$.

Poznámka o numerické lineární algebře. Potkali jsme již tři rozklady matic: QR, spektrální rozklad, SVD. Je ještě několik jiných zajímavých rozkladů. Návrh numerických algoritmů operace s maticemi, řešení soustav lineárních rovnic a rozklady matic vektorů je předmětem *numerické lineární algebry*. Existují volně dostupné softwarové balíky na numerickou lineární algebru, např. LAPACK a BLAS. Matlab je postaven na balíku LAPACK.

7.2 Nejbližší matice nižší hodnosti

Frobeniova norma matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ je číslo

$$\|\mathbf{A}\|_F = \left(\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n a_{ij}^2 \right)^{1/2} = \left(\sum_{j=1}^n \|\mathbf{a}_j\|_2^2 \right)^{1/2} \quad (7.8)$$

kde $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n$ jsou sloupce matice \mathbf{A} . Zjevně $\|\mathbf{A}\|_F = \|\mathbf{A}^T\|_F$. Podobně jako eukleidovská norma vektoru, Frobeniova norma se nezmění transformací řádků nebo sloupců matice isometrií, neboli

$$\mathbf{U}^T \mathbf{U} = \mathbf{I}, \quad \mathbf{V}^T \mathbf{V} = \mathbf{I} \implies \|\mathbf{A}\|_F = \|\mathbf{U}\mathbf{A}\|_F = \|\mathbf{A}\mathbf{V}^T\|_F = \|\mathbf{U}\mathbf{A}\mathbf{V}^T\|_F. \quad (7.9)$$

To snadno plyne (promyslete!) z (7.8).

Řešme nyní úlohu, ve které chceme k dané matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ hodnoti r najít nejbližší (ve smyslu Frobeniovy normy) matici \mathbf{A}' dané nižší hodnoti $r' \leq r$. Tedy řešíme úlohu

$$\min \{ \|\mathbf{A} - \mathbf{A}'\|_F \mid \mathbf{A}' \in \mathbb{R}^{m \times n}, \text{rank } \mathbf{A}' = r' \}. \quad (7.10)$$

Řešení je dáno následující větou, kterou uvádíme bez důkazu.

¹V důkazu bychom mohli použít spektrální rozklad matice $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$ místo $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ (srov. Cvičení 6.26).

²Na druhou stranu, pokud nám možné snížení přesnosti neohrozí, počítání SVD spektrálním rozkladem může být rychlejší. Např. pokud je $m \gg n$ a potřebujeme spočítat jen matice \mathbf{V} a \mathbf{S} (a nepotřebujeme \mathbf{U}), spektrální rozklad matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ bude typicky rychlejší, protože velikost této matice je malá ($n \times n$).

Věta 7.2 (Eckart-Young). Nechť $\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^T$ je SVD matice \mathbf{A} . Nechť \mathbf{S}' je diagonální matice, která vznikne vynulováním $r - r'$ nejmenších nenulových diagonálních prvků matice \mathbf{S} (tj. $s'_i = s_i$ pro $i \leq r'$ a $s'_i = 0$ pro $i > r'$). Pak $\mathbf{A}' = \mathbf{U}\mathbf{S}'\mathbf{V}^T$ je řešením úlohy (7.10).

Větu lze formulovat i jinak. Rozklad (7.1) lze napsat jako sumu

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^T = \sum_{i=1}^r s_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^T, \quad (7.11)$$

kde $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_m$ jsou sloupce matice \mathbf{U} a $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n$ jsou sloupce matice \mathbf{V} . Všimněte si, že $\mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^T \in \mathbb{R}^{m \times n}$ je matice hodnosti 1 (viz §2.5). Matice \mathbf{A}' se získá tak, že z této sumy vezmeme jen prvních r' členů:

$$\mathbf{A}' = \mathbf{U}\mathbf{S}'\mathbf{V}^T = \sum_{i=1}^r s'_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^T = \sum_{i=1}^{r'} s_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^T.$$

Je-li \mathbf{A}' optimální řešení úlohy (7.10), máme

$$\|\mathbf{A} - \mathbf{A}'\|_F = \|\mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^T - \mathbf{U}\mathbf{S}'\mathbf{V}^T\|_F = \|\mathbf{U}(\mathbf{S} - \mathbf{S}')\mathbf{V}^T\|_F = \|\mathbf{S} - \mathbf{S}'\|_F = (s_{r'+1}^2 + \dots + s_r^2)^{1/2}. \quad (7.12)$$

V tomto smyslu singulární čísla říkají, jak je matice daleko od nejbližší matice nižší hodnosti.

7.3 Prokládání bodů podprostorem

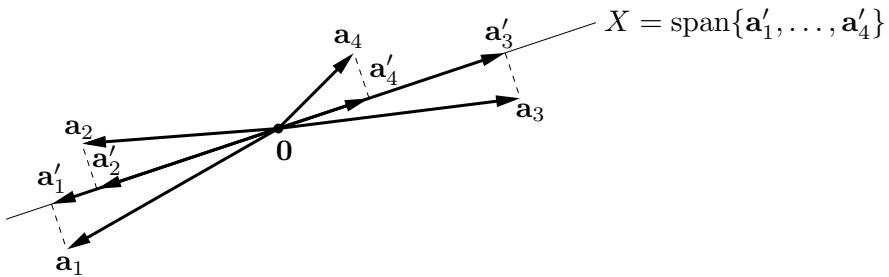
Hledejme (lineární) podprostor $X \subseteq \mathbb{R}^m$ dané dimenze r' , který minimalizuje součet čtverců vzdáleností k daným bodům³ $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n \in \mathbb{R}^m$. Tuto úlohu nelze nijak převést na úlohu nejmenších čtverců z §5.1. Avšak lze ji řešit pomocí Věty 7.2. Máme

$$\begin{aligned} r &= \text{rank } \mathbf{A} = \dim \text{span}\{\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n\}, \\ r' &= \text{rank } \mathbf{A}' = \dim \text{span}\{\mathbf{a}'_1, \dots, \mathbf{a}'_{r'}\}, \end{aligned}$$

kde \mathbf{a}_j jsou sloupce matice \mathbf{A} a \mathbf{a}'_j jsou sloupce matice \mathbf{A}' . Předpokládáme $r' \leq r$. Dále je

$$\|\mathbf{A} - \mathbf{A}'\|_F^2 = \sum_{j=1}^n \|\mathbf{a}_j - \mathbf{a}'_j\|_2^2.$$

Tedy $X = \text{span}\{\mathbf{a}'_1, \dots, \mathbf{a}'_{r'}\} = \text{rng } \mathbf{A}'$ je takový podprostor dimenze r' , že součet čtverců kolmých vzdáleností bodů $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n$ k tomuto podprostoru je minimální:



³ Ve statistice se této úloze říká *rozvoj podle hlavních komponent* (*principal component analysis, PCA*) nebo *Karhunen-Loewův rozvoj*.

Obvykle nepotřebujeme najít body \mathbf{a}'_j , ale pouze bázi podprostoru X . Ortonormální bázi X snadno získáme pomocí vztahů (7.3). Protože pouze prvních r' singulárních čísel matice \mathbf{A}' je nenulových, báze podprostoru $X = \text{rng } \mathbf{A}'$ je množina prvních r' sloupců matice \mathbf{U} v rozkladu $\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^T$. Někdy může být výhodnější hledat ortogonální doplněk $X^\perp = \text{null}(\mathbf{A}')^T$ hledaného podprostoru, jehož báze je posledních $m - r'$ sloupců matice \mathbf{U} .

Příklad 7.2. Máme dáno n bodů $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n$ v prostoru \mathbb{R}^3 . Necht' $[\mathbf{a}_1 \cdots \mathbf{a}_n] = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^T$ je plné SVD matice, jejíž sloupce jsou tyto body. Označme $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3$ sloupce matice $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$.

Hledejme přímku procházející počátkem takovou, aby součet čtverců kolmých vzdáleností bodů k této přímce byl co nejmenší. Tato přímka je množina

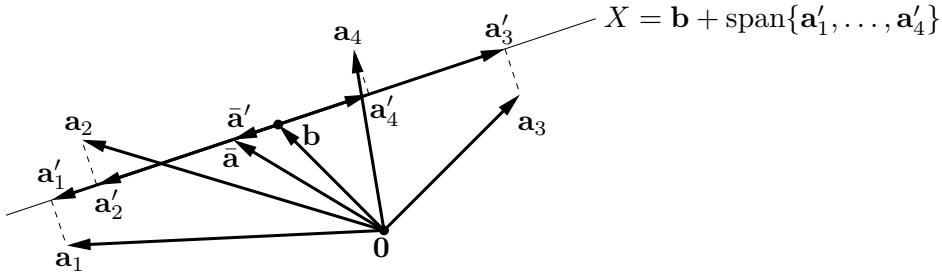
$$\text{span}\{\mathbf{u}_1\} = \{\alpha \mathbf{u}_1 \mid \alpha \in \mathbb{R}\} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \mid \mathbf{u}_2^T \mathbf{x} = \mathbf{u}_3^T \mathbf{x} = 0\} = (\text{span}\{\mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3\})^\perp.$$

Hledejme rovinu procházející počátkem takovou, aby součet čtverců kolmých vzdáleností bodů k této rovině byl co nejmenší. Tato rovina je množina

$$\text{span}\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2\} = \{\alpha_1 \mathbf{u}_1 + \alpha_2 \mathbf{u}_2 \mid \alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{R}\} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \mid \mathbf{u}_3^T \mathbf{x} = 0\} = (\text{span}\{\mathbf{u}_3\})^\perp. \quad \square$$

7.3.1 Zobecnění na affinní podprostor

Zobecněme nyní úlohu: místo lineárního podprostoru hledáme *affinní* podprostor dimenze r' , který minimalizuje součet čtverců kolmých vzdáleností od bodů $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n$. Tento affinní podprostor lze psát jako $X = \mathbf{b} + \text{span}\{\mathbf{a}'_1, \dots, \mathbf{a}'_n\}$ pro nějaké posunutí $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ (viz §3.3):



Součet čtverců kolmých vzdáleností k X je (promyslete z obrázku!)

$$\sum_{j=1}^n \|\mathbf{a}_j - \mathbf{a}'_j - \mathbf{b}\|_2^2 = \|\mathbf{A} - \mathbf{A}' - \mathbf{b} \mathbf{1}^T\|_F^2. \quad (7.13)$$

Hledáme $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ a $\mathbf{A}' \in \mathbb{R}^{m \times n}$, které minimalizují (7.13) za podmínky $\text{rank } \mathbf{A}' = r'$.

Pokud \mathbf{A}' je pevné, minimalizaci výrazu (7.13) přes proměnnou \mathbf{b} lze snadno vyřešit explcitně (viz Cvičení 5.3.a): minimum se nabývá v bodě

$$\mathbf{b} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (\mathbf{a}_j - \mathbf{a}'_j) = \bar{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{a}}',$$

kde

$$\bar{\mathbf{a}} = \frac{1}{n}(\mathbf{a}_1 + \cdots + \mathbf{a}_n), \quad \bar{\mathbf{a}}' = \frac{1}{n}(\mathbf{a}'_1 + \cdots + \mathbf{a}'_n)$$

značí *těžiště* bodů \mathbf{a}_i resp. \mathbf{a}'_i . Protože však $\bar{\mathbf{a}}' \in \text{span}\{\mathbf{a}'_1, \dots, \mathbf{a}'_n\}$, platí $\bar{\mathbf{a}} = \mathbf{b} + \bar{\mathbf{a}}' \in X$ (toto promyslete, najděte si vektory $\bar{\mathbf{a}}, \bar{\mathbf{a}}', \mathbf{b}$ v obrázku!). Tedy jsme dokázali, že optimální affinní podprostor X prochází těžištěm $\bar{\mathbf{a}}$ bodů $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n$.

Nyní je řešení jasné: stačí nejprve posunout body $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n$ tak, aby jejich těžiště leželo v počátku, a potom najít lineární podprostor, který minimalizuje součet čtverců vzdáleností k posunutým bodům.

7.4 Přibližné řešení homogenní lineární soustavy

Řešme homogenní lineární soustavu

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{0} \quad (7.14)$$

pro $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Množinou řešení je množina null \mathbf{A} , což je lineární podprostor \mathbb{R}^n dimenze $d = n - \text{rank } \mathbf{A}$ (viz (3.12)). Jedno z řešení je vždy $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ (tzv. triviální řešení).

Může být homogenní soustava ‘přeuročená’? Přeuročenosť soustavy můžeme definovat tak, že dimenze d prostoru řešení je nižší, než nějaká předem daná dimenze $d' > d$. Speciální případ je, když má soustava pouze triviální řešení ($d = 0$), ale my chceme řešení netriviální. Řešme soustavu přibližně tak, že co nejméně změníme matici \mathbf{A} , aby prostor řešení měl kýzenou dimenzi d' . Neboli nejprve najdeme matici \mathbf{A}' s hodnotí $n - d'$ nejbližší matici \mathbf{A} (dle Věty 7.2) a potom vyřešíme soustavu $\mathbf{A}'\mathbf{x} = \mathbf{0}$.

Vztah k nehomogennímu případu. V §5.1 jsme formulovali přibližné řešení nehomogenní ($\mathbf{b} \neq \mathbf{0}$) soustavy $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ jako úlohu $\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2$. Může se zdát, že tato formulace je úplně odlišná od formulace přibližného řešení homogenní soustavy, kterou jsme uvedli zde. Ale tak tomu není. Formulujme 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{b}' tak, aby pro nějaké \mathbf{x} platilo $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}'$ a přitom číslo $\|\mathbf{b} - \mathbf{b}'\|_2$ bylo co nejmenší. Tuto úlohu lze napsat jako

$$\min\{\|\mathbf{b} - \mathbf{b}'\|_2 \mid \mathbf{Ax} = \mathbf{b}', \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{b}' \in \mathbb{R}^m\}.$$

Zde minimalizujeme přes proměnné \mathbf{x} a \mathbf{b}' (nevadí, že \mathbf{x} se nevyskytuje v účelové funkci). Tato úloha jde zjednodušit (rozmyslete!): dosadíme $\mathbf{b}' = \mathbf{Ax}$ do účelové funkce $\|\mathbf{b} - \mathbf{b}'\|_2$, čímž dostaneme $\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2$. 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.

7.5 (*) Pseudoinverze obecné matice

Vrat’ne se nyní k nehomogenní lineární soustavě, $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ pro $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Tuto soustavu můžeme pohodlně řešit pomocí SVD. Protože \mathbf{U} má ortonormální sloupce, vynásobení soustavy $\mathbf{Ax} = \mathbf{USV}^T \mathbf{x} = \mathbf{b}$ maticí \mathbf{U}^T zleva dá

$$\mathbf{SV}^T \mathbf{x} = \mathbf{U}^T \mathbf{b},$$

tedy $\mathbf{Sy} = \mathbf{c}$ kde $\mathbf{y} = \mathbf{V}^T \mathbf{x}$ a $\mathbf{c} = \mathbf{U}^T \mathbf{b}$. Snadno najdeme řešení \mathbf{y} této soustavy, nebot’ \mathbf{S} je diagonální. Pak spočítáme \mathbf{x} ze soustavy $\mathbf{y} = \mathbf{V}^T \mathbf{x}$. Pokud je \mathbf{V} čtvercová (což bude bud’ u plného SVD libovolné matice nebo u redukovaného SVD úzké matice s plnou hodností), máme přímo $\mathbf{x} = \mathbf{V} \mathbf{y}$.

Tuto myšlenku nyní rozvineme. V §5 jsme odděleně diskutovali případy, kdy soustava má žádné, jedno, nebo nekonečně mnoho řešení. Ted’ všechny tyto případy spojíme do jediné obecné formulace

$$\min \left\{ \|\mathbf{x}\|_2^2 \mid \mathbf{x} \in \arg \min_{\mathbf{x}' \in \mathbb{R}^n} \|\mathbf{Ax}' - \mathbf{b}\|_2^2 \right\}. \quad (7.15)$$

To znamená, že hledáme vektor \mathbf{x} , pro který je norma $\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2$ vektoru residuí minimální; pokud je však takových vektorů více, vybereme z nich takový, který má nejmenší normu $\|\mathbf{x}\|_2$.

Věta 7.3. Necht' $\mathbf{A} = \mathbf{U}_1 \mathbf{S}_1 \mathbf{V}_1^T$ je redukované SVD matice \mathbf{A} . Pak řešením úlohy (7.15) je $\mathbf{x} = \mathbf{A}^+ \mathbf{b}$, kde

$$\mathbf{A}^+ = \mathbf{V}_1 \mathbf{S}_1^{-1} \mathbf{U}_1^T. \quad (7.16)$$

Důkaz (\star). Necht' SVD matice \mathbf{A} je dáno vzorcem (7.2). Platí:

$$\begin{aligned} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2 &= \|\mathbf{USV}^T \mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2^2 \\ &= \|\mathbf{U}^T (\mathbf{USV}^T \mathbf{x} - \mathbf{b})\|_2^2 && \text{neboť } \|\mathbf{U}^T \mathbf{z}\|_2 = \|\mathbf{z}\|_2 \text{ pro každé } \mathbf{z} \\ &= \|\mathbf{SV}^T \mathbf{x} - \mathbf{U}^T \mathbf{b}\|_2^2 && \text{neboť } \mathbf{U}^T \mathbf{U} = \mathbf{I} \\ &= \|\mathbf{Sy} - \mathbf{c}\|_2^2 \\ &= \left\| \begin{bmatrix} \mathbf{S}_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{y}_1 \\ \mathbf{y}_2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \mathbf{c}_1 \\ \mathbf{c}_2 \end{bmatrix} \right\|_2^2 \\ &= \left\| \begin{bmatrix} \mathbf{S}_1 \mathbf{y}_1 - \mathbf{c}_1 \\ -\mathbf{c}_2 \end{bmatrix} \right\|_2^2 \\ &= \|\mathbf{S}_1 \mathbf{y}_1 - \mathbf{c}_1\|_2^2 + \|\mathbf{c}_2\|_2^2, \end{aligned} \quad (7.17)$$

kde jsme označili

$$\mathbf{V}^T \mathbf{x} = \begin{bmatrix} \mathbf{V}_1^T \mathbf{x} \\ \mathbf{V}_2^T \mathbf{x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{y}_1 \\ \mathbf{y}_2 \end{bmatrix} = \mathbf{y}, \quad \mathbf{U}^T \mathbf{b} = \begin{bmatrix} \mathbf{U}_1^T \mathbf{b} \\ \mathbf{U}_2^T \mathbf{b} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{c}_1 \\ \mathbf{c}_2 \end{bmatrix} = \mathbf{c}. \quad (7.18)$$

Čeho jsme dosáhli? Ukázali jsme, že výraz $\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2$ je roven výrazu (7.17). Ale ten se mnohem snadněji minimalizuje, protože matice \mathbf{S}_1 je diagonální a regulární. Minimum výrazu (7.17) tedy nastane pro $\mathbf{y}_1 = \mathbf{S}_1^{-1} \mathbf{c}_1$, protože pak bude $\mathbf{S}_1 \mathbf{y}_1 = \mathbf{c}_1$. Protože \mathbf{S}_1 je čtvercová diagonální, její inverze je jednoduše $\mathbf{S}_1^{-1} = \text{diag}(s_1^{-1}, \dots, s_r^{-1})$.

Výraz (7.17) nezávisí na vektoru \mathbf{y}_2 , který tedy můžeme zvolit libovolně. Zvolme jej tak, aby vektor \mathbf{y} měl nejmenší normu. To očividně nastane pro $\mathbf{y}_2 = \mathbf{0}$. Protože $\|\mathbf{y}\|_2 = \|\mathbf{V}^T \mathbf{x}\|_2 = \|\mathbf{x}\|_2$ (plyne z ortogonality \mathbf{V}), bude mít také \mathbf{x} nejmenší normu.

Řešení úlohy (7.15) získáme zpětným dosazením z (7.18):

$$\mathbf{x} = \mathbf{V} \mathbf{y} = [\mathbf{V}_1 \ \mathbf{V}_2] \begin{bmatrix} \mathbf{y}_1 \\ \mathbf{y}_2 \end{bmatrix} = [\mathbf{V}_1 \ \mathbf{V}_2] \begin{bmatrix} \mathbf{S}_1^{-1} \mathbf{c}_1 \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} = \mathbf{V}_1 \mathbf{S}_1^{-1} \mathbf{c}_1 = \mathbf{V}_1 \mathbf{S}_1^{-1} \mathbf{U}_1^T \mathbf{b} = \mathbf{A}^+ \mathbf{b}. \quad \square$$

Všimněte si, že zatímco v důkazu jsme potřebovali plné SVD, ve vzorci (7.16) vystupuje pouze redukované SVD. Matice \mathbf{U}_2 a \mathbf{V}_2 byly třeba jen pro důkaz.

Matice (7.16) se nazývá **pseudoinverze obecné matice**, přesněji *Moore-Penroseova pseudoinverze*. Pokud \mathbf{A} je čtvercová regulární, (7.16) přejde v obyčejnou inverzi \mathbf{A}^{-1} . Pokud \mathbf{A} je obdélníková s plnou hodností, (7.16) souhlasí se vzorcemi (5.4), (5.16) a (5.18). Ověřte tato tvrzení jako cvičení!

7.6 Cvičení

7.1. Jsou dány matice

$$\mathbf{A} = \frac{1}{15} \begin{bmatrix} 14 & -16 & -4 \\ -2 & 13 & 22 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{U} = \frac{1}{5} \begin{bmatrix} -3 & 4 \\ 4 & 3 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{V} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} -1 & 2 & 2 \\ 2 & -1 & 2 \\ 2 & 2 & -1 \end{bmatrix}$$

Spočítejte matici \mathbf{B} hodnosti jedna takovou, že $\|\mathbf{A} - \mathbf{B}\|_F$ je minimální (kde $\|\cdot\|_F$ značí Frobeniovu normu). Bez užití počítače spočítejte hodnotu $\|\mathbf{A} - \mathbf{B}\|_F$ pro tuto matici \mathbf{B} .

- 7.2. 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 množinu $X \subseteq \mathbb{R}^3$, která minimalizuje součet čtverců kolmých vzdáleností bodů k množině X , kde X je

- a) přímka procházející počátkem,
- b) rovina procházející počátkem,
- c) přímka která může ale nemusí procházet počátkem.

Můžete použít počítač.

- 7.3. S použitím SVD najděte bázi ortogonálního doplňku podprostoru $\text{span}\{(1, 1, 1, -1), (2, -1, -1, 1), (-1, 2, 2, 1)\}$. Můžete použít počítač.
- 7.4. (\star) Vyřešte soustavu ze Cvičení 5.2 přibližně ve smyslu nejmenších čtverců pomocí SVD. Můžete použít počítač.
- 7.5. (\star) Dokažte vlastnosti pseudoinverze ze Cvičení 5.12 pomocí vztahu (7.16) pro libovolné (čtvercové či obdélníkové) matice z libovolnou hodností.
- 7.6. Známe spektrální rozklad symetrické matice. Jak byste jednoduše nalezli SVD této matice?
- 7.7. Možná jste si již dříve položili otázku, jaký je vhodný algoritmus na nalezení báze nulového prostoru dané matice. Cvičení 3.11 naznačilo jeden způsob. V Matlabu se ovšem báze nulového prostoru najde snadno funkcí `null`. Vypište si implementaci této funkce matlabským příkazem `edit null` a najděte souvislost se vzorcí (7.3).

Návod a řešení

- 7.1. $\|\mathbf{A} - \mathbf{B}\|_F = 1$
- 7.2.a) $X = \text{span}\{(0.6912, -0.2181, 0.6889)\}$ (Uvědomte si ale, že báze vašeho podprostoru může být jiná než zde uvedená.)
- 7.2.b) $X = \text{span}\{(0.6912, -0.2181, 0.6889), (-0.3771, -0.9221, 0.0864)\}$
- 7.2.c) $X = (1.25, -1.25, 0.25) + \text{span}\{(0.6599, 0.0280, 0.7508)\}$
- 7.3. Použijte (7.3c) a $(\text{rng } \mathbf{U}_1)^\perp = \text{rng } \mathbf{U}_2$. Hledaná báze bude třetí sloupec \mathbf{U} až na skalární násobek, tedy např. $(0, -1, 1, 0)$.

Kapitola 8

Nelineární funkce a zobrazení

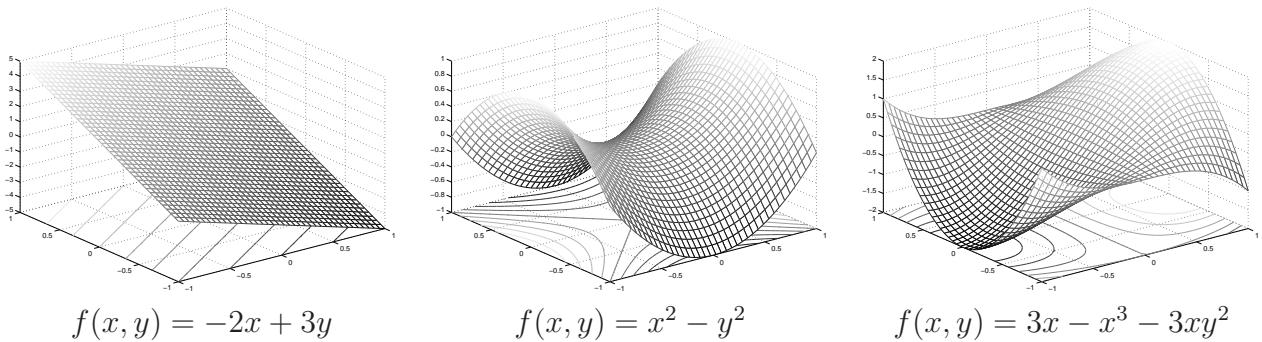
V předchozích kapitolách jsme potkali lineární a affinní zobrazení a kvadratické funkce. V této kapitole si řekneme více o nelineárních funkcích $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ a zobrazeních $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ (zopakujte si značení funkcí a zobrazení z §1.1.3). Předpokládáme přitom, že student zná analýzu funkce jedné proměnné a pojmem parciální derivace.

Dále budeme předpokládat, že definiční obor funkcí a zobrazení je celé \mathbb{R}^n . Tomu tak není vždy, např. definiční obor funkce $f(x) = \sqrt{1 - x^2}$ je interval $[-1, 1] \subset \mathbb{R}$. Tento předpoklad ale zjednoduší výklad a pro čtenáře vždy bude snadné látku zobecnit pro jiný definiční obor.

Pro funkci $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ užíváme tyto pojmy:

- **Graf** funkce f je množina $\{(\mathbf{x}, y) \in \mathbb{R}^{n+1} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, y = f(\mathbf{x})\}$.
- **Vrstevnice** funkce f výšky y je množina $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid f(\mathbf{x}) = y\}$.

Obrázek ukazuje příklady grafu a vrstevnic funkcí dvou proměnných na obdélníku $[-1, 1]^2$:



Příklad 8.1. Příklady funkcí a zobrazení více proměnných:

1. $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}, f(x, y) = x^2 - y^2$
2. $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, f(\mathbf{x}) = x_1$ (i když x_2, \dots, x_n chybí, f se rozumí jako funkce n proměnných)
3. $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, f(\mathbf{x}) = \mathbf{a}^T \mathbf{x} = a_1 x_1 + \dots + a_n x_n$ (lineární funkce)
4. $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, f(\mathbf{x}) = \mathbf{a}^T \mathbf{x} + b = a_1 x_1 + \dots + a_n x_n + b$ (affinní funkce)
5. $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, f(\mathbf{x}) = e^{-\mathbf{x}^T \mathbf{x}}$ (nenormalizované Gaussovo rozdělení)
6. $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, f(\mathbf{x}) = \max_{i=1}^n x_i$
7. $\mathbf{f}: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^2, \mathbf{f}(t) = (\cos t, \sin t)$ (parametrizace kružnice, množina $\mathbf{f}([0, 2\pi))$ je kružnice)
8. $\mathbf{f}: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^3, \mathbf{f}(t) = (\cos t, \sin t, at)$ (parametrizace šroubovice neboli helixu)

9. $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{x}$ (identické zobrazení neboli identita)
10. $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{Ax}$ (lineární zobrazení)
11. $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{Ax} + \mathbf{b}$ (affinní zobrazení)
12. $\mathbf{f}: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$, $\mathbf{f}(u, v) = ((R + r \cos v) \cos u, (R + r \cos v) \sin u, r \sin v)$
(parametrisace toru neboli anuloidu, množina $\mathbf{f}([0, 2\pi] \times [0, 2\pi])$ je torus)
13. Při technice *image morphing* se obrázek např. obličeje zdeformuje na obrázek jiného obličeje. Morphing je realizován zobrazením $\mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$.
14. Elektrické pole přiřadí každému bodu v \mathbb{R}^3 vektor z \mathbb{R}^3 . □

8.1 Spojitost

Neformálně řečeno, zobrazení $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ je **spojité** v bodě $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, jestliže bodům blízkým k \mathbf{x} přiřazuje body blízké k $\mathbf{f}(\mathbf{x})$. Abychom tuto větu formalizovali, potřebovali bychom limitu funkce více proměnných, jejíž znalost u čtenáře nepředpokládáme. Uvedeme proto pouze postačující (avšak nikoliv nutnou) podmínu pro spojitost, která nám v praxi postačí. Přitom předpokládáme, že čtenář dokáže ověřit spojitost funkcí jedné proměnné.

Věta 8.1.

1. Necht' funkce $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ je spojité 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 spojité 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 spojité v bodě \mathbf{x} .
3. Necht' $g: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ je spojité v bodě \mathbf{x} a $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ je spojité v bodě $y = g(\mathbf{x})$. Pak složená funkce $f \circ g: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ je spojité 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 8.2. Z věty snadno ukážeme, že např. funkce dvou proměnných

$$f(x, y) = \sin(x + y^2) \tag{8.1}$$

je spojité. Podle 1 je x spojité funkce dvou proměnných (x, y) . Podobně, y^2 je spojité funkce proměnných (x, y) . Podle 2 je proto funkce $x + y^2$ spojité. Protože funkce \sin je spojité, podle 3 je funkce $\sin(x + y^2)$ spojité. Takto jsme 'rekurzivně' dokázali spojitost celé funkce. □

8.2 Parciální derivace

Parciální derivaci funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ podle x_i značíme jedním ze symbolů

$$\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i} = f_{x_i}(\mathbf{x}) = \frac{\partial y}{\partial x_i},$$

kde poslední značení předpokládá, že jsme psali $y = f(\mathbf{x})$. Spočítáme ji tak, že všechny proměnné x_j , $j \neq i$, považujeme za konstanty a zderivujeme funkci podle jediné proměnné x_i .

Příklad 8.3. Parciální derivace funkce (8.1) jsou

$$\frac{\partial f(x, y)}{\partial x} = f_x(x, y) = \cos(x + y^2), \quad (8.2a)$$

$$\frac{\partial f(x, y)}{\partial y} = f_y(x, y) = 2y \cos(x + y^2). \quad (8.2b)$$

□

8.3 Totální derivace

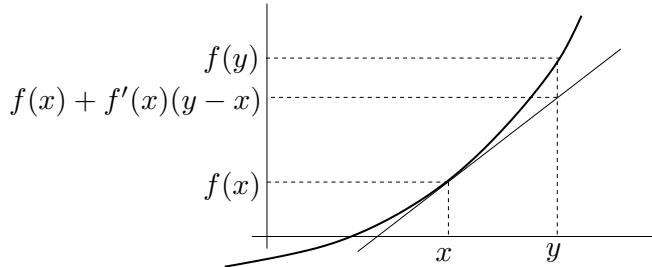
Zopakujme definici derivace funkce jedné proměnné $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ v bodě x . Existuje-li limita

$$\frac{df(x)}{dx} = f'(x) = \lim_{y \rightarrow x} \frac{f(y) - f(x)}{y - x}, \quad (8.3)$$

funkce se nazývá *diferencovatelná* v bodě x a hodnota limity se nazývá její *derivace* funkce f v bodě x . Pokud je funkce v bodě x diferencovatelná, lze ji v blízkosti bodu x ‘dobře’ approximovat affinní funkcí

$$f(y) \approx f(x) + f'(x)(y - x). \quad (8.4)$$

Viz obrázek:



Jak se dá pojed diferencovatelnosti a derivace zobecnit na zobrazení $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$? Toho nelze dosáhnout zobecněním limity (8.3), ale je lépe vycházet ze vzorce (8.4). Zkusme zobrazení v blízkosti bodu \mathbf{x} approximovat jako

$$\mathbf{f}(\mathbf{y}) \approx \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \mathbf{f}'(\mathbf{x})(\mathbf{y} - \mathbf{x}), \quad (8.5)$$

kde symbol $\mathbf{f}'(\mathbf{x})$ označuje matici rozměru $m \times n$, o které ale zatím nevíme nic. Je-li \mathbf{x} pevné, pravá strana výrazu (8.5) je affinní zobrazení v proměnné \mathbf{y} (porovnejte s (3.4)): pravou stranu (8.5) lze psát jako $\mathbf{A}\mathbf{y} + \mathbf{b}$, kde $\mathbf{A} = \mathbf{f}'(\mathbf{x})$ a $\mathbf{b} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) - \mathbf{f}'(\mathbf{x})\mathbf{x}$. Zobrazení je **diferencovatelné** v bodě \mathbf{x} , jestliže je v okolí tohoto bodu ‘podobné’ affinnímu zobrazení, neboli existuje matice $\mathbf{f}'(\mathbf{x})$ taková, že chyba approximace $\mathbf{f}(\mathbf{y}) - \mathbf{f}(\mathbf{x}) - \mathbf{f}'(\mathbf{x})(\mathbf{y} - \mathbf{x})$ je ‘malá’ pro ‘malé’ $\mathbf{y} - \mathbf{x}$. Abychom tuto podmínku formulovali přesně, potřebovali bychom limitu funkce více proměnných, jejíž znalost u čtenáře nepředpokládáme. Ponecháme proto pojem ‘diferencovatelné zobrazení’ nedefinovaný a definujeme pouze o něco silnější vlastnost, která nám v tomto kurzu postačí.

Definice 8.1. Zobrazení $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ 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 jsou v tomto bodě spojité.

Věta 8.2. Je-li zobrazení v bodě spojitě diferencovatelné, je v tomto bodě diferencovatelné.

Příklad 8.4. Obě parciální derivace (8.2) funkce (8.1) jsou spojité funkce na celém \mathbb{R}^2 (neboť splňují předpoklady Věty 8.1). Proto je funkce (8.1) spojitě diferencovatelná (a tedy diferencovatelná) na celém \mathbb{R}^2 . \square

Zdůrazněme, že pouhá existence všech parciálních derivací pro diferencovatelnost nestačí.

Příklad 8.5. Necht' je funkce $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ definována jako

$$f(x, y) = \begin{cases} 1 & \text{když } x = 0 \text{ nebo } y = 0, \\ 0 & \text{když } x \neq 0 \text{ a } y \neq 0. \end{cases}$$

Je

$$\frac{\partial f(x, y)}{\partial x} = \begin{cases} 0 & \text{když } x \neq 0 \text{ nebo } y = 0, \\ \text{neexistuje} & \text{když } x = 0 \text{ a } y \neq 0 \end{cases}$$

a podobně pro $\partial f(x, y)/\partial y$. V bodě $(0, 0)$ tedy existují obě parciální derivace (obě jsou rovny nule). Lze ukázat, že v bodě $(0, 0)$ funkce není diferencovatelná. To nepřekvapí, neboť funkce se v okolí tohoto bodu affinní funkci vůbec nepodobá. \square

V případě, že je zobrazení \mathbf{f} je v bodě \mathbf{x} diferencovatelné, má matice $\mathbf{f}'(\mathbf{x})$ přirozený tvar: její složky jsou parciální derivace všech složek zobrazení podle všech proměnných:

$$\frac{d\mathbf{f}(\mathbf{x})}{d\mathbf{x}} = \mathbf{f}'(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m(\mathbf{x})}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_m(\mathbf{x})}{\partial x_n} \end{bmatrix}. \quad (8.6)$$

Matice (8.6) se nazývá **totální derivace**¹ (nebo krátce jen **derivace**) zobrazení \mathbf{f} v bodě \mathbf{x} . Z historických důvodů se jí říká také **Jacobiho matice**. 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 $\mathbf{f}'(x)$ *sloupcový vektor*, jehož složky jsou obyčejné derivace složek \mathbf{f} .
- Pro $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ je $f'(\mathbf{x})$ *řádkový vektor*.

8.3.1 Derivace složeného zobrazení

Známé ‘řetězové pravidlo’ pro derivaci složených funkcí jedné proměnné lze přirozeným způsobem rozšířit na zobrazení. Důkaz následující věty není krátký a nebude 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

$$(\mathbf{g} \circ \mathbf{f})'(\mathbf{x}) = \frac{d\mathbf{g}(\mathbf{f}(\mathbf{x}))}{d\mathbf{x}} = \mathbf{g}'(\mathbf{f}(\mathbf{x})) \mathbf{f}'(\mathbf{x}). \quad (8.7)$$

¹Někdy 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.

Dimenze zúčastněných prostorů lze přehledně znázornit diagramem (viz §1.1.2)

$$\mathbb{R}^n \xrightarrow{\mathbf{f}} \mathbb{R}^m \xrightarrow{\mathbf{g}} \mathbb{R}^l.$$

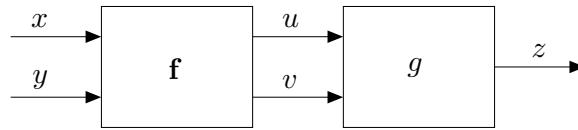
Pokud píšeme $\mathbf{u} = \mathbf{f}(\mathbf{x})$ a $\mathbf{y} = \mathbf{g}(\mathbf{u})$, pravidlo lze psát také v Leibnizové značení jako

$$\frac{d\mathbf{y}}{d\mathbf{x}} = \frac{d\mathbf{y}}{d\mathbf{u}} \frac{d\mathbf{u}}{d\mathbf{x}}, \quad (8.8)$$

což se dobře pamatuje, protože $d\mathbf{u}$ se ‘jakoby vykráti’ (což ale není důkaz!). Zdůrazněme, že tato rovnost je *násobením 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 řetězové 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 8.6. Necht’ $g(u, v)$ je diferencovatelná funkce dvou proměnných. Určeme derivaci funkce $z = h(x, y) = g(x + y, xy)$ podle vektoru (x, y) , tedy její parciální derivace podle x a y .

Máme $\mathbb{R}^2 \xrightarrow{\mathbf{f}} \mathbb{R}^2 \xrightarrow{\mathbf{g}} \mathbb{R}$, kde $\mathbf{f}(x, y) = (u, v) = (x + y, xy)$. Viz obrázek:



Derivace zobrazení g podle vektoru (u, v) je matice 1×2 (řádkový vektor)

$$g'(u, v) = \begin{bmatrix} \frac{\partial g(u, v)}{\partial u} & \frac{\partial g(u, v)}{\partial v} \end{bmatrix} = [g_u(u, v) \ g_v(u, v)].$$

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)

$$\begin{aligned} \frac{dh(x, y)}{d(x, y)} &= \frac{dg(\mathbf{f}(x, y))}{d(x, y)} = g'(u, v)\mathbf{f}'(x, y) \\ &= [g_u(u, v) \ g_v(u, v)] \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ y & x \end{bmatrix} \\ &= [g_u(u, v) + yg_v(u, v) \ g_u(u, v) + xg_v(u, v)], \end{aligned}$$

kde $u = x + y$ a $v = xy$. □

Příklad 8.7. Ukažme dva způsoby, jak najít parciální derivaci f_x funkce $f(x, y) = e^{(x+y)^2+(xy)^2}$:

- Považujeme y za konstantu a derivujeme f jako funkci jedné proměnné x :

$$f_x = [2(x + y) + 2(xy)y]e^{(x+y)^2+(xy)^2} = 2(x + y + xy^2)e^{(x+y)^2+(xy)^2}.$$

- Položíme $u = x + y$, $v = xy$, $f(u, v) = e^{u^2+v^2}$. Z Příkladu 8.6 máme $f_x = f_u + yf_v$. Jelikož

$$f_u = 2ue^{u^2+v^2}, \quad f_v = 2ve^{u^2+v^2},$$

máme $f_x = f_u + yf_v = 2ue^{u^2+v^2} + y(2v)e^{u^2+v^2} = 2(x + y + xy^2)e^{(x+y)^2+(xy)^2}$.

□

Příklad 8.8. 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

$$\frac{dg(t + t^2, \sin t)}{dt} = g'(u, v)\mathbf{f}'(t) = [g_u(u, v) \quad g_v(u, v)] \begin{bmatrix} 1 + 2t \\ \cos t \end{bmatrix} = g_u(u, v)(1 + 2t) + g_v(u, v) \cos t.$$

□

8.3.2 Derivace maticových výrazů

Jsou-li funkce nebo zobrazení zadány výrazem obsahujícím vektory a matice, derivaci lze vždy spočítat ‘hrubou silou’ tak, že výraz rozepíšeme do složek a spočítáme parciální derivace každé složky podle každé proměnné. Přísně vzato, úkol jsme tím splnili. Je ovšem výhodné tento výsledek zjednodušit tak, že pro něj najdeme maticový výraz.

Příklad 8.9. Odvodíme derivaci zobrazení $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ daného vzorcem $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{Ax} + \mathbf{b}$, 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 (8.6) je $\mathbf{f}'(\mathbf{x}) = \mathbf{A}$. Tomu se nedivíme, nebot’ zobrazení \mathbf{f} je affinní, tedy jeho affinní approximace (8.5) musí být to samé affinní zobrazení. Oporavdu: pravá strana výrazu (8.5) je rovna $\mathbf{Ay} + \mathbf{b}$ (zkontrolujte!). □

Příklad 8.10. Počítejme derivaci zobrazení $\mathbf{g}(\mathbf{Ax} + \mathbf{b})$ 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 řetězovém pravidle máme $\mathbb{R}^n \xrightarrow{\mathbf{f}} \mathbb{R}^l \xrightarrow{\mathbf{g}} \mathbb{R}^m$, kde $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{Ax} + \mathbf{b}$. Je $\mathbf{f}'(\mathbf{x}) = \mathbf{A}$, tedy

$$\frac{d\mathbf{g}(\mathbf{Ax} + \mathbf{b})}{d\mathbf{x}} = \mathbf{g}'(\mathbf{Ax} + \mathbf{b})\mathbf{A}.$$

□

Příklad 8.11. Odvodíme derivaci kvadratické formy $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{Ax}$, kde \mathbf{A} je libovolná (ne nutně symetrická) matice velikosti $n \times n$. Napíšeme si funkci f podrobně:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^T \mathbf{Ax} &= a_{11}x_1^2 + a_{21}x_2x_1 + \cdots + a_{n1}x_nx_1 + \\ &\quad a_{12}x_1x_2 + a_{22}x_2^2 + \cdots + a_{n2}x_nx_1 + \\ &\quad \vdots \\ &\quad a_{1n}x_1x_n + a_{2n}x_2x_n + \cdots + a_{nn}x_n^2. \end{aligned}$$

Z tohoto výrazu po troše snahy vidíme, že

$$\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1} = 2a_{11}x_1 + (a_{21} + a_{12})x_2 + \cdots + (a_{n1} + a_{1n})x_n$$

a podobně pro derivace podle ostatních proměnných. Ale tyto parciální derivace lze uspořádat do řádkového vektoru

$$f'(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_n} \end{bmatrix} = \mathbf{x}^T (\mathbf{A} + \mathbf{A}^T).$$

□

Následující tabulka uvádí derivace často potkávaných zobrazení. Odvod'te je jako cvičení!

$\mathbf{f}(\mathbf{x})$	$\mathbf{f}'(\mathbf{x})$	poznámka
\mathbf{x}	\mathbf{I}	$\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$
\mathbf{Ax}	\mathbf{A}	$\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}, \mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$
$\mathbf{x}^T \mathbf{x}$	$2\mathbf{x}^T$	$\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$
$\mathbf{x}^T \mathbf{Ax}$	$\mathbf{x}^T (\mathbf{A} + \mathbf{A}^T)$	$\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}, \mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$
$\mathbf{x}^T \mathbf{a} = \mathbf{a}^T \mathbf{x}$	\mathbf{a}^T	$\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$
$\ \mathbf{x}\ _2$	$\mathbf{x}^T / \ \mathbf{x}\ _2$	$\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$
$\mathbf{g}(\mathbf{x})^T \mathbf{g}(\mathbf{x})$	$2\mathbf{g}(\mathbf{x})^T \mathbf{g}'(\mathbf{x})$	$\mathbf{g}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m, \mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$
$\mathbf{g}(\mathbf{x})^T \mathbf{h}(\mathbf{x})$	$\mathbf{g}(\mathbf{x})^T \mathbf{h}'(\mathbf{x}) + \mathbf{h}(\mathbf{x})^T \mathbf{g}'(\mathbf{x})$	$\mathbf{g}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m, \mathbf{h}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m, \mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$

8.4 Směrová derivace

Řez zobrazení $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ v bodě $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ ve směru² $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$ je zobrazení $\varphi: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^m$ dané jako

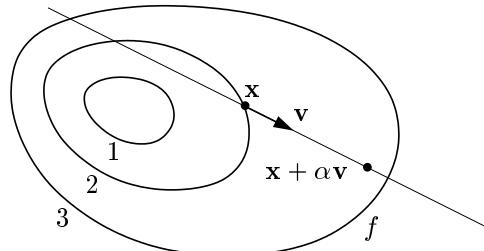
$$\varphi(\alpha) = \mathbf{f}(\mathbf{x} + \alpha\mathbf{v}). \quad (8.9)$$

Směrová derivace³ zobrazení \mathbf{f} v bodě \mathbf{x} ve směru \mathbf{v} je číslo

$$(\varphi'_1(0), \dots, \varphi'_m(0)) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\varphi(\alpha) - \varphi(0)}{\alpha} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\mathbf{f}(\mathbf{x} + \alpha\mathbf{v}) - \mathbf{f}(\mathbf{x})}{\alpha}, \quad (8.10)$$

kde $\varphi'_i(0)$ označuje derivaci i -té složky zobrazení φ v bodě $\alpha = 0$.

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 $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$:



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).

²Někdy se řez a směrová derivace uvažují jen pro *normalizované* směry \mathbf{v} , tj. $\|\mathbf{v}\|_2 = 1$. My ale dovolujeme libovolný vektor \mathbf{v} .

³Přesněji jde o *oboustrannou* směrovou derivaci. Jednostrannou směrovou derivaci bychom dostali, když bychom místo oboustranné limity (8.10) vzali jednostrannou limitu zprava.

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 $\mathbf{f}'(\mathbf{x})\mathbf{v}$.

Důkaz. Zobrazení $\mathbf{y} = \varphi(\alpha) = \mathbf{f}(\mathbf{x} + \alpha\mathbf{v})$ je složením dvou zobrazení $\mathbf{y} = \mathbf{f}(\mathbf{u})$ a $\mathbf{u} = \mathbf{x} + \alpha\mathbf{v}$. Máme diagram $\mathbb{R} \xrightarrow{\mathbf{u}=\mathbf{x}+\alpha\mathbf{v}} \mathbb{R}^n \xrightarrow{\mathbf{y}=\mathbf{f}(\mathbf{x})} \mathbb{R}^m$. Máme $d\mathbf{u}/d\alpha = \mathbf{v}$. Podle řetězového pravidla je

$$\varphi'(\alpha) = \frac{dy}{d\alpha} = \frac{dy}{d\mathbf{u}} \frac{d\mathbf{u}}{d\alpha} = \frac{df(\mathbf{u})}{d\mathbf{u}} \mathbf{v}.$$

Pro $\alpha = 0$ je $\mathbf{u} = \mathbf{x}$, čímž je věta dokázána. \square

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 8.12. Spočítejme směrovou derivaci funkce $f(x, y) = \sin(x + y^2)$ v bodě (x, y) ve směru (u, v) . Podle definice je

$$\begin{aligned}\varphi(\alpha) &= \sin(x + \alpha u + (y + \alpha v)^2), \\ \varphi'(\alpha) &= (u + 2v(y + \alpha v)) \cos(x + \alpha u + (y + \alpha v)^2), \\ \varphi'(0) &= (u + 2vy) \cos(x + y^2).\end{aligned}\tag{8.11}$$

Podle Věty 8.4 je směrová derivace rovna

$$uf_x(x, y) + vf_y(x, y) = u \cos(x + y^2) + 2vy \cos(x + y^2),$$

což je stejně jako (8.11). \square

8.5 Gradient

Transpozici totální derivace funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ se říká **gradient** a značí se

$$f'(\mathbf{x})^T = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_n} \end{bmatrix} = \nabla f(\mathbf{x})$$

(∇ čteme 'nabla'). Jelikož $f'(\mathbf{x})$ je rádkový vektor, je gradient sloupcový vektor⁴.

Zkoumejme směrovou derivaci v pevném bodě \mathbf{x} pro různé normalizované směry \mathbf{v} (tedy $\|\mathbf{v}\|_2 = 1$). 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:

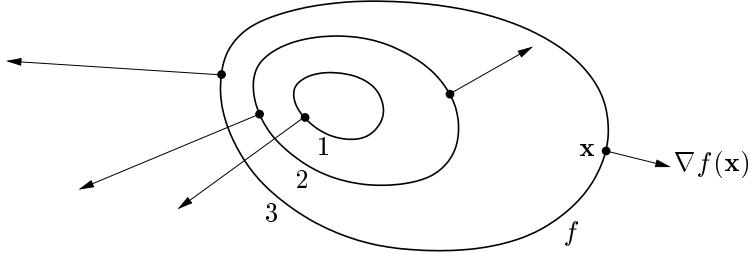
- Směrová derivace je největší ve směru $\mathbf{v} = \nabla f(\mathbf{x})/\|\nabla f(\mathbf{x})\|_2$, tedy když je \mathbf{v} rovnoběžný s gradientem a stejně orientovaný. Tedy směr gradientu je *směr největšího růstu* funkce.
- Velikost gradientu $\|\nabla f(\mathbf{x})\|_2$ je strmost funkce ve směru největšího růstu.

⁴ Zavedení nového slova pro transpozici derivace se zdá zbytečné – nicméně důvod je v tom, že totální diferenciál je *lineární funkce*, kdežto gradient je *vektor*. Literatura bohužel není jednotná v rozlišování gradientu a (totální) derivace funkce. Někdy se obojí ztotožňuje a značí $\nabla f(\mathbf{x})$. To ale vede k nekonzistenci se značením používaným v lineární algebře, 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 rádkový vektor.

- Směrová derivace ve směru kolmém na gradient je nulová.

Dále lze ukázat (viz diskuze v §9.4.1), 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:



8.6 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. Pokud jsou druhé parciální derivace

$$\frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_i \partial x_j}, \quad \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_j \partial x_i}$$

spojité v bodě \mathbf{x} , pak jsou si rovny.

Příklad 8.13. Určeme všechny druhé parciální derivace funkce $f(x, y) = \sin(x + y^2)$ z Příkladu 8.2. 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

$$f''(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_1 \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_n \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_n \partial x_n} \end{bmatrix}.$$

Je to symetrická matice velikosti $n \times n$, která se často nazývá **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 $m \times n \times n$.

8.7 Taylorův polynom

Nechť 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 $T_k: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ takový, že v bodě x má všechny derivace až do řádu k stejně jako funkce f . V tomto smyslu je polynom T_k aproximací funkce f v okolí bodu x .

Taylorův polynom je tímto požadavkem definován jednoznačně a má tvar (odvod'te!)

$$T_k(y) = \sum_{i=0}^k \frac{1}{i!} f^{(i)}(x) (y - x)^i, \quad (8.12)$$

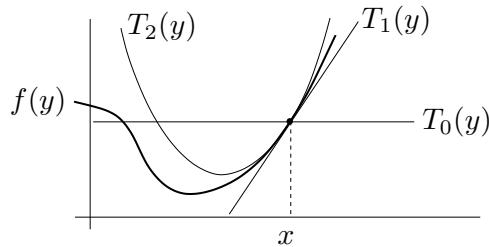
kde $f^{(i)}$ označuje i -tou derivaci funkce f (kde nultá derivace je funkce sama, $f^{(0)} = f$) a kde klademe $0! = 1$. Tvary polynomu až do stupně 2:

$$T_0(y) = f(x),$$

$$T_1(y) = f(x) + f'(x)(y - x),$$

$$T_2(y) = f(x) + f'(x)(y - x) + \frac{1}{2}f''(x)(y - x)^2.$$

Taylorův polynom nultého stupně T_0 je hodně špatná approximace, rovná jednoduše konstantní funkci. Polynom prvního stupně $T_1(x)$ už známe ze vzorce (8.4). Polynom druhého stupně T_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 $T_k: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, který má s funkcí f v bodě \mathbf{x} společné všechny parciální derivace až do řádu k . Nebudeme uvádět vzorec pro polynom libovolného stupně, napíšeme jen polynomy do stupně dva:

$$T_0(\mathbf{y}) = f(\mathbf{x}), \quad (8.13a)$$

$$T_1(\mathbf{y}) = f(\mathbf{x}) + f'(\mathbf{x})(\mathbf{y} - \mathbf{x}), \quad (8.13b)$$

$$T_2(\mathbf{y}) = f(\mathbf{x}) + f'(\mathbf{x})(\mathbf{y} - \mathbf{x}) + \frac{1}{2}(\mathbf{y} - \mathbf{x})^T f''(\mathbf{x})(\mathbf{y} - \mathbf{x}). \quad (8.13c)$$

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 (8.13b) je afinní a funkce (8.13c) 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

$$\mathbf{T}_1(\mathbf{y}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \mathbf{f}'(\mathbf{x})(\mathbf{y} - \mathbf{x}), \quad (8.14)$$

což není nic jiného než pravá strana (8.5). Polynom druhého stupně vede na zobrazení \mathbf{T}_2 , jehož složky jsou funkce (8.13c). To nejde napsat v maticové formě, protože všech $m \times n \times n$ druhých parciálních derivací se ‘nevejde’ do matice.

Příklad 8.14. Najděte Taylorův polynom druhého stupně funkce $f(x, y) = x^{-1} + y^{-1} + xy$ v bodě $(x_0, y_0) = (2, 1)$. Máme

$$\begin{aligned} f(x_0, y_0) &= x^{-1} + y^{-1} + xy \Big|_{(x,y)=(2,1)} = \frac{7}{2}, \\ f'(x_0, y_0) &= [y - x^{-2} \quad x - y^{-2}] \Big|_{(x,y)=(2,1)} = \left[\begin{array}{cc} \frac{3}{4} & 1 \end{array} \right], \\ f''(x_0, y_0) &= \left[\begin{array}{cc} 2x^{-3} & 1 \\ 1 & 2y^{-3} \end{array} \right] \Big|_{(x,y)=(2,1)} = \left[\begin{array}{cc} \frac{1}{4} & 1 \\ 1 & 2 \end{array} \right]. \end{aligned}$$

Dle (8.13c) je (pozor, naše proměnné jsou označené jinak než v (8.13c))

$$\begin{aligned} T_2(x, y) &= f(x_0, y_0) + f'(x_0, y_0) \begin{bmatrix} x - x_0 \\ y - y_0 \end{bmatrix} + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} x - x_0 \\ y - y_0 \end{bmatrix}^T f''(x_0, y_0) \begin{bmatrix} x - x_0 \\ y - y_0 \end{bmatrix} \\ &= \frac{7}{2} + \left[\begin{array}{cc} \frac{3}{4} & 1 \end{array} \right] \begin{bmatrix} x - 2 \\ y - 1 \end{bmatrix} + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} x - 2 \\ y - 1 \end{bmatrix}^T \left[\begin{array}{cc} \frac{1}{4} & 1 \\ 1 & 2 \end{array} \right] \begin{bmatrix} x - 2 \\ y - 1 \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{8}x^2 + xy + y^2 - \frac{3}{4}x - 3y + \frac{9}{2}. \end{aligned}$$

□

8.8 Cvičení

- 8.1. Máme množiny $X = [-1, 1] \times \{0\} = \{(x, 0) \mid -1 \leq x \leq 1\} \subseteq \mathbb{R}^2$ a $Y = [-1, 1] \times [-1, 1]$. Načrtněte následující množiny:
- $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 \mid 1 \geq \min_{\mathbf{y} \in X} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2\}$
 - $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 \mid 2 \geq \max_{\mathbf{y} \in X} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2\}$
 - vrstevnice výšky 1 funkce $f(\mathbf{x}) = \min_{\mathbf{y} \in Y} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2$
 - vrstevnice výšky $\sqrt{2}$ funkce $f(\mathbf{x}) = \max_{\mathbf{y} \in Y} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2$
- 8.2. Je dána funkce dvou proměnných $f(x, y)$.
- Spočítejte derivace 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.
- 8.3. Spočítejte derivaci funkce $g(\mathbf{u}) = f(\mathbf{a}^T \mathbf{u}, \|\mathbf{u}\|_2)$ podle vektoru \mathbf{u} .
- 8.4. 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.
- 8.5. Spočítejte druhou derivaci $f''(x, y)$ (tj. Hessovu matici) funkcí (výsledek co nejvíce zjednodušte)

- a) $f(x, y) = e^{-x^2-y^2}$
b) $f(x, y) = \log(e^x + e^y)$

- 8.6. Hessova matice kvadratické formy $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$ je $f''(\mathbf{x}) = \mathbf{A} + \mathbf{A}^T$. Odvod'te.
8.7. 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.
8.8. Metoda konečných diferencí počítá derivaci funkce přibližně jako

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h},$$

kde h 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 $\mathbf{g}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ a $\mathbf{f}: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^l$ pro nějaké navzájem různé dimenze $n, m, l > 1$. Zvolte bod $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$. Spočítejte přibližně totální derivace (Jacobiho matice) $\mathbf{g}'(\mathbf{x})$ a $\mathbf{f}'(\mathbf{g}(\mathbf{x}))$ v Matlabu metodou konečných diferencí. Potom spočítejte derivaci složeného zobrazení $(\mathbf{f} \circ \mathbf{g})'(\mathbf{x})$ jednak metodou konečných diferencí a jednak vynásobením matic $\mathbf{g}'(\mathbf{x})$ a $\mathbf{f}'(\mathbf{g}(\mathbf{x}))$. Porovnejte.

Návod a řešení

- 8.2.a) $f_\varphi(x, y) = -f_x(x, y)r \sin \varphi + f_y(x, y)r \cos \varphi, f_r(x, y) = f_x(x, y) \cos \varphi + f_y(x, y) \sin \varphi$
8.2.b) $f_t(x, y) = 2f_x(x, y)(t+1) + 2tf_y(x, y)/(t^2+1)$
8.4.a) $(5, 1)/\sqrt{26}$
8.4.b) $(5, 1)^T(1, -1)/\sqrt{2} = 2\sqrt{2}$
8.5.a) $2e^{-x^2-y^2} \begin{bmatrix} 2x^2-1 & 2xy \\ 2xy & 2x^2-1 \end{bmatrix}$
8.5.b) $\frac{e^{x+y}}{(e^x+e^y)^2} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$
8.7. $T_0(x, y) = 46, T_1(x, y) = 18x - 60y - 92, T_2(x, y) = -6x^2 - 24xy - 18x + 24y^2 + 60y + 46$

Kapitola 9

Analytické podmínky na lokální extrémy

9.1 Vlastnosti bodu vzhledem k podmnožině \mathbb{R}^n

Množina $U \subseteq \mathbb{R}^n$ se nazývá **okolí** bodu $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, jestliže existuje $\varepsilon > 0$ tak, že¹

$$U = \{ \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n \mid \| \mathbf{x} - \mathbf{y} \| < \varepsilon \}. \quad (9.1)$$

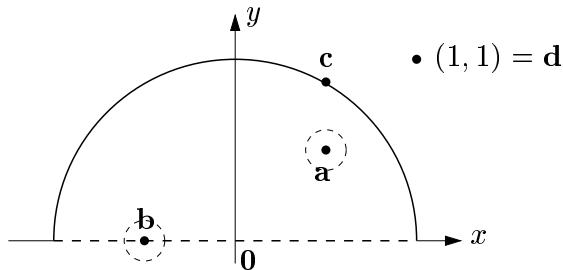
Množina U je koule (bez hranice) se středem \mathbf{x} a nenulovým poloměrem ε .

Definice 9.1. Mějme množinu $X \subseteq \mathbb{R}^n$. Bod $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ se nazývá její

- **vnitřní bod**, jestliže existuje okolí U bodu \mathbf{x} takové, že $U \subseteq X$
- **hraniční bod**, jestliže pro každé okolí U bodu \mathbf{x} je $U \cap X \neq \emptyset$ a $U \cap (\mathbb{R}^n \setminus X) \neq \emptyset$

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 9.1. Máme množinu $\{ (x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid x^2 + y^2 \leq 1, y > 0 \} \cup \{(1, 1)\}$ na obrázku:



Bod **a** je vnitřní bod množiny, protože existuje jeho okolí U , které celé leží v množině. Bod **b** je hraniční, protože každé jeho okolí má neprázdný průnik s množinou i s jejím doplňkem. Všimněte si, že **b** nepatří do množiny. Bod **a** není hraniční a bod **b** není vnitřní. Bod **c** není vnitřní, je hraniční a patří do množiny. Bod **d** je hraniční. \square

Příklad 9.2. Bod $1/2$ je vnitřní bod intervalu $(0, 1] \subseteq \mathbb{R}$ a body 0 a 1 jsou hraniční. \square

Příklad 9.3. 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

¹ Norma v (9.1) může být eukleidovská, ale i libovolná jiná vektorová p -norma (viz §11.3.1). Vnitřek a hranice množiny na výběru normy nezávisí.

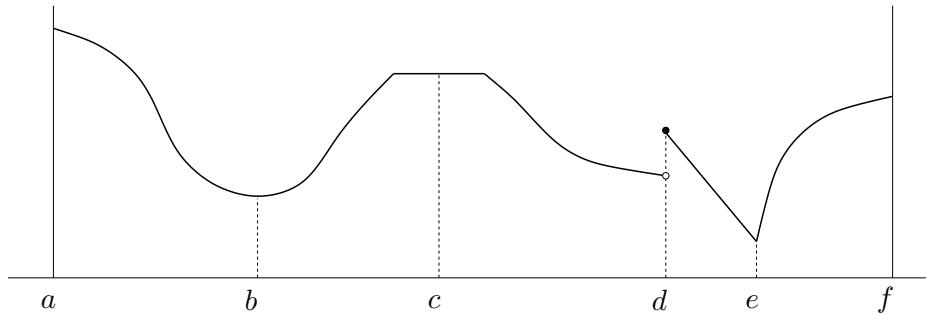
9.2 Lokální extrémy

Zopakujte si pojem extrému funkce na množině (§1.1.4): funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ nabývá na množině $X \subseteq \mathbb{R}^n$ svého minima v bodě $\mathbf{x} \in X$, jestliže $f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x}')$ pro všechna $\mathbf{x}' \in X$.

Definice 9.2. Funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ nabývá na množině $X \subseteq \mathbb{R}^n$ svého **lokálního minima** v bodě $\mathbf{x} \in X$, jestliže existuje okolí U bodu \mathbf{x} tak, že funkce f nabývá na množině $U \cap X$ svého minima v bodě \mathbf{x} .

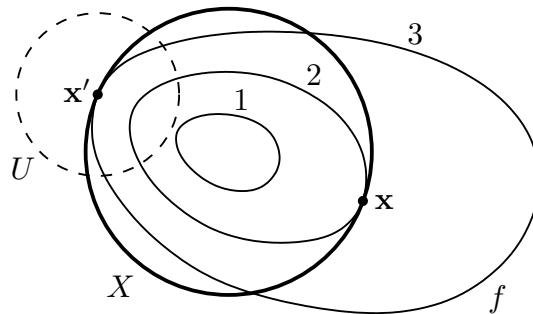
Lokální maximum se definuje obdobně. Každé minimum funkce f na množině X je zároveň lokální minimum funkce f na množině X (naopak to ale obecně neplatí). Mluvíme-li o lokálních extrémech, pro zdůraznění někdy ‘obyčejné’ extrémy (ve smyslu §1.1.4) nazýváme **globální extrémy**. Pokud odkaz na množinu X chybí, myslí se jí celý definiční obor funkce f .

Příklad 9.4. Funkce jedné proměnné na obrázku nabývá na uzavřeném intervalu $[a, f] \subseteq \mathbb{R}$ v bodě a lokálního a zároveň globálního maxima, v bodě b lokálního minima, v bodě c lokálního maxima a zároveň lokálního minima, v bodě d lokálního maxima, v bodě e lokálního a zároveň globálního minima, v bodě f lokálního maxima.



□

Příklad 9.5. 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 okolí U bodu \mathbf{x}' takové, že funkce f nabývá na části kružnice $U \cap X$ svého (globálního) minima. □

9.3 Volné lokální extrémy

Věta 9.1. Necht' $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ a $\mathbf{x} \in X \subseteq \mathbb{R}^n$. Necht'

- funkce f je v bodě \mathbf{x} diferencovatelná,
- \mathbf{x} je vnitřní bod množiny X ,
- \mathbf{x} je lokální extrém funkce f na množině X .

Pak $f'(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, neboli všechny parciální derivace funkce f v bodě \mathbf{x} jsou nulové.

Důkaz. Z Definice 9.2 plyne, že funkce f má v bodě \mathbf{x} (globální) extrém na nějakém okolí U bodu \mathbf{x} . Z toho ovšem plyne, že řez $\varphi(\alpha) = f(\mathbf{x} + \alpha\mathbf{v})$ funkce f (viz §8.4) v libovolném směru $\mathbf{v} \neq \mathbf{0}$ má (globální) extrém v bodě $\alpha = 0$ na množině $\{\alpha \in \mathbb{R} \mid \mathbf{x} + \alpha\mathbf{v} \in U\}$. Tedy funkce φ má v bodě $\alpha = 0$ lokální extrém. Tedy její derivace je v tomto bodě nulová (to víme z analýzy funkcí jedné proměnné). Ale tato derivace je směrová derivace funkce f v bodě \mathbf{x} ve směru \mathbf{v} . Parciální derivace jsou speciálním případem směrové derivace. \square

Bod, ve kterém má funkce všechny parciální derivace nulové, se nazývá její **stacionární bod**. Věta 9.1 svádí k tomu, aby se použila v situacích, kdy nejsou splněny její předpoklady. Uvedeme příklady tohoto chybějícího použití.

Příklad 9.6. V Příkladu 9.4 jsou předpoklady Věty 9.1 splněny pouze pro body b, c , které jsou stacionární a vnitřní. Body a, f jsou hraniční (tedy nevnitřní) body intervalu $[a, f]$ a v bodech d, e není funkce diferencovatelná. \square

Příklad 9.7. Funkce $f(x) = x^3$ má na \mathbb{R} v bodě 0 stacionární bod, ale nemá tam lokální extrém. To není v rozporu s Větou 9.1. \square

Příklad 9.8. Funkce $f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|_2$ má na hyperkrychli $X = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid -\mathbf{1} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{1}\}$ v bodě $\mathbf{0}$ volné lokální minimum (nakreslete si množinu a vrstevnice funkce pro $n = 1$ a pro $n = 2$!). Nemá tam ale stacionární bod, protože tam není diferencovatelná. Dále má funkce na množině X lokální maxima ve všech rozích hyperkrychle, např. v bodě $\mathbf{1}$. V bodě $\mathbf{1}$ ale není stacionární bod, což není v rozporu s Větou 9.1, protože $\mathbf{1}$ není vnitřní bod X . \square

Věta 9.1 říká, že stacionární body jsou body ‘podezřelé’ z volného lokálního extrému. Udává podmínu *prvního rádu* na volné extrémy, protože obsahuje první derivace. Následující podmínka *druhého rádu* pomůže zjistit, zda je stacionární bod lokálním extrémem, případně jakým.

Věta 9.2. Necht’ $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ a $\mathbf{x} \in X \subseteq \mathbb{R}^n$. Necht’

- funkce f je v bodě \mathbf{x} dvakrát diferencovatelná,
- \mathbf{x} je vnitřní bod množiny X ,
- $f'(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$.

Pak platí:

- Je-li Hessova matice $f''(\mathbf{x})$ pozitivně [negativně] definitní, pak \mathbf{x} je 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 .

I když Větu 9.2 nebudeme dokazovat, základní myšlenka důkazu není překvapující. Místo funkce f vyšetřujeme v blízkosti bodu \mathbf{x} její Taylorův polynom druhého stupně (8.13c),

$$T_2(\mathbf{y}) = f(\mathbf{x}) + \underbrace{f'(\mathbf{x})(\mathbf{y} - \mathbf{x})}_{0} + \frac{1}{2}(\mathbf{y} - \mathbf{x})^T f''(\mathbf{x}) (\mathbf{y} - \mathbf{x}).$$

Protože $f'(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, lineární člen je nulový a polynom je tedy kvadratická forma posunutá do bodu \mathbf{x} . Rozdíl je ale v tom, že pokud je kvadratická forma (pozitivně či negativně) semidefinitní, má v počátku extrém, zatímco Věta 9.2 o případu, kdy je $f''(\mathbf{x})$ semidefinitní, nic nepraví. V tom případě v bodě \mathbf{x} lokální extrém být může nebo nemusí (příkladem jsou funkce $f(x) = x^3$ a $f(x) = x^4$ v bodě $x = 0$). Bod \mathbf{x} , ve kterém je $f'(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ a matice $f''(\mathbf{x})$ je indefinitní, se nazývá **sedlový bod**.

Příklad 9.9. Extrémy kvadratické funkce (6.10) umíme hledat pomocí rozkladu na čtverec. Ovšem je to také možné pomocí derivací. Podmínka stacionarity je

$$\frac{d}{dx}(\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c) = 2\mathbf{x}^T \mathbf{A}^T + \mathbf{b}^T = \mathbf{0}.$$

Po transpozici dostaneme rovnici (6.12a). 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

9.4 Lokální extrémy vázané rovnostmi

Hledejme minimum funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ na množině

$$X = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \}, \quad (9.2)$$

kde $\mathbf{g} = (g_1, \dots, g_m): \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$. To odpovídá úloze (1.7) s omezeními typu rovnosti:

$$\begin{aligned} & \min f(x_1, \dots, x_n) \\ & \text{za podmínek } g_i(x_1, \dots, x_n) = 0, \quad i = 1, \dots, m. \end{aligned} \quad (9.3)$$

Mluvíme o minimu funkce f *vázaném rovnostmi* $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$.

Množina X obsahuje všechna řešení soustavy $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, což je soustava m rovnic o n neznámých. Množina X obvykle nemá žádné vnitřní body, proto nelze použít Větu 9.1. V některých případech ale lze vyjádřit všechna řešení soustavy $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ parametricky a úlohu tak převést na úlohu bez omezení. Toto jsme použili v Příkladu 1.2, uvedeme další příklady.

Příklad 9.10. Hledejme obdélník s jednotkovým obsahem a minimálním obvodem. Tedy minimalizujeme funkci $f(x, y) = x + y$ za podmínky $xy = 1$, neboli hledáme minima f na množině $X = \{ (x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid g(x, y) = 1 - xy = 0 \}$.

Množina X nemá žádné vnitřní body (dokažte!), proto nelze použít Větu 9.1. Z podmíny ale máme $y = 1/x$, což dosazeno do účelové funkce dá $f(x, 1/x) = x + 1/x$. Dle Věty 9.1 má tato funkce na svém definičním oboru dva stacionární body $x = \pm 1$. Tedy body podezřelé z lokálního extrému jsou $(x, y) = \pm(1, 1)$. \square

Příklad 9.11. Řešme úlohu

$$\begin{aligned} & \min x + y \\ & \text{za podmínky } x^2 + y^2 = 1, \end{aligned} \quad (9.4)$$

tedy hledáme minimum funkce $f(x, y) = x + y$ na množině $X = \{ (x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid g(x, y) = 0 \}$ kde $g(x, y) = 1 - x^2 - y^2$.

Množina X nemá žádné vnitřní body. Ale lze ji parametrizovat jako $X = \{ (\cos t, \sin t) \mid t \in [0, 2\pi] \}$. Úlohu tak převedeme na hledání lokálních extrémů funkce jedné proměnné $f(\cos t, \sin t) = \cos t + \sin t$. Podmínka stacionarity $df(\cos t, \sin t)/dt = -\sin t + \cos t = 0$ má dvě řešení $t = \pm \frac{\pi}{2}$.

Tedy body podezřelé z lokálního extrému jsou $(x, y) = \pm \frac{\sqrt{2}}{2}(1, 1)$. \square

Někdy ovšem množinu (9.2) parametrisovat nejde nebo je to složité. Nyní proto odvodíme obecnější postup, *metodu Lagrangeových multiplikátorů*.

9.4.1 Tečný a ortogonální prostor k povrchu

Zapomeňme nejprve na účelovou funkci f a zkoumejme jen množinu (9.2). Předpokládejme, že zobrazení \mathbf{g} je v okolí nějakého bodu $\mathbf{x} \in X$ spojitě diferencovatelné. V tom případě je množina X v okolí bodu \mathbf{x} ‘zakřivený povrch’² v \mathbb{R}^n . Pak existuje **tečný prostor** (množina všech tečných vektorů) a **ortogonální prostor** (množina všech kolmých vektorů) k povrchu X v bodě \mathbf{x} . Tyto dva prostory jsou ortogonální doplněk jeden druhého. Zde přesné definice pojmu ‘vektor tečný k povrchu’ a ‘vektor kolmý k povrchu’ neuvádíme a spoléháme na geometrickou intuici. Následující lema uvádíme bez důkazu.

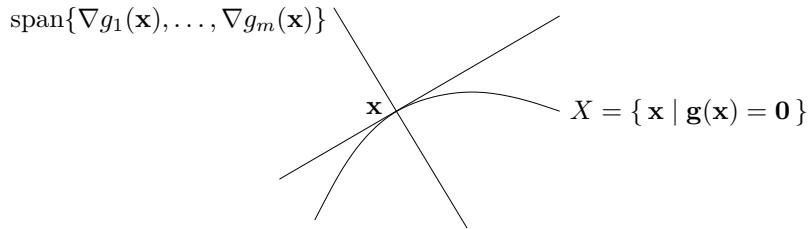
Lema 9.3. Necht’ zobrazení $\mathbf{g}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ je v bodě $\mathbf{x} \in X$ spojitě diferencovatelné. Necht’

$$\operatorname{rank} \mathbf{g}'(\mathbf{x}) = m. \quad (9.5)$$

Pak ortogonální prostor k množině X v bodě \mathbf{x} je množina

$$\operatorname{rng} \mathbf{g}'(\mathbf{x})^T = \operatorname{span}\{\nabla g_1(\mathbf{x}), \dots, \nabla g_m(\mathbf{x})\}. \quad (9.6)$$

Viz obrázek:



Jelikož řádky Jacobiho matice $\mathbf{g}'(\mathbf{x})$ jsou gradienty $\nabla g_i(\mathbf{x})$, podmínka (9.5) vlastně říká, že gradienty $\nabla g_1(\mathbf{x}), \dots, \nabla g_m(\mathbf{x})$ musí být lineárně nezávislé. Bodu $\mathbf{x} \in X$ splňující podmínku (9.5) se někdy říká **regulární bod** povrchu.

Pro $m = 1$ podmínka (9.5) zní $\nabla g(\mathbf{x}) \neq \mathbf{0}$ a lema zobecňuje skutečnost, kterou jsme bez důkazu uvedli v §8.5, totiž že gradient funkce je v každém bodě kolmý k její vrstevnici. Lema ale navíc říká, že *každý* vektor kolmý k vrstevnici musí být násobek gradientu.

Příklad 9.12. Necht’ $g: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ je funkce $g(x, y) = x^2 + y^2 - 1$. Množina X je jednotková kružnice v \mathbb{R}^2 . Máme $\nabla g(x, y) = (2x, 2y)$. Protože pro každé $(x, y) \in X$ je $\nabla g(x, y) \neq (0, 0)$, předpoklady Lematu 9.3 jsou splněny a ortogonální prostor k X v bodě (x, y) je množina $\operatorname{span}\{\nabla g(x, y)\} = \{(\alpha x, \alpha y) \mid \alpha \in \mathbb{R}\}$, což je přímka kolmá ke kružnici. Tečný prostor v bodě (x, y) je ortogonální doplněk této přímky, tedy přímka tečná ke kružnici. \square

Příklad 9.13. Necht’ $g: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ je funkce $g(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2 - 1$. Množina X je jednotková sféra v \mathbb{R}^3 . Máme $\nabla g(x, y, z) = (2x, 2y, 2z)$. Ortogonální prostor k X v bodě (x, y, z) je množina $\operatorname{span}\{\nabla g(x, y, z)\} = \{(\alpha x, \alpha y, \alpha z) \mid \alpha \in \mathbb{R}\}$, což je přímka kolmá ke sféře. Tečný prostor v bodě (x, y, z) je ortogonální doplněk této přímky, tedy rovina tečná ke sféře. \square

² Přesněji, množina X je příkladem objektu, který se nazývá *diferencovatelný manifold*. Studiem takových objektů se zabývá *diferenciální geometrie*.

Příklad 9.14. Necht' $\mathbf{g} = (g_1, g_2): \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^2$ je zobrazení

$$\mathbf{g}(x, y, z) = (x^2 + y^2 + z^2 - 1, (x-1)^2 + y^2 + z^2 - 1).$$

Nulová vrstevnice funkce g_1 je jednotková sféra se středem v bodě $(0, 0, 0)$, nulová vrstevnice funkce g_2 je jednotková sféra se středem v bodě $(1, 0, 0)$. Množina X je průnik těchto dvou sfér, je to tedy kružnice v \mathbb{R}^3 . Máme $\nabla g_1(x, y, z) = 2(x, y, z)$ a $\nabla g_2(x, y, z) = 2(x-1, y, z)$. Ortogonální prostor k množině X v bodě (x, y, z) je množina $\text{span}\{\nabla g_1(x, y, z), \nabla g_2(x, y, z)\} = \{\alpha_1(x, y, z) + \alpha_2(x-1, y, z) \mid \alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{R}\}$, což je rovina kolmá ke kružnici v bodě (x, y, z) . Tečný prostor je ortogonální doplněk této množiny, tedy přímka tečná ke kružnici. \square

Příklad 9.15. Necht' $g: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ je funkce $g(x, y) = (x^2 + y^2 - 1)^2$. Množina X je stejná kružnice jako v Příkladě 9.12. Máme $\nabla g(x, y) = 4(x^2 + y^2 - 1)(x, y)$. Pro každý bod $(x, y) \in X$ je $\nabla g(x, y) = (0, 0)$, tedy předpoklady Lematu 9.3 nejsou splněny. Ortogonální prostor není množina $\text{span}\{\nabla g(x, y)\} = \{(0, 0)\}$. \square

9.4.2 Podmínky prvního řádu

Nyní přidáme do našich úvah i účelovou funkci f . Je intuitivně zřejmé (důkaz neuvádíme), že pokud \mathbf{x} má být lokální extrém funkce f na množině X , směrová derivace $f'(\mathbf{x})\mathbf{v} = \nabla f(\mathbf{x})^T \mathbf{v}$ funkce f v bodě \mathbf{x} v každém směru \mathbf{v} tečném k povrchu X musí být nulová. To znamená, že gradient $\nabla f(\mathbf{x})$ musí být kolmý k tečnému prostoru v bodě \mathbf{x} , neboli musí patřit do ortogonálního prostoru (9.6), neboli musí být lineární kombinací gradientů $\nabla g_1(\mathbf{x}), \dots, \nabla g_m(\mathbf{x})$. Tedy existují čísla $\lambda_1, \dots, \lambda_m \in \mathbb{R}$ tak, že

$$\nabla f(\mathbf{x}) + \lambda_1 \nabla g_1(\mathbf{x}) + \dots + \lambda_m \nabla g_m(\mathbf{x}) = \mathbf{0}. \quad (9.7)$$

Výsledek těchto úvah se obvykle formuluje následujícím způsobem.

Věta 9.4. Necht' $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $\mathbf{g}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, $\mathbf{x} \in X$. Necht'

- f a \mathbf{g} jsou v bodě \mathbf{x} spojitě diferencovatelné,
- $\text{rank } \mathbf{g}'(\mathbf{x}) = m$,
- bod \mathbf{x} je lokální extrém funkce f na množině X .

Pak existují čísla $(\lambda_1, \dots, \lambda_m) = \boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m$ tak, že $L'(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = \mathbf{0}$, kde funkce $L: \mathbb{R}^{n+m} \rightarrow \mathbb{R}$ je dána jako

$$L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = f(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{g}(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) + \lambda_1 g_1(\mathbf{x}) + \dots + \lambda_m g_m(\mathbf{x}). \quad (9.8)$$

Zápis $L'(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = \mathbf{0}$ označuje, že parciální derivace funkce L podle $x_1, \dots, x_n, \lambda_1, \dots, \lambda_m$ jsou nulové, neboli bod $(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) \in \mathbb{R}^{m+n}$ je stacionární bod funkce L . Rovnost $\partial L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) / \partial \mathbf{x} = \mathbf{0}$ je ekvivalentní rovnosti (9.7). Rovnost $\partial L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) / \partial \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ je ekvivalentní omezení. Číslům λ_i se říká **Lagrangeovy multiplikátory** a funkci (9.8) **Lagrangeova funkce**.

Příklad 9.16. Řešme znovu Příklad 9.11. Lagrangeova funkce je

$$L(x, y, \lambda) = x + y + \lambda(1 - x^2 - y^2).$$

Její stacionární body (x, y, λ) jsou řešeními soustavy tří rovnic o třech neznámých

$$\begin{aligned} \partial L(x, y, \lambda) / \partial x &= 1 - 2\lambda x &= 0 \\ \partial L(x, y, \lambda) / \partial y &= 1 - 2\lambda y &= 0 \\ \partial L(x, y, \lambda) / \partial \lambda &= 1 - x^2 - y^2 &= 0. \end{aligned}$$

První dvě rovnice dají $x = y = 1/(2\lambda)$. Dosazením do třetí máme $2/(2\lambda)^2 = 1$, což dá dva kořeny $\lambda = \pm 1/\sqrt{2}$. Stacionární body funkce L jsou dva, $(x, y, \lambda) = \pm(1, 1, 1)/\sqrt{2}$. Tedy máme dva kandidáty na lokální extrémy, $(x, y) = \pm(1, 1)/\sqrt{2}$.

Tuto jednoduchou úlohu je samozřejmě snadné vyřešit úvahou. Nakreslete si kružnici $X = \{(x, y) \mid x^2 + y^2 = 1\}$ a několik vrstevnic funkce f a najděte kýžené extrémy! \square

Příklad 9.17. Řešme Příklad 9.11, kde ale omezení změníme na $g(x, y) = (1 - x^2 - y^2)^2 = 0$. Podle Příkladu 9.15 máme $g'(x, y) = (0, 0)$ pro každé $(x, y) \in X$, čekáme tedy potíž.

Stacionární body Lagrangeovy funkce $L(x, y, \lambda) = x + y + \lambda(1 - x^2 - y^2)^2$ musí splňovat

$$\begin{aligned}\partial L(x, y, \lambda)/\partial x &= 1 - 4\lambda x(1 - x^2 - y^2) = 0 \\ \partial L(x, y, \lambda)/\partial y &= 1 - 4\lambda y(1 - x^2 - y^2) = 0 \\ \partial L(x, y, \lambda)/\partial \lambda &= (1 - x^2 - y^2)^2 = 0.\end{aligned}$$

Tyto rovnice si odporují. Jelikož $1 - x^2 - y^2 = 0$, tak např. první rovnice říká $1 - 4\lambda x \cdot 0 = 0$, což neplatí pro žádné (x, λ) . Závěr je, že lokální extrémy $(x, y) = \pm(1, 1)/\sqrt{2}$ jsme nenašli. \square

Příklad 9.18. Vrat'me se k úloze (5.14), tedy k hledání řešení nehomogenní lineární soustavy s nejmenší normou. Lagrangeova funkce je

$$L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = \mathbf{x}^T \mathbf{x} + 2\boldsymbol{\lambda}^T (\mathbf{b} - \mathbf{Ax}),$$

kde přidaná dvojka nemění situaci. Je $\partial L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})/\partial \mathbf{x} = 2\mathbf{x}^T - 2\boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{A}$ (odvod'tel!). Stacionární body funkce L tedy získáme řešením soustavy (5.15), kterou jsme v 5.2 odvodili úvahou. \square

Předchozí příklad vyžaduje od studenta nejen znalost metody Lagrangeových multiplikátorů, ale i jistou zručnost v manipulaci s maticovými výrazy. Cvičte tuto zručnost ve Cvičeních 9.22–9.25!

Věta 9.4 udává podmínky prvního rádu na extrémy vázané rovnostmi. Říká, že pokud $(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$ je stacionární bod Lagrangeovy funkce, pak bod \mathbf{x} je ‘podezřelý’ z lokálního extrému funkce f na množině X . Jak poznáme, zda tento bod je lokální extrém, případně jaký? Podmínky druhého rádu pro vázané extrémy uvádíme nepovinně v §9.4.3. Zde pouze zdůrazníme, že druh lokálního extrému nelze zjistit podle definitnosti Hessovy matice $L''(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$, tedy je chybou použít Větu 9.2 na funkci L .

9.4.3 (*) Podmínky druhého rádu

Věta 9.5. Nechť $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $\mathbf{g}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ a $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m$. Nechť

- $(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$ je stacionární bod Lagrangeovy funkce, neboli $\partial L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})/\partial \mathbf{x} = \mathbf{0}$ a $\partial L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})/\partial \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{0}$,
- f a \mathbf{g} jsou dvakrát diferencovatelné v bodě \mathbf{x} .

Pak platí:

- Je-li $\partial^2 L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})/\partial \mathbf{x}^2$ pozitivně [negativně] definitní na nulovém prostoru matice $\mathbf{g}'(\mathbf{x})$, má f v bodě \mathbf{x} ostré lokální minimum [maximum] vázané podmínkou $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$.
- Je-li $\partial^2 L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})/\partial \mathbf{x}^2$ indefinitní na nulovém prostoru matice $\mathbf{g}'(\mathbf{x})$, nemá f v bodě \mathbf{x} lokální minimum ani lokální maximum vázané podmínkou $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$.

Zde výraz

$$\frac{\partial^2 L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})}{\partial \mathbf{x}^2} = f''(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g''_i(\mathbf{x})$$

značí druhou derivaci (Hessovu matici) funkce $L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$ podle \mathbf{x} v bodě $(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$. Tvrzení, že matici \mathbf{A} je pozitivně definitní na množině T znamená, že $\mathbf{y}^T \mathbf{A} \mathbf{y} > 0$ pro každé $\mathbf{y} \in T \setminus \{\mathbf{0}\}$.

Jak zjistíme definitnost dané matice \mathbf{A} na nulovém prostoru Jacobiho matice $\mathbf{g}'(\mathbf{x})$? Najdeme-li bázi \mathbf{B} tohoto nulového prostoru, pak každý prvek množiny T lze parametrizovat jako $\mathbf{y} = \mathbf{B} \mathbf{z}$. Protože $\mathbf{y}^T \mathbf{A} \mathbf{y} = \mathbf{z}^T \mathbf{B}^T \mathbf{A} \mathbf{B} \mathbf{z}$, převedli jsme problém na zjištování definitnosti matice $\mathbf{B}^T \mathbf{A} \mathbf{B}$.

Příklad 9.19. Najděme strany kvádru s jednotkovým objem a minimálním povrchem. Tedy minimalizujeme $xy + xz + yz$ za podmínky $xyz = 1$. Lagrangeova funkce je

$$L(x, y, z, \lambda) = xy + xz + yz + \lambda(1 - xyz).$$

Položením derivací L rovným nule máme soustavu

$$\begin{aligned} L'_x(x, y, z, \lambda) &= y + z - \lambda yz = 0 \\ L'_y(x, y, z, \lambda) &= x + z - \lambda xz = 0 \\ L'_z(x, y, z, \lambda) &= x + y - \lambda xy = 0 \\ L'_{\lambda}(x, y, z, \lambda) &= xyz - 1 = 0. \end{aligned}$$

Soustava je zjevně splněna pro $(x, y, z, \lambda) = (1, 1, 1, 2)$. Máme ukázat, že tento bod odpovídá lokálnímu minimu. Máme

$$\frac{\partial^2 L(x, y, z, \lambda)}{\partial(x, y, z)^2} = \begin{bmatrix} 0 & 1 - \lambda z & 1 - \lambda y \\ 1 - \lambda z & 0 & 1 - \lambda x \\ 1 - \lambda y & 1 - \lambda x & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & -1 \\ -1 & -1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (9.9)$$

Ukážeme, že tato matice je pozitivně definitní na nulovém prostoru Jacobiho matice

$$\mathbf{g}'(x, y, z) = [-yz \quad -xz \quad -xy] = [-1 \quad -1 \quad -1].$$

Nejdříve zkusme štěstí, zda matice (9.9) není pozitivně definitní již na \mathbb{R}^3 – v tom případě by zjevně byla pozitivně definitní i na nulovém prostoru $\mathbf{g}'(x, y, z)$ (promyslete, proč to tak je!). Není tomu tak, protože její vlastní čísla jsou $\{-2, 1, 1\}$, tedy je indefinitní.

Nějakou bázi nulového prostoru matice $\mathbf{g}'(x, y, z)$ snadno najdeme ručně, např.

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Snadno zjistíme, že matice

$$\mathbf{B}^T \frac{\partial^2 L(x, y, z, \lambda)}{\partial(x, y, z)^2} \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & -1 \\ -1 & -1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}.$$

má vlastní čísla $\{2, 1\}$, tedy je pozitivně definitní. \square

9.5 Cvičení

9.1. Co je vnitřek a hranice těchto množin? Výsledek napište v množinovém zápisu.

- a) $\{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid x^2 + y^2 = 1, y \geq 0\}$
- b) $\{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid y = x^2, -1 < x \leq 1\}$
- c) $\{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid xy < 1, x > 0, y > 0\}$
- d) $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \max_{i=1}^n x_i \leq 1\}$
- e) $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{a}^T \mathbf{x} = b\}$, kde $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$, $b \in \mathbb{R}$ (nadrovina)
- f) $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid b < \mathbf{a}^T \mathbf{x} \leq c\}$, kde $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$, $b, c \in \mathbb{R}$
- g) $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}\}$ kde $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$

9.2. Je dána funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, množiny $Y \subseteq X \subseteq \mathbb{R}^n$, a bod $\mathbf{x} \in Y$. Uvažujme dva výroky:

- a) Funkce f má v bodě \mathbf{x} lokální minimum na množině X .
- b) Funkce f má v bodě \mathbf{x} lokální minimum na množině Y .

Vyplývá (b) z (a)? Vyplývá (a) z (b)? Dokažte z definice lokálního extrému nebo vyvrat'te nalezením protipřípadu.

9.3. Může nastat případ, kdy funkce na množině má lokální minimum ale nemá na ní globální minimum? Odpověď dokažte.

9.4. 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

- a) $\{2, 3, -1\}$
- b) $\{2, 3, 0\}$
- c) $\{2, 1, 1\}$

9.5. Pro následující funkce spočítejte (na papíře) stacionární body. Pro každý stacionární bod určete, zda je to lokální minimum, lokální maximum, či sedlový bod. Pokud to určit nedokážete, odůvodněte.

- a) $f(x, y) = x(1 - \frac{2}{3}x^2 - y^2)$
- b) $f(x, y) = 1/x + 1/y + xy$
- c) $f(x, y) = e^y(y^2 - x^2)$
- d) $f(x, y) = 3x - x^3 - 3xy^2$
- e) $f(x, y) = 6xy^2 - 2x^3 - 3y^4$
- f) $f(x, y) = x^4/3 + y^4/2 - 4xy^2 + 2x^2 + 2y^2 + 3$
- g) $f(x, y, z) = x^3 + y^3 + 2xyz + z^2$

9.6. Dokažte, že funkce $f(x, y) = x$ nabývá za podmínky $x^3 = y^2$ minima pouze v počátku. Ukažte, že metoda Lagrangeových multiplikátorů toto minimum nenajde.

Následující úlohy se pokuste vyřešit parametrizací podmínek (analogicky k Příkladu 9.11) a pak metodou Lagrangeových multiplikátorů. Pokud jedna z těchto metod není použitelná, vyneschte ji. Při použití metody Lagrangeových multiplikátorů stačí pouze najít stacionární body Lagrangeovy funkce – nemusíte určovat, jde-li o lokální extrémy a případně jaké.

9.7. Najděte lokální extrémy funkcí

- a) $f(x, y) = 2x - y$
- b) $f(x, y) = x(y - 1)$
- c) $f(x, y) = x^2 + 2y^2$
- d) $f(x, y) = x^2y$
- e) $f(x, y) = x^4 + y^2$
- f) $f(x, y) = \sin(xy)$
- g) $f(x, y) = e^{xy}$

na kružnici $x^2 + y^2 = 1$. Nápověda: Někdy je dobré účelovou funkci zjednodušit, pokud to nezmění řešení.

9.8. Najděte extrémy funkce

- a) $f(x, y, z) = x + yz$ za podmínek $x^2 + y^2 + z^2 = 1$ a $z^2 = x^2 + y^2$
- b) $f(x, y, z) = xyz$ za podmínek $x^2 + y^2 + z^2 = 1$ a $xy + yz + zx = 1$

9.9. Najděte extrémy funkce

- a) $f(x, y, z) = (x + y)(y + z)$
- b) $f(x, y, z) = a/x + b/y + c/z$, kde $a, b, c > 0$ jsou dány
- c) $f(x, y, z) = x^3 + y^2 + z$
- d) $f(x, y, z) = x^3 + y^3 + z^3 + 2xyz$
- e) $(\star) f(x, y, z) = x^3 + y^3 + z^3 - 3xyz$
- f) $(\star) f(x, y, z) = x^3 + 2xyz - z^3$

na sféře $x^2 + y^2 + z^2 = 1$.

9.10. Rozložte dané kladné reálné číslo na součin n kladných reálných čísel tak, aby jejich součet byl co nejmenší.

9.11. Spočítejte rozměry tělesa tak, aby mělo při daném objemu nejmenší povrch:

- a) kvádr
- b) kvádr bez víka (má jednu dolní stěnu a čtyři boční, horní stěna chybí)
- c) válec
- d) půllitr (válec bez víka)
- e) (\star) kelímek (komolý kužel bez víka). Objem komolého kužele je $V = \frac{\pi}{3}h(R^2 + Rr + r^2)$
a povrch pláště (bez podstav) je $S = \pi(R+r)\sqrt{(R-r)^2 + h^2}$. Můžete použít vhodný numerický software na řešení vzniklé soustavy rovnic.

9.12. Najděte bod nejblíže počátku na křivce

- a) $x + y = 1$
- b) $x + 2y = 5$
- c) $y = x^3 + 1$
- d) $x^2 + 2y^2 = 1$

9.13. Necht' \mathbf{x}^* je bod nejblíže počátku na nadploše $h(\mathbf{x}) = 0$. Ukažte metodou Lagrangeových multiplikátorů, že vektor \mathbf{x}^* je kolmý k tečné nadrovině plochy v bodě \mathbf{x}^* .

9.14. Máme kouli o poloměru r a středu \mathbf{x}_0 , tj. množinu $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0\|_2 \leq r \}$. Máme nadrovinu $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{a}^T \mathbf{x} = b \}$.

- 9.15. Do elipsy o daných délkách os vepište obdélník s maximálním obsahem. Předpokládejte přitom, že strany obdélníku jsou rovnoběžné s osami elipsy.
- 9.16. *Fermatův princip* v paprskové optice říká, že cesta mezi libovolnými dvěma body na paprsku má takový tvar, aby ji světlo proběhlo za čas kratší než jí blízké dráhy. Později se zjistilo, že správným kritériem není *nejkratší* ale *extrémní* čas. Tedy skutečná dráha paprsku musí mít čas větší nebo menší než jí blízké dráhy. Z tohoto principu odvod'te:
- Zákon odrazu od zrcadla: úhel dopadu se rovná úhlu odrazu.
 - Snellův zákon lomu: na rozhraní dvou prostředí se světlo lomí tak, že

$$\frac{c_1}{c_2} = \frac{\sin \alpha_1}{\sin \alpha_2},$$

kde α_i je úhel paprsku od normály rozhraní a c_i je rychlosť světla v prostředí i .

Odvození udělejte:

- Pro rovinné zrcadlo a rovinné rozhraní (což vede na minimalizaci bez omezení).
 - Pro zrcadlo a rozhraní tvaru obecné plochy s rovnicí $g(\mathbf{x}) = 0$. Dokážete najít situaci, kdy skutečná dráha paprsku má čas *větší* než jí blízké dráhy?
- 9.17. Rozdělení pravděpodobnosti diskrétní náhodné proměnné je funkce $p: \{1, \dots, n\} \rightarrow \mathbb{R}_+$ (tj. soubor nezáporných čísel $p(1), \dots, p(n)$) splňující $\sum_{x=1}^n p(x) = 1$.
- Entropie* náhodné proměnné s rozdělením p je rovna $-\sum_{x=1}^n p(x) \log p(x)$, kde \log je přirozený logaritmus. Najděte rozdělení s maximální entropií.
 - Dokažte *Gibbsovu nerovnost* (též zvanou *informační nerovnost*): pro každé dvě rozdělení p, q platí
- $$\sum_{x=1}^n p(x) \log q(x) \geq \sum_{x=1}^n p(x) \log p(x),$$
- přičemž rovnost nastává jen tehdy, když $p = q$.
- 9.18. (*) Máme trojúhelník se stranami délky a, b, c . Uvažujme bod, který má takovou polohu, že součet čtverců jeho vzdáleností od stran trojúhelníku je nejmenší možný. Jaké budou vzdálenosti x, y, z tohoto bodu od stran trojúhelníku?
- 9.19. (*) Máme krychli s délkou hrany 2. Do stěny krychle je vepsána kružnice (která má tedy poloměr 1) a okolo sousední stěny je opsána kružnice (která má tedy poloměr $\sqrt{2}$). Najděte nejmenší a největší vzdálenost mezi body na kružnicích.
- 9.20. (*) Najděte extrémy funkce

$$f(x, y, z, u, v, w) = (1 + x + u)^{-1} + (1 + y + v)^{-1} + (1 + z + w)^{-1}$$

za podmínek $xyz = a^3$, $uvw = b^3$ a $x, y, z, u, v, w > 0$.

- 9.21. Popište množinu řešení soustavy

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

Najděte takové řešení soustavy, aby výraz $\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ byl co nejmenší. Najděte co nejvíce způsobů řešení.

- 9.22. Minimalizujte $\mathbf{x}^T \mathbf{x}$ za podmínky $\mathbf{a}^T \mathbf{x} = 1$. Jaký je geometrický význam úlohy?
- 9.23. Maximalizujte $\mathbf{a}^T \mathbf{x}$ za podmínky $\mathbf{x}^T \mathbf{x} = 1$. Jaký je geometrický význam úlohy?
- 9.24. Minimalizujte $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$ za podmínky $\mathbf{b}^T \mathbf{x} = 1$, kde \mathbf{A} je symetrická pozitivně definitní.
- 9.25. Minimalizujte $\|\mathbf{C} \mathbf{x}\|_2$ za podmínky $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$, kde \mathbf{A} má lineárně nezávislé řádky a \mathbf{C} má lineárně nezávislé sloupce.
- 9.26. (*) Minimalizujte $\|\mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2$ za podmínky $\mathbf{C} \mathbf{x} = \mathbf{0}$, kde \mathbf{A} má lineárně nezávislé sloupce a \mathbf{C} má lineárně nezávislé řádky.
- 9.27. (*) Minimalizujte $\|\mathbf{C} \mathbf{x}\|_2$ za podmínek $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{0}$ a $\mathbf{x}^T \mathbf{x} = 1$.
- 9.28. (*) Minimalizujte $\|\mathbf{A} \mathbf{x}\|_2$ za podmínky $\mathbf{x}^T \mathbf{C} \mathbf{x} = 1$, kde \mathbf{C} je pozitivně definitní.
- 9.29. (*) Minimalizujte $\mathbf{a}^T \mathbf{x}$ za podmínky $\mathbf{x}^T \mathbf{C} \mathbf{x} = 1$, kde \mathbf{C} je pozitivně definitní.
- 9.30. (*) Jaké musí být vlastnosti matice \mathbf{A} a vektoru \mathbf{b} , aby $\max\{\|\mathbf{A} \mathbf{x}\|_2 \mid \mathbf{b}^T \mathbf{x} = 0\} = 0$?

Návod a řešení

- 9.1.a) vnitřek \emptyset , hranice původní množina
- 9.1.b) vnitřek \emptyset , hranice $\{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid y = x^2, -1 \leq x \leq 1\}$
- 9.1.c) vnitřek původní množina, hranice $\{(x, 0) \mid x \geq 0\} \cup \{(0, y) \mid y \geq 0\} \cup \{(x, y) \mid xy = 1\}$
- 9.1.d) $\max_{i=1}^n x_i \leq 1$ je totéž co $x_i \leq 1$ pro všechna i , tedy množina jde napsat také jako $(-\infty, 1]^n$ (kartézský součin n stejných polootevřených intervalů). Vnitřek je $(-\infty, 1)^n$, hranice (těžko se popíše krátceji) je $(-\infty, 1]^n \setminus (-\infty, 1)^n$
- 9.1.e) vnitřek \emptyset , hranice původní množina
- 9.1.f) vnitřek $\{\mathbf{x} \mid b < \mathbf{a}^T \mathbf{x} < c\}$, hranice $\{\mathbf{x} \mid \mathbf{a}^T \mathbf{x} = b\} \cup \{\mathbf{x} \mid \mathbf{a}^T \mathbf{x} = c\}$
- 9.1.g) Vnitřek nemá, hranice je původní množina.
- 9.3. může
- 9.4.a) funkce nemá v tomto bodě lokální extrém
- 9.4.b) nemůžeme rozhodnout, zda má funkce má v tomto bodě lokální extrém
- 9.4.c) funkce má v tomto bodě lokální minimum
- 9.5.d) Stacionární body jsou 4.
- 9.5.e) Stacionární body jsou 3.
- 9.5.f) Stacionárních bodů je 5.
- 9.5.g) Stacionární body jsou 3, a to $(0, 0, 0)$, $(3/2, 3/2, -9/4)$, $(3/2, 3/2, -9/4)$.
- 9.16.a) Uděláme jen pro obecný případ (ii). Máme dva body \mathbf{a}, \mathbf{b} a hledáme bod \mathbf{x} splňující $g(\mathbf{x}) = 0$ pro který je celková dráha $\|\mathbf{x} - \mathbf{a}\|_2 + \|\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2$ extremální. Stacionární body Lagrangeovy funkce splňují $(\mathbf{x} - \mathbf{a})^0 + (\mathbf{x} - \mathbf{b})^0 = \lambda \nabla g(\mathbf{x})$, kde $\mathbf{y}^0 = \mathbf{y}/\|\mathbf{y}\|_2$. Ale to říká, že vektor $\nabla g(\mathbf{x})$ leží v jedné rovině s jednotkovými vektory $(\mathbf{x} - \mathbf{a})^0$ a $(\mathbf{x} - \mathbf{b})^0$ a půlí úhel mezi nimi. Pro důkaz druhého tvrzení násobte rovnici vektoru $(\mathbf{x} - \mathbf{a})^0$ a $(\mathbf{x} - \mathbf{b})^0$ a porovnejte.
- 9.24. $\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b} / (\mathbf{b}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b})$
- 9.25. $\mathbf{x} = (\mathbf{C}^T \mathbf{C})^{-1} \mathbf{A}^T (\mathbf{A} (\mathbf{C}^T \mathbf{C})^{-1} \mathbf{A}^T)^{-1} \mathbf{b}$.
- 9.26. $\mathbf{x} = [\mathbf{I} - (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{C}^T (\mathbf{C} (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{C}^T)^{-1} \mathbf{C}^T] (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{b}$

Kapitola 10

Iterační algoritmy na volné lokální extrémy

Zde se budeme věnovat numerickým iteračním algoritmům na nalezení volného lokálního minima diferencovatelných funkcí na množině \mathbb{R}^n .

10.1 Sestupné metody

Iterační algoritmy na hledání lokálního minima spojité funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ mají tvar

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{v}_k, \quad (10.1)$$

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

$$f'(\mathbf{x}_k) \mathbf{v}_k < 0, \quad (10.2)$$

tedy směrová derivace ve směru \mathbf{v}_k je záporná. Pokud v bodě \mathbf{x}_k existuje sestupný směr, existuje délka kroku $\alpha_k > 0$ 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 polopřímce z bodu \mathbf{x}_k ve směru \mathbf{v}_k . Tedy minimalizujeme funkci jedné proměnné

$$\varphi(\alpha_k) = f(\mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{v}_k) \quad (10.3)$$

přes všechny $\alpha_k \geq 0$. Tato úloha je v kontextu vícerozměrné optimalizace nazývána *line search*. Úlohu stačí řešit přibližně. Takovou přibližnou metodu není obtížné vymyslet a proto se jí dále nebudeme zabývat.

Dále uvedeme nejznámější zástupce sestupných metod.

¹ Existují 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*).

10.2 Gradientní metoda

Tato nejjednodušší metoda volí směr sestupu jako záporný gradient funkce f v bodě \mathbf{x}_k :

$$\mathbf{v}_k = -f'(\mathbf{x}_k)^T = -\nabla f(\mathbf{x}_k). \quad (10.4)$$

Tento směr je sestupný, což je okamžitě vidět dosazením do (10.2).

Nevýhodou gradientní metody je to, že konvergence může být pomalá kvůli ‘cik-cak’ chování. 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 $f''(\mathbf{x})$ mají velmi různé velikosti). Výhodou metody je spolehlivost, protože směr je vždy sestupný.

10.2.1 (*) Závislost na lineární transformaci souřadnic

Transformujme vektor proměnných \mathbf{x} lineární transformací $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{A}\mathbf{x}$, kde \mathbf{A} je čtvercová regulární matice. Je jasné, že funkce f původních proměnných \mathbf{x} bude mít stejné lokální extrémy jako funkce \tilde{f} nových proměnných $\tilde{\mathbf{x}}$, daná jako

$$\tilde{f}(\tilde{\mathbf{x}}) = \tilde{f}(\mathbf{A}\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{A}^{-1}\tilde{\mathbf{x}}).$$

Iterace gradientní metody v nových proměnných je

$$\tilde{\mathbf{x}}_{k+1} = \tilde{\mathbf{x}}_k - \alpha_k \tilde{f}'(\tilde{\mathbf{x}}_k)^T. \quad (10.5)$$

Zkoumejme, jaké iteraci to odpovídá v původních proměnných. K tomu potřebujeme vyjádřit (10.5) v proměnných \mathbf{x} . Použitím řetězového pravidla odvodíme

$$\tilde{f}'(\tilde{\mathbf{x}}) = \frac{d\tilde{f}(\tilde{\mathbf{x}})}{d\tilde{\mathbf{x}}} = \frac{d\tilde{f}(\tilde{\mathbf{x}})}{d\mathbf{x}} \frac{d\mathbf{x}}{d\tilde{\mathbf{x}}} = \frac{df(\mathbf{x})}{d\mathbf{x}} \frac{d\mathbf{x}}{d\tilde{\mathbf{x}}} = f'(\mathbf{x})\mathbf{A}^{-1}.$$

Dosazením za $\tilde{\mathbf{x}}$ a $\tilde{f}'(\tilde{\mathbf{x}})$ do (10.5) a úpravou dostaneme

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \alpha_k (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} f'(\mathbf{x}_k)^T. \quad (10.6)$$

To lze napsat ve tvaru (10.1) se směrem hledání

$$\mathbf{v}_k = -(\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} f'(\mathbf{x}_k)^T. \quad (10.7)$$

Tento směr se liší od původního směru (10.4) vynásobením maticí $(\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1}$. Vidíme tedy, že gradientní metoda *není invariantní* vůči lineární transformaci souřadnic.

Ovšem lze ukázat, že nový směr (10.7) je také sestupný. Dosazením (10.4) do (10.2) 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 6.16.

Na vzorec (10.7) 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 pozitivně definitní. Dá se ukázat i opak, totiž že každý sestupný směr lze napsat takto. Matice \mathbf{C}_k může být jiná v každém kroku. Uvidíme, že algoritmy uvedené dále budou mít vždy tento tvar.

10.3 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.

10.3.1 Použití na soustavy nelineárních rovnic

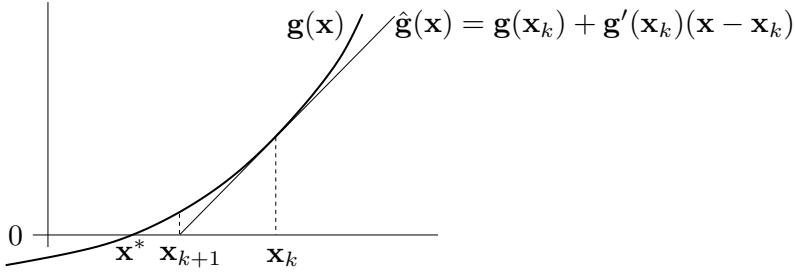
Řešme rovnici $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, kde $\mathbf{g}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ je diferencovatelné zobrazení. Jedná se tedy o soustavu n rovnic s n neznámými. Zobrazení \mathbf{g} approximujeme v okolí bodu \mathbf{x}_k Taylorovým polynomem prvního stupně

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) \approx \hat{\mathbf{g}}(\mathbf{x}) = \mathbf{g}(\mathbf{x}_k) + \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k), \quad (10.8)$$

kde Jacobiho matice $\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je derivace zobrazení v bodě \mathbf{x}_k . Další iteraci \mathbf{x}_{k+1} najdeme řešením nehomogenní lineární soustavy $\hat{\mathbf{g}}(\mathbf{x}_{k+1}) = \mathbf{0}$. Pokud je Jacobiho matice regulární, řešením je

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^{-1} \mathbf{g}(\mathbf{x}_k). \quad (10.9)$$

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 approximací \mathbf{x}_0 skutečného řešení, jinak algoritmus snadno diverguje.

Příklad 10.1. Babylónská metoda na výpočet druhé odmocniny čísla $a \geq 0$ je dána iterací

$$x_{k+1} = \frac{1}{2} \left(x_k + \frac{a}{x_k} \right).$$

To není nic jiného než Newtonova metoda pro řešení rovnice $0 = g(x) = x^2 - a$. 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 10.2. Hledáme průsečík $(x, y) \in \mathbb{R}^2$ dvou křivek $(x - 1)^2 + y^2 = 1$ a $x^4 + y^4 = 1$. Máme

$$\mathbf{g}(x, y) = \begin{bmatrix} (x - 1)^2 + y^2 - 1 \\ x^4 + y^4 - 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{g}'(x, y) = \begin{bmatrix} 2(x - 1) & 2y \\ 4x^3 & 4y^3 \end{bmatrix}.$$

Iterace (10.9) je

$$\begin{bmatrix} x_{k+1} \\ y_{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_k \\ y_k \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 2(x_k - 1) & 2y_k \\ 4x_k^3 & 4y_k^3 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} (x_k - 1)^2 + y_k^2 - 1 \\ x_k^4 + y_k^4 - 1 \end{bmatrix}.$$

Načrtneme-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

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 2 \\ 4 & 4 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.75 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Šestá iterace $(x_6, y_6) = (0.671859751039018, 0.944629015546222)$ je taková, že rovnice jsou splněny se strojovou přesností. \square

Příklad 10.3. 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 10.4. 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

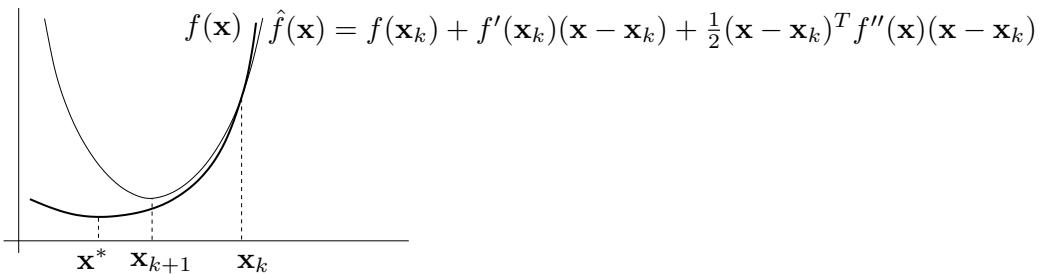
10.3.2 Použití na minimalizaci funkce

Newtonovu metodu lze použít pro hledání lokálního extrému dvakrát diferencovatelné funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ tak, že v algoritmu (10.9) položíme $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = f'(\mathbf{x})^T$. Tím dostaneme iteraci

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - f''(\mathbf{x}_k)^{-1} f'(\mathbf{x}_k)^T, \quad (10.10)$$

kde $f''(\mathbf{x}_k)$ je Hessova matici funkce f v bodě \mathbf{x}_k .

Význam iterace (10.9) byl takový, že se zobrazení \mathbf{g} v bodě \mathbf{x}_k approximovalo Taylorovým polynomem prvního stupně (tedy affiním zobrazením) a pak se našel kořen \mathbf{x}_{k+1} tohoto polynomu. Význam iterace (10.10) je takový, že se funkce f approximuje Taylorovým polynomem druhého stupně (tedy kvadratickou funkcí) a pak se najde minimum této kvadratické funkce. Odvod'te podrobně, že tomu tak je!



Iteraci (10.10) lze napsat v obecnějším tvaru (10.1), kde

$$\mathbf{v}_k = -f''(\mathbf{x}_k)^{-1} f'(\mathbf{x}_k)^T. \quad (10.11)$$

Výhodou tohoto zobecnění je možnost zvolit optimální (ne nutně jednotkovou) délku kroku pomocí jednorozměrné minimalizace (10.3). Algoritmu (10.10) s jednotkovou délkou kroku se pak říká **čistá** Newtonova metoda.

Vektoru (10.11) říkáme **Newtonův směr**. Vidíme, že se od gradientního směru (10.4) 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 §10.3.1 je zde matice $\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k) = f''(\mathbf{x}_k)$ symetrická, což může řešení soustavy uléhčit.

10.4 Nelineární metoda nejmenších čtverců

Řešme přeurovenou soustavu rovnic $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ pro $\mathbf{g}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ (tedy soustavu m rovnic s n neznámými) ve smyslu nejmenších čtverců. To vede na minimalizaci funkce

$$f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{g}(\mathbf{x})\|_2^2 = \mathbf{g}(\mathbf{x})^T \mathbf{g}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m g_i(\mathbf{x})^2, \quad (10.12)$$

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). Zde ovšem předpokládáme obecně nelineární zobrazení \mathbf{g} .

Zatímco v §10.2 a §10.3.2 bylo cílem minimalizovat *obecnou* funkci, zde chceme minimalizovat funkci ve speciálním tvaru (10.12). Nyní máme dvě možnosti. Bud' můžeme nasadit na funkci (10.12) jednu z metod pro minimalizaci obecné funkce, k čemuž se vrátíme v §10.4.2. Nebo můžeme být chytřejší a využít speciálního tvaru funkce (10.12), což popíšeme v §10.4.1.

10.4.1 Gauss-Newtonova metoda

Aproximujme opět zobrazení \mathbf{g} Taylorovým polynomem prvního stupně (10.8). Úloha (10.12) pak vyžaduje minimalizovat $\|\hat{\mathbf{g}}(\mathbf{x})\|_2^2$. To je úloha lineárních nejmenších čtverců, kterou již známe z §5.1. Normální rovnice (5.3) mají tvar

$$\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) = -\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{g}(\mathbf{x}_k).$$

Pokud má Jacobiho matice $\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)$ lineárně nezávislé sloupce (tedy hodnost n , viz §5.1), tuto rovnici můžeme vyřešit pseudoinverzí:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^+ \mathbf{g}(\mathbf{x}_k). \quad (10.13)$$

Algoritmus (10.13) je znám jako **Gauss-Newtonova metoda**. Můžeme jej opět napsat obecněji ve tvaru (10.1) se směrem hledání

$$\mathbf{v}_k = -\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^+ \mathbf{g}(\mathbf{x}_k) \quad (10.14a)$$

$$= -(\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k))^{-1} \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{g}(\mathbf{x}_k) \quad (10.14b)$$

$$= -\frac{1}{2} (\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k))^{-1} f'(\mathbf{x}_k)^T. \quad (10.14c)$$

Pro $m = n$ máme $\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^+ = \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^{-1}$, tedy Gauss-Newtonova metoda se redukuje na Newtonovu metodu (10.9) na řešení soustavy n rovnic s n neznámými.

Tvar (10.14c) dostaneme z (10.14b) dosazením derivace účelové funkce (10.12)

$$f'(\mathbf{x}) = 2\mathbf{g}(\mathbf{x})^T \mathbf{g}'(\mathbf{x})$$

(viz §8.3.2). Vidíme, že Gauss-Newtonův směr (10.14c) se liší od gradientního směru (10.4) 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

$$f'(\mathbf{x}_k) \mathbf{v}_k = -\frac{1}{2} f'(\mathbf{x}_k) (\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k))^{-1} f'(\mathbf{x}_k)^T < 0.$$

Toto 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 tehdy, když $\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)$ má lineárně nezávislé sloupce

(dokažte!), 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 (10.12). Protože ale Gauss-Newtonův směr je vždy sestupný, vhodnou volbou délky kroku α_k lze vždy zajistit konvergenci.

Příklad 10.5. Hledáme přibližné řešení soustavy tří rovnic $(x - 1)^2 + y^2 = 1$, $x^4 + y^4 = 1$, $x^2 + (y - 1)^2 = 1/2$ o dvou neznámých. Oba průsečíky křivek daných prvními dvěma rovnicemi již známe z Příkladu 10.2. Ani jeden z těchto průsečíků neleží na třetí křivce (i když je jí blízko), tedy soustava je přeurovená. Nezbývá 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

$$\mathbf{g}(x, y) = \begin{bmatrix} (x - 1)^2 + y^2 - 1 \\ x^4 + y^4 - 1 \\ x^2 + (y - 1)^2 - 1/2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{g}'(x, y) = \begin{bmatrix} 2(x - 1) & 2y \\ 4x^3 & 4y^3 \\ 2x & 2(y - 1) \end{bmatrix}.$$

Rozumný počáteční odhad je $(x_0, y_0) = (1, 1)$. První Gauss-Newtonova iterace (10.13) 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 10.6. 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 $y_i = \|\mathbf{a}_i - \mathbf{x}\|_2$ pozorovatele od satelitů. Měření jsou zatížena chybou, proto obecně tato soustava rovnic nebude mít žádné řešení. Řešme tuto přeurovenou nelineární soustavu ve smyslu nejmenších čtverců, tedy minimalizujme funkci

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m (\|\mathbf{x} - \mathbf{a}_i\|_2 - y_i)^2.$$

Máme tedy $\mathbf{g} = (g_1, \dots, g_m) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, kde $g_i(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x} - \mathbf{a}_i\|_2 - y_i$. Derivace složek \mathbf{g} je (pomůžete nám §8.3.2, ale udělejte sami!) $g'_i(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - \mathbf{a}_i)^T / \|\mathbf{x} - \mathbf{a}_i\|_2$. Tedy

$$\mathbf{g}'(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} (\mathbf{x} - \mathbf{a}_1)^T / \|\mathbf{x} - \mathbf{a}_1\|_2 \\ \vdots \\ (\mathbf{x} - \mathbf{a}_m)^T / \|\mathbf{x} - \mathbf{a}_m\|_2 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n}.$$

Pak dosadíme do vzorečku (10.13). \square

10.4.2 Rozdíl proti Newtonově metodě

Předpokládejme, že bychom optimalizovali naší účelovou funkci (10.12) přímo Newtonovou metodou z §10.3.2. Spočítejme (provedte sami!) Hessián funkce (10.12):

$$f''(\mathbf{x}) = 2\mathbf{g}'(\mathbf{x})^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}) + 2 \sum_{i=1}^m g_i(\mathbf{x})g_i''(\mathbf{x}). \quad (10.15)$$

Hessián je součtem členu obsahujícího derivace prvního rádu a členu obsahujícího derivace druhého rádu. Vidíme, že Gauss-Newtonův směr (10.14c) se liší od Newtonova směru (10.11) zanedbáním členu druhého rádu v Hessiánu (10.15). Jinými slovy, Gauss-Newtonovu metodu je možno vnímat jako approximaci Newtonovy metody na minimalizaci funkce (10.12) spočívající v tom, že skutečný Hessián (10.15) se approximuje 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 (10.12). Ovšem vyhnuli jsme se počítání druhých derivací funkce \mathbf{g} , což je hlavní výhoda Gauss-Newtonovy metody.

10.4.3 Levenberg-Marquardtova metoda

Levenberg-Marquardtova metoda je široce používané vylepšení Gauss-Newtonovy metody, které její iteraci

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

nahrazuje iterací

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - (\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k) + \mu_k \mathbf{I})^{-1} \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{g}(\mathbf{x}_k) \quad (10.16)$$

kde $\mu_k > 0$. Vidíme, že:

- Pro malé μ_k se (10.16) 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 (10.16) je blízká iteraci $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \mu_k^{-1} \mathbf{f}'(\mathbf{x}_k)^T$ 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 spojite přecházíme mezi oběma metodami.

Parametr μ_k měníme během algoritmu. Začneme např. s $\mu_0 = 10^3$ a pak v každé iteraci:

- 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*).

Na algoritmus lze pohlížet i jinak. V iteraci (10.13) se počítá inverze matice $\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)$. Tato matice je sice vždy pozitivně semidefinitní, ale může být blízká singulární (kdy se to stane?). To neblaze ovlivní stabilitu algoritmu. Matice (10.16) je ale vždy pozitivně definitní (viz Cvičení 6.17), a tedy regulární.

10.5 Cvičení

- Najděte všechna řešení rovnice $\sin x = \frac{1}{2}x$ (sinus je v radiánech) na kalkulačce s největší přesností, jakou dokážete. Na kalkulačce smíte používat jen operace $+, -, \times, /, \sin, \cos$.

- 10.2. Najděte lokální extrém funkce $f(x, y) = x^2 - y + \sin(y^2 - 2x)$ čistou Newtonovou metodou. Počáteční odhad zvolte $(x_0, y_0) = (1, 1)$.
- 10.3. 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. Odvod'te iteraci Gauss-Newtonovy a Levenberg-Marquardtovy metody.
- 10.4. 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 (10.12). Napište iteraci

- a) gradientní metody,
 - b) Newtonovy metody,
 - c) Gauss-Newtonovy metody,
 - d) Levenberg-Marquardtovy metody.
- 10.5. Rovnici $x^2 + 1 = 0$ lze vnímat jako soustavu s $n = 1$ neznámou a $m = 1$ rovnicí. Soustava nemá řešení, chceme ji tedy řešit přibližně Gauss-Newtonovou metodou. Ovšem protože je $m = n$, redukuje se Gauss-Newtonova iterace (10.13) na Newtonovu iteraci (10.9). Má tato formulace tedy smysl? K čemu bude metoda konvergovat?

Návod a řešení

- 10.1. Jeden kořen je $x = 0$ a pak dva další lišící se znaménkem. Jeden z nich získáme Newtonovou metodou: $x \leftarrow x - (2 \sin x - x)/(2 \cos x - 1)$. Počáteční odhad zvolíme pomocí náčrtku $x = 2$. Po několika iteracích máme $x = 1.895494267033981$.
- 10.4. 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.

Kapitola 11

Lineární programování

Lineární rovnicí rozumíme výrok $a_1x_1 + \dots + a_nx_n = b$, neboli $h(\mathbf{x}) = 0$ kde h je afinní funkce.
Lineární nerovnicí rozumíme výrok $a_1x_1 + \dots + a_nx_n \leq b$ či $a_1x_1 + \dots + a_nx_n \geq b$, neboli $g(\mathbf{x}) \leq 0$ či $g(\mathbf{x}) \geq 0$ kde g je afinní funkce. Úloha **lineárního programování** (LP, také zvané lineární optimalizace) znamená minimalizaci lineární funkce za podmínek ve tvaru lineárních rovnic a nerovnic. Neboli v obecné formulaci (1.7) je funkce f lineární (tj. tvaru (3.5)) a funkce g_i, h_i jsou affiní (tj. tvaru (3.17)).

Stejně jako pro obecnou úlohu spojité optimalizace (viz §1.2) mohou nastat tři případy:

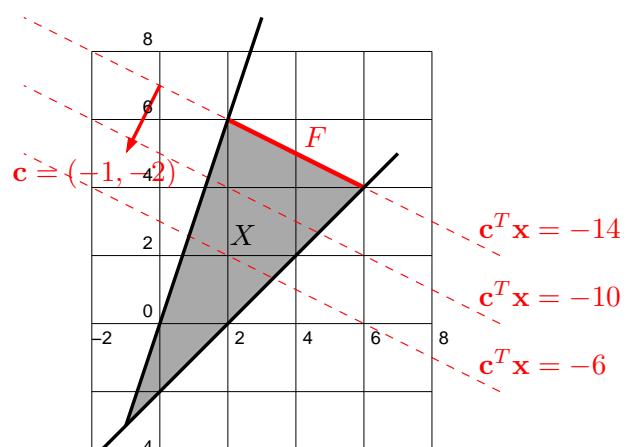
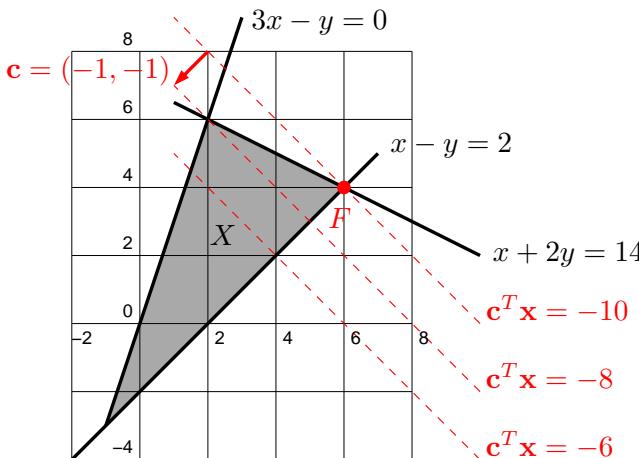
- úloha má (alespoň jedno) optimální řešení,
- úloha je *nepřípustná* (množina přípustných řešení je prázdná, omezení si odporují),
- úloha je *neomezená* (účelovou funkci lze za daných omezení libovolně zlepšovat).

Jednoduché úlohy lineárního programování lze řešit graficky.

Příklad 11.1. Mějme lineární program

$$\begin{array}{ll} \min & -x - y \\ \text{za podmínek} & \begin{aligned} x + 2y &\leq 14 \\ 3x - y &\geq 0 \\ x - y &\leq 2 \end{aligned} \end{array} \quad (11.1)$$

Množina $X = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid x + 2y \leq 14, 3x - y \geq 0, x - y \leq 2\}$ přípustných řešení této úlohy je průnik tří polorovin. Tuto množinu snadno nakreslíme:



Účelová funkce $-x - y$, neboli $\mathbf{c}^T \mathbf{x}$ pro $\mathbf{x} = (x, y)$ a $\mathbf{c} = (-1, -1)$, má vrstevnice kolmé k vektoru \mathbf{c} a roste ve směru \mathbf{c} . Proto (viz levý obrázek) účelová funkce na množině X nabývá (globálního) minima v bodě $(x, y) = (6, 4)$. Úloha má tedy jediné optimální řešení.

Pokud bychom účelovou funkci úlohy (11.1) změnili na $-x - 2y$, bude tato funkce na množině X nabývat minima ve všech bodech úsečky spojující body $(2, 6)$ a $(6, 4)$ (viz pravý obrázek). Úloha má tedy nekonečně mnoho optimálních řešení. \square

11.1 Speciální tvary úloh LP

Algoritmy na řešení LP často předpokládají úlohu v nějakém speciálním tvaru, kdy jsou dovoleny pouze jisté typy omezení. Nejčastěji užívané speciální tvary jsou

- $\min\{\mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \mathbf{x} \geq \mathbf{0}\}$, kde $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^n$. Neboli

$$\min c_1 x_1 + \cdots + c_n x_n$$

$$\text{za podmínek } a_{i1} x_1 + \cdots + a_{in} x_n = b_i, \quad i = 1, \dots, m \\ x_j \geq 0, \quad j = 1, \dots, n$$

Tedy dovolujeme pouze omezení typu rovnosti a nezáporné proměnné¹.

- $\min\{\mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{Ax} \geq \mathbf{b}, \mathbf{x} \geq \mathbf{0}\}$
- $\min\{\mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{Ax} \geq \mathbf{b}\}$

Tyto speciální tvary LP nemají menší vyjadřovací schopnost než obecný tvar (ve kterém omezení mohou být libovolné lineární rovnice či nerovnice), neboť obecný tvar se dá převést na libovolný speciální tvar některou z následujících úprav:

- Maximalizaci funkce $\mathbf{c}^T \mathbf{x}$ nahradíme minimalizací funkce $-\mathbf{c}^T \mathbf{x}$.
- Nerovnost $\mathbf{a}^T \mathbf{x} \leq 0$ nahradíme nerovností $-\mathbf{a}^T \mathbf{x} \geq 0$.
- Rovnost $\mathbf{a}^T \mathbf{x} = b$ nahradíme dvěma nerovnostmi $\mathbf{a}^T \mathbf{x} \geq b$, $-\mathbf{a}^T \mathbf{x} \geq -b$.
- Nerovnost $\mathbf{a}^T \mathbf{x} \leq b$ převedeme na rovnost přidáním pomocné **slackové proměnné**² $u_i \geq 0$ jako $\mathbf{a}^T \mathbf{x} + u_i = b_i$. Podobně převedeme nerovnost $\mathbf{a}^T \mathbf{x} \geq b$ na rovnost.
- Neomezenou proměnnou $x_i \in \mathbb{R}$ rozdělíme na dvě nezáporné proměnné $x_i^+ \geq 0$, $x_i^- \geq 0$ přidáním podmínky $x_i = x_i^+ - x_i^-$.

Úloha získaná z původní úlohy pomocí těchto úprav je ekvivalentní původní úloze v tom smyslu, že hodnota jejich optima je stejná a argument optima původní úlohy lze ‘snadno’ získat z argumentu optima nové úlohy.

Příklad 11.2. V úloze (11.1) chceme první podmínu převést na rovnost. To uděláme zavedením slackové proměnné $u \geq 0$. Transformovaná úloha je

$$\begin{aligned} \min & -x - y \\ \text{za podmínek} & x + 2y + u = 14 \\ & 3x - y \geq 0 \\ & x - y \leq 2 \\ & u \geq 0 \end{aligned}$$

¹Tomuto tvaru se někdy říká *standardní*. Bohužel názvosloví různých tvarů LP není jednotné, názvy jako ‘standardní tvar’, ‘základní tvar’ či ‘kanonický tvar’ tedy mohou znamenat v různých knihách něco jiného.

²Slack znamená anglicky např. mezeru mezi zdí a skříní, která není zcela přiražená ke zdi. Termín *slack variable* nemá ustálený český ekvivalent, někdy se překládá jako *skluzová proměnná*.

Je-li (x, y, u) optimum této úlohy, optimum úlohy (11.1) je (x, y) . \square

Příklad 11.3. V úloze (11.1) obě proměnné mohou mít libovolné znaménko. Chceme převést úlohu na tvar, kde všechny proměnné jsou nezáporné. Dosadíme $x = x_+ - x_-$ a $y = y_+ - y_-$, kde $x_+, x_-, y_+, y_- \geq 0$. Výsledná úloha je

$$\begin{aligned} & \min -x_+ + x_- - y_+ + y_- \\ \text{za podmínek } & x_+ - x_- + 2y_+ - 2y_- \leq 14 \\ & 3x_+ - 3x_- - y_+ + y_- \geq 0 \\ & x_+ - x_- - y_+ + y_- \leq 2 \\ & x_+, x_-, y_+, y_- \geq 0 \end{aligned}$$

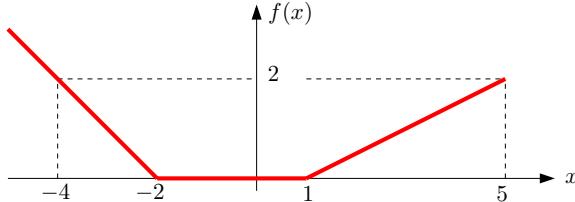
\square

11.1.1 Po částech affinní funkce

Mějme funkci $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ danou vzorcem

$$f(\mathbf{x}) = \max_{i=1}^k (\mathbf{c}_i^T \mathbf{x} + d_i), \quad (11.2)$$

kde $\mathbf{c}_i \in \mathbb{R}^n$ a $d_i \in \mathbb{R}$ jsou dány. Tato funkce není lineární ani affinní, je po částech affinní (viz Cvičení 11.6). Příkladem pro $n = 1$ a $k = 3$ je funkce $f(x) = \max\{-x - 2, 0, \frac{1}{2}(x - 1)\}$, jejíž graf je na obrázku:



Řešme úlohu

$$\min \{ f(\mathbf{x}) \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{A}\mathbf{x} \geq \mathbf{b} \}. \quad (11.3)$$

To není úloha LP, neboť její účelová funkce není lineární. Ovšem lze ji převést na LP zavedením pomocné proměnné:

$$\min \{ f(\mathbf{x}) \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{A}\mathbf{x} \geq \mathbf{b} \} = \min \{ z \mid (\mathbf{x}, z) \in \mathbb{R}^{n+1}, f(\mathbf{x}) \leq z, \mathbf{A}\mathbf{x} \geq \mathbf{b} \} \quad (11.4a)$$

$$= \min \{ z \mid (\mathbf{x}, z) \in \mathbb{R}^{n+1}, \max_i (\mathbf{c}_i^T \mathbf{x} + d_i) \leq z, \mathbf{A}\mathbf{x} \geq \mathbf{b} \} \quad (11.4b)$$

$$= \min \{ z \mid (\mathbf{x}, z) \in \mathbb{R}^{n+1}, (\forall i)(\mathbf{c}_i^T \mathbf{x} + d_i \leq z), \mathbf{A}\mathbf{x} \geq \mathbf{b} \} \quad (11.4c)$$

Rovnost (11.4a) platí proto, že v optimu pravé úlohy je $f(\mathbf{x}) = z$. Kdyby bylo $f(\mathbf{x}) < z$, mohli bychom totiž z zmenšit bez porušení omezení a tedy (\mathbf{x}, z) by nebylo optimum. Rovnost (11.4c) platí proto, že pro libovolná čísla a_i, b platí

$$\max_i a_i \leq b \iff (\forall i)(a_i \leq b). \quad (11.5)$$

Řádek (11.4c) je již úloha LP.

Příklad 11.4. Úloha

$$\begin{aligned} \min \quad & \max\{3x_1 + 4x_2, 2x_1 - 3x_2\} \\ \text{za podm.} \quad & x_1 + 2x_2 \leq 14 \\ & 3x_1 - x_2 \geq 0 \\ & x_1 - x_2 \leq 2 \end{aligned}$$

není LP, protože účelová funkce $f(x_1, x_2) = \max\{3x_1 + 4x_2, 2x_1 - 3x_2\}$ není lineární ani affiní (nakreslete si na papír její vrstevnice!). Úlohu lze ale přeformulovat na LP

$$\begin{aligned} \min \quad & z \\ \text{za podm.} \quad & 3x_1 + 4x_2 \leq z \\ & 2x_1 - 3x_2 \leq z \\ & x_1 + 2x_2 \leq 14 \\ & 3x_1 - x_2 \geq 0 \\ & x_1 - x_2 \leq 2 \end{aligned}$$

□

Tento převod lze užít i pro funkce obsahující absolutní hodnoty, neboť $|x| = \max\{-x, x\}$. Je ale nutná opatrnost: neplatí nic takového jako $(\min_i a_i \leq b) \Leftrightarrow (\forall i)(a_i \leq b)$, tedy máme-li špatnou kombinaci minim/maxim a nerovností, převod na LP není možný.

11.2 Některé aplikace LP

11.2.1 Optimální výrobní program

Z m druhů surovin vyrábíme n druhů výrobků.

- a_{ij} = množství suroviny druhu i potřebné na výrobu výrobku druhu j
- b_i = množství suroviny druhu i , které máme k dispozici
- c_j = zisk z vyrobení jednoho výrobku druhu j
- x_j = počet vyrobených výrobků druhu j

Úkolem je zjistit, kolik jakých výrobků máme vyrobit, abychom dosáhli největšího zisku. Řešení:

$$\max \left\{ \sum_{j=1}^n c_j x_j \mid \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \leq b_i, x_j \geq 0 \right\}. \quad (11.6)$$

Příklad 11.5. Pán u stánku prodává lupínky za 120 Kč/kg a hranolky za 76 Kč/kg. Na výrobu 1 kg lupínek se spotřebuje 2 kg brambor a 0.4 kg oleje. Na výrobu 1 kg hranolky se spotřebuje 1.5 kg brambor a 0.2 kg oleje. Je nakoupeno 100 kg brambor a 16 kg oleje. Brambory stály 12 Kč/kg, olej 40 Kč/kg. Kolik má pán vyrobit lupínek a kolik hranolek, aby co nejvíce vydělal? To lze vyjádřit jako LP

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

Přitom předpokládáme, že zbytky surovin se po pracovní době vyhodí. Pokud se zbytky využijí, tak maximalizujeme $(120 - 24 - 16)l + (76 - 18 - 8)h = 80l + 50h$.

V obou případech je optimální řešení $l = 20$ kg lupínek a $h = 40$ kg hranolek. □

11.2.2 Směšovací (dietní) problém

Z n druhů surovin, z nichž každá je směsí m druhů látek, máme namíchat konečný produkt o požadovaném složení tak, aby cena surovin byla minimální.

- a_{ij} = množství látky druhu i obsažené v jednotkovém množství suroviny druhu j
- b_i = nejmenší požadované množství látky druhu i v konečném produktu
- c_j = jednotková cena suroviny druhu j
- x_j = množství suroviny druhu j

Řešení:

$$\min \left\{ \sum_{j=1}^n c_j x_j \mid \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \geq b_i, x_j \geq 0 \right\}. \quad (11.7)$$

Příklad 11.6. Jste kuchařka v menze a chcete uvařit pro studenty co nejlevnější oběd, ve kterém ovšem kvůli předpisům musí být dané minimální množství živin (cukrů, bílkovin a vitamínů). Oběd vaříte ze tří surovin: brambor, masa a zeleniny. Jsou dány hodnoty v tabulce:

	na jednotku brambor	na jednotku masa	na jednotku zeleniny	min. požadavek na jeden oběd
obsah cukrů	2	1	1	8
obsah bílkovin	2	6	1	16
obsah vitamínů	1	3	6	8
cena	25	50	80	

Kolik je třeba každé suroviny na jeden oběd?

Minimalizujeme $25b+50m+80z$ za podmínek $2b+m+z \geq 8$, $2b+6m+z \geq 16$, $b+3m+6z \geq 8$ a $b, m, z \geq 0$. Optimální řešení je $b = 3.2$, $m = 1.6$, $z = 0$ s hodnotou 160. \square

11.2.3 Dopravní problém

Máme m výrobců a n spotřebitelů.

- a_i = množství zboží vyráběné výrobcem i
- b_j = množství zboží požadované spotřebitelem j
- c_{ij} = cena dopravy jednotky zboží od výrobce i ke spotřebiteli j
- x_{ij} = množství zboží vezené od výrobce i ke spotřebiteli j

Chceme co nejlevněji rozvézt zboží od výrobců ke spotřebitelům. Řešení:

$$\min \left\{ \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n c_{ij} x_{ij} \mid \sum_{j=1}^n x_{ij} = a_i, \sum_{i=1}^m x_{ij} = b_j, x_{ij} \geq 0 \right\}. \quad (11.8)$$

Zadání musí splňovat $\sum_{i=1}^m a_i = \sum_{j=1}^n b_j$ (nabídka musí být rovna poptávce), jinak bude úloha nepřípustná. Úloha jde modifikovat tak, že dovolíme $\sum_{i=1}^m a_i \geq \sum_{j=1}^n b_j$ (proved'te!).

11.3 Použití na nehomogenní lineární soustavy

11.3.1 Vektorové normy

Norma formalizuje pojem ‘délky’ vektoru \mathbf{x} .

Definice 11.1. Funkce $\|\cdot\|: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ se nazývá vektorová³ **norma**, jestliže splňuje tyto axiomy:

1. Jestliže $\|\mathbf{x}\| = 0$ pak $\mathbf{x} = \mathbf{0}$.
2. $\|\alpha \mathbf{x}\| = |\alpha| \|\mathbf{x}\|$ pro každé $\alpha \in \mathbb{R}$ a $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ (norma je kladně homogenní).
3. $\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|$ pro každé $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ (trojúhelníková nerovnost).

Z axiomů plynou tyto další vlastnosti normy:

- $\|\mathbf{0}\| = 0$, což plyne z homogeneity pro $\alpha = 0$
- $\|\mathbf{x}\| \geq 0$ pro každé $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$. To jde odvodit tak, že v trojúhelníkové nerovnosti položíme $\mathbf{y} = -\mathbf{x}$, což dá

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{x}\| = \|\mathbf{0}\| = 0 \leq \|\mathbf{x}\| + \|-\mathbf{x}\| = 2\|\mathbf{x}\|,$$

kde na pravé straně jsme použili homogenitu.

Jednotková sféra normy je množina $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \|\mathbf{x}\| = 1\}$, tedy vrstevnice normy jednotkové výšky. Díky homogenitě je jednotková sféra středově symetrická a její tvar zcela určuje normu.

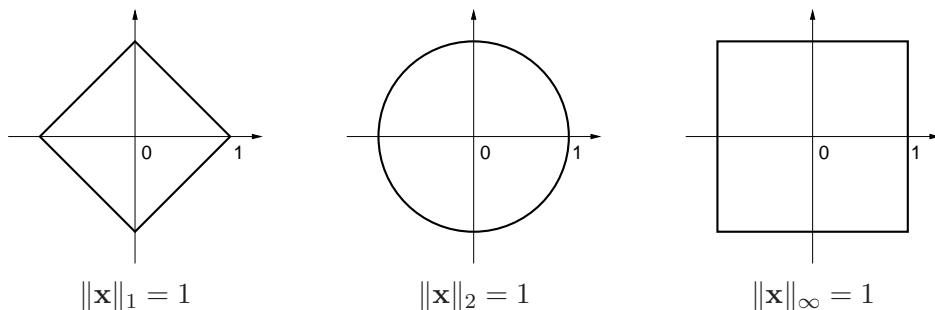
Uvedeme příklady norem. Základním příkladem je **p -norma**

$$\|\mathbf{x}\|_p = (|x_1|^p + \cdots + |x_n|^p)^{1/p}.$$

Musí být $p \geq 1$, jinak neplatí trojúhelníková nerovnost. Nejčastěji narazíte na:

- $\|\mathbf{x}\|_1 = |x_1| + \cdots + |x_n|$. Někdy se jí říká *manhattanská norma*, protože v systému pravoúhlých ulic je vzdálenost mezi body \mathbf{x} a \mathbf{y} rovna $\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_1$.
- $\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{x_1^2 + \cdots + x_n^2} = \sqrt{\mathbf{x}^T \mathbf{x}}$. Je to známá *eukleidovská norma*.
- $\|\mathbf{x}\|_\infty = \lim_{p \rightarrow \infty} \|\mathbf{x}\|_p = \max\{|x_1|, \dots, |x_n|\}$ (dokažte rovnost výpočtem limity!). Někdy se jí říká *Čebyševova norma* nebo *max-norma*.

Jednotkové sféry těchto norem v \mathbb{R}^2 vypadají takto:



Existují ale i normy, které nejsou p -normy, např.

- $\|\mathbf{x}\| = 2|x_1| + \sqrt{x_2^2 + x_3^2} + \max\{|x_4|, |x_5|\}$ je norma na \mathbb{R}^5 .
- Je-li $\|\mathbf{x}\|$ norma a \mathbf{A} je čtvercová nebo úzká matice s plnou hodností, je také $\|\mathbf{Ax}\|$ norma.

³Existují i *maticové* normy, což jsou funkce $\mathbb{R}^{m \times n} \rightarrow \mathbb{R}$. Příkladem je Frobeniova norma (7.8).

11.3.2 Přibližné řešení přeuročených soustav

Mějme přeuročenou lineární soustavu $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, kde $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ a $\mathbf{0} \neq \mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$. Nalezení jejího přibližného řešení formulujme jako úlohu

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_p. \quad (11.9)$$

Uvažujme tři případy:

- Pro $p = \infty$ hledáme takové \mathbf{x} , které minimalizuje výraz

$$\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_\infty = \max_{i=1}^m |\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} - b_i|, \quad (11.10)$$

tedy minimalizuje maximální residuum. Toto řešení je známé pod názvem *minimaxní* nebo *Čebyševovo*. Úloha je ekvivalentní lineárnímu programu

$$\begin{aligned} & \min z \\ \text{za podm. } & \mathbf{a}_i^T \mathbf{x} - b_i \leq z, \quad i = 1, \dots, m \\ & -\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} + b_i \leq z, \quad i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

neboli

$$\min \{ z \in \mathbb{R} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, -z\mathbf{1} \leq \mathbf{Ax} - \mathbf{b} \leq z\mathbf{1} \}. \quad (11.11)$$

- Pro $p = 2$ dostaneme řešení ve smyslu nejmenších čtverců, které jsme odvodili v §5.1.
- Pro $p = 1$ hledáme takové \mathbf{x} , které minimalizuje výraz

$$\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_1 = \sum_{i=1}^m |\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} - b_i|, \quad (11.12)$$

kde $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m$ jsou řádky matice \mathbf{A} . Úloha je ekvivalentní lineárnímu programu

$$\begin{aligned} & \min \sum_{i=1}^m z_i \\ \text{za podm. } & \mathbf{a}_i^T \mathbf{x} - b_i \leq z_i, \quad i = 1, \dots, m \\ & -\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} + b_i \leq z_i, \quad i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

neboli

$$\min \{ \mathbf{1}^T \mathbf{z} \mid \mathbf{z} \in \mathbb{R}^m, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, -\mathbf{z} \leq \mathbf{Ax} - \mathbf{b} \leq \mathbf{z} \}. \quad (11.13)$$

11.3.3 Lineární regrese

Vrat'me se k lineární regresi z §5.1.3 (znovu přečtěte!). Funkční závislost přibližně popsanou naměřenými dvojicemi (t_i, y_i) , $i = 1, \dots, m$, jsme approximovali regresní funkcí

$$f(t, \mathbf{x}) = x_1 \varphi_1(t) + \dots + x_n \varphi_n(t) = \boldsymbol{\varphi}(t)^T \mathbf{x},$$

kde parametry \mathbf{x} jsou takové, aby $y_i \approx f(t_i, \mathbf{x})$ pro všechna i . Přibližné rovnosti \approx jsme chápali ve smyslu nejmenších čtverců, tedy hledali jsme takové \mathbf{x} které minimalizovalo funkci

$$\sum_{i=1}^m (y_i - f(t_i, \mathbf{x}))^2 = \|\mathbf{y} - \mathbf{Ax}\|_2, \quad (11.14)$$

kde $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_m)$ a prvky matice \mathbf{A} jsou $a_{ij} = \varphi_j(t_i)$. Tedy řešíme úlohu (11.9) pro $p = 2$. Můžeme ale použít i jiné normy než eukleidovskou. Pro $p = 1$ minimalizujeme

$$\sum_{i=1}^m |y_i - f(t_i, \mathbf{x})| = \|\mathbf{y} - \mathbf{Ax}\|_1 \quad (11.15)$$

a pro $p = \infty$ minimalizujeme

$$\max_{i=1}^m |y_i - f(t_i, \mathbf{x})| = \|\mathbf{y} - \mathbf{Ax}\|_\infty. \quad (11.16)$$

Dále ukážeme, k čemu to může být dobré.

Regresu ve smyslu ∞ -normy je vhodná např. při approximaci funkcí.

Příklad 11.7. Na počítači bez matematického koprocesoru potřebujeme mnohokrát vyhodnocovat funkci sinus na intervalu $[0, \frac{\pi}{2}]$. Protože výpočet hodnot této funkce by trvalo příliš dlouho, chceme ji approximovat polynomem třetího stupně $x_1 + x_2 t + x_3 t^2 + x_4 t^3$, jehož hodnoty se spočítají rychleji. Spočítejme hodnoty $y_i = \sin t_i$ funkce v dostatečném počtu bodů $t_i = \frac{\pi i}{2n}$ pro $i = 1, \dots, m$. Koeficienty polynomu je vhodné hledat minimalizací Čebyševova kritéria (11.16), neboť to nám dá záruku, že chyba approximace nikde nepřesáhne hodnotu, která je nejmenší možná pro daný stupeň polynomu. \square

Regresu ve smyslu 1-normy je užitečná tehdy, když je malá část hodnot y_i naměřená úplně špatně (např. se někdo při zapisování čísel spletl v desetinné čárce). Takovým hodnotám se říká **vychýlené hodnoty** (*outliers*). Disciplína zabývající se modelováním funkčních závislostí za přítomnosti vychýlených hodnot se nazývá **robustní regrese**. V tomto případě řešení ve smyslu nejmenších čtverců není vhodné (není 'robustní'), protože i jediný vychýlený bod velmi ovlivní řešení. Regresu ve smyslu 1-normy je proti vychýleným bodům odolnější.

Ukážeme to na nejjednodušším možném případu regrese: odhad hodnoty jediného čísla ze souboru jeho nepřesných měření. Pro daná čísla $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_m) \in \mathbb{R}^m$ hledáme $x \in \mathbb{R}$ minimalizující funkci

$$f(x) = \|(x - y_1, \dots, x - y_m)\|_p = \|\mathbf{1}x - \mathbf{y}\|_p. \quad (11.17)$$

- Pro $p = \infty$ je $f(x) = \max_{i=1}^m |x - y_i|$. Řešením je $x = \frac{1}{2}(\min_{i=1}^m y_i + \max_{i=1}^m y_i)$, tedy bod v polovině mezi krajními body.
- Pro $p = 2$ je $f(x) = \sqrt{\sum_{i=1}^m (x - y_i)^2}$. Řešením je aritmetický průměr, $x = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m y_i$ (viz Příklad 5.4).
- Pro $p = 1$ je $f(x) = \sum_{i=1}^m |x - y_i|$. Řešením je *medián* z čísel y_i (dokažte!). Medián se vypočte tak, že seřadíme čísla y_i podle velikosti a vezmeme prostřední z nich. Pokud je m sudé, máme dva 'prostřední prvky' a v tom případě funkce f nabývá minima v jejich libovolné konvexní kombinaci. Je pak úzus definovat medián jako aritmetický průměr prostředních prvků.

Předpokládejme nyní, že jedno z čísel, např. y_1 , se zvětšuje. V tom případě se řešení x pro různá p budou chovat různě. Např. aritmetický průměr se bude zvětšovat, a to tak, že zvětšováním hodnoty y_1 dosáhneme libovolné hodnoty x . Pro medián to ovšem neplatí – zvětšováním jediného bodu y_1 ovlivníme x jen natolik, nakolik to změní pořadí bodů. Jeho libovolným zvětšováním nedosáhneme libovolné hodnoty x .

Příklad 11.8. Šuplérou změříme průměr ocelové kuličky v několika místech, dostaneme hodnoty $\mathbf{y} = (1.02, 1.04, 0.99, 2.03)$ (cm). Při posledním měření jsme se na stupnici přehlédli, proto je poslední hodnota úplně špatně. Z těchto měření chceme odhadnout skutečný průměr. Máme

$$\frac{1}{2} \left(\min_{i=1}^m y_i + \max_{i=1}^m y_i \right) = 1.51, \quad \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m y_i = 1.27, \quad \text{median}_{i=1}^m y_i = 1.03.$$

Je zjevné, že medián je neovlivněn vychýleným bodem, zatímco ostatní odhady ano. \square

Ve složitějším případě, např. prokládání dat polynomem jako v Příkladu 5.4, se nedá robustnost řešení ve smyslu 1-normy takto jednoduše formálně ukázat a analýza může být mnohem těžší. Ale intuitivně bude situace obdobná: řešení ve smyslu 1-normy bude méně citlivé na vychýlené body než řešení ve smyslu 2-normy.

11.4 Cvičení

11.1. Najděte graficky množinu optimálních řešení úlohy

$$\begin{aligned} \min \quad & c_1 x_1 + c_2 x_2 + c_3 x_3 \\ \text{za podm. } & x_1 + x_2 \geq 1 \\ & x_1 + 2x_2 \leq 3 \\ & x_1 + x_2 \leq 10 \\ & x_1, x_2, x_3 \geq 0 \end{aligned}$$

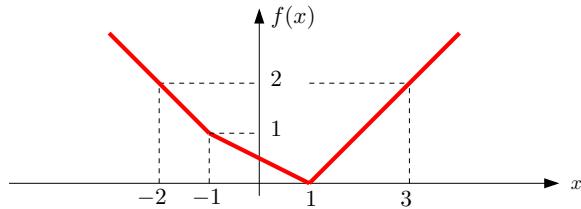
pro následující případy: (a) $\mathbf{c} = (-1, 0, 1)$, (b) $\mathbf{c} = (0, 1, 0)$, (c) $\mathbf{c} = (0, 0, -1)$.

11.2. Vyřešte úvahou tyto jednoduché úlohy LP a napište co nejjednodušší výraz pro optimální hodnotu. Vektor $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^n$ a číslo $k \in \mathbb{N}$, $1 \leq k \leq n$, jsou dány.

- a) $\max\{ \mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{0} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{1} \}$
- b) $\max\{ \mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid -\mathbf{1} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{1} \}$
- c) $\max\{ \mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \geq \mathbf{0}, \mathbf{1}^T \mathbf{x} = 1 \}$
- d) $\max\{ \mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \geq \mathbf{0}, \mathbf{1}^T \mathbf{x} \leq 1 \}$
- e) $\max\{ \mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid -1 \leq \mathbf{1}^T \mathbf{x} \leq 1 \}$
- f) $\max\{ \mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \geq \mathbf{0}, \mathbf{1}^T \mathbf{x} = k \}$
- g) $\max\{ \mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{0} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{1}, \mathbf{1}^T \mathbf{x} = k \}$
- h) $\max\{ \mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{0} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{1}, \mathbf{1}^T \mathbf{x} \leq k \}$
- i) $\max\{ \mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid 0 \leq x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_n \leq 1 \}$
- j) $(\star) \max\{ \mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid -\mathbf{y} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{y}, \mathbf{1}^T \mathbf{y} = k, \mathbf{y} \leq \mathbf{1} \}$

11.3. Pokud to dokážete, převeďte na LP.

- a) $\min\{ |x_1| + |x_2| \mid 2x_1 - x_2 \geq 1, -x_1 + 2x_2 \geq 1 \}$
- b) $\max\{ |x_1 - c_1| + \dots + |x_n - c_n| \mid a_1 x_1 + \dots + a_n x_n \geq b \}$
- c) $\max\{ \mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}, |\mathbf{d}^T \mathbf{x}| \leq 1, \mathbf{x} \geq \mathbf{0} \}$
- d) $\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \sum_{l=1}^L \max_{k=1}^K (\mathbf{c}_{kl}^T \mathbf{x} + d_{kl})$
- e) $\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \sum_{i=1}^m f(\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} - b_i)$, kde funkce f je definována obrázkem



- f) $\min\{ \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_1 \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \|\mathbf{x}\|_\infty \leq 1 \}$
 g) $\min\{ \|\mathbf{x}\|_1 \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{Ax} = \mathbf{b} \}$
 h) $\min\{ \|\mathbf{x}\|_1 \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_\infty \leq 1 \}$
 i) $\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} (\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_1 + \|\mathbf{x}\|_\infty)$
- 11.4. Máme algoritmus (černou skříňku) na řešení LP, kterou můžeme zavolat i vícekrát. S pomocí tohoto algoritmu vyřešte úlohu $\max\{ |\mathbf{c}^T \mathbf{x}| \mid \mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \mathbf{x} \geq \mathbf{0} \}$?
- 11.5. Dokažte nebo vyvrát'te následující rovnosti. Zde $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^n$ a $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ jsou dány, $\|\cdot\|$ je libovolná norma, a optimalizuje se přes proměnné $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$.
- $\max\{ \mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \|\mathbf{x}\| = 1 \} = \max\{ \mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \|\mathbf{x}\| \leq 1 \}$
 - $\min\{ \mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \|\mathbf{x}\| = 1 \} = \min\{ \mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \|\mathbf{x}\| \leq 1 \}$
 - $\max\{ \|\mathbf{Ax}\| \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \|\mathbf{x}\| = 1 \} = \max\{ \|\mathbf{Ax}\| \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \|\mathbf{x}\| \leq 1 \}$

Ná pověda: Inspirujte se úvahou v §11.1.1.

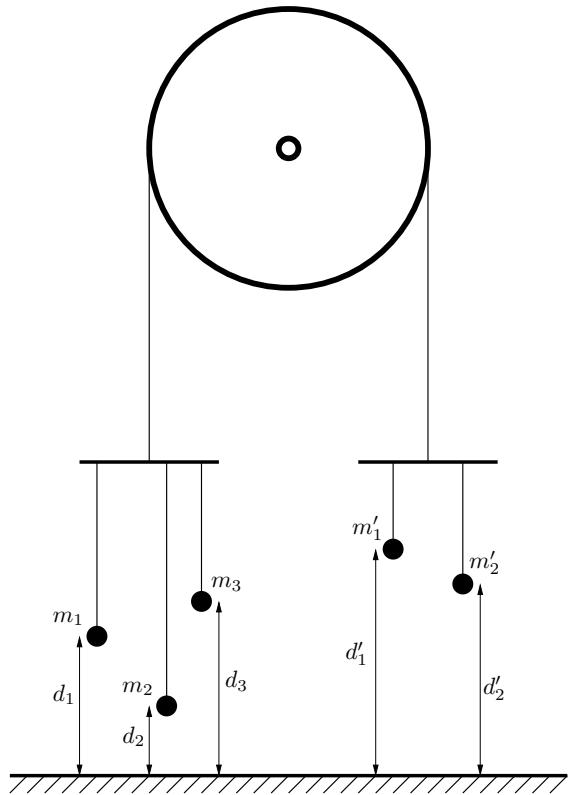
- 11.6. Pochopte kód v Matlabu, který nakreslí graf funkce $f(\mathbf{x}) = \max_{i=1}^k (\mathbf{c}_i^T \mathbf{x} + d_i)$ pro $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$:

```
k = 200; N = 40;
cd = randn(3,k);
x1 = ones(N,1)*linspace(-1,1,N); x2 = linspace(-1,1,N)'*ones(1,N)';
x = [x1(:)'; x2(:)']; x(3,:) = 1;
meshc(x1,x2,reshape(max(cd'*x, [], 1), [N N]));
axis vis3d
```

- 11.7. Hledáme největší hyperkulii $B(\mathbf{a}, r) = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \|\mathbf{x} - \mathbf{a}\|_2 \leq r \}$, která se vejde do polyedru $P = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{Ax} \leq \mathbf{b} \}$. Tedy hledáme maximální r za podmínky $B(\mathbf{a}, r) \subseteq P$, kde optimalizujeme přes proměnné (\mathbf{a}, r) . Vyjádřete jako LP.

- 11.8. Máme kladku s provazem, jehož oba konce končí hákem. Na levém háku visí n závaží na provázcích, přičemž i -té závaží má tihu m_i a jeho výška nad zemí je d_i , pro $i = 1, \dots, n$. Na pravém háku visí n' závaží na provázcích, přičemž i -té závaží má tihu m'_i a jeho výška nad zemí je d'_i , pro $i = 1, \dots, n'$. Výšky d_i a d'_i se měří v poloze, kdy jsou oba háky ve stejné výšce nad zemí. Kladka se pohybuje bez tření, provaz a provázky jsou nekonečně ohebné, provázky a háky mají nulovou hmotnost. Obrázek ukazuje příklad pro $n = 3, n' = 2$.

Soustava má jediný stupeň volnosti daný otáčením kladky. Označme jako x výšku levého háku nad bodem, kdy jsou oba háky ve stejné výšce – tedy pro $x = 0$ jsou oba háky ve stejné výšce a pro $x > 0$ bude levý hák o $2x$ výše než pravý hák. V závislosti na x každé závaží bud' visí nad zemí (pak je jeho potenciální energie rovna m_i krát výška nad zemí) nebo leží na zemi (pak je jeho potenciální energie nulová). Soustava bude v rovnováze při minimální celkové potenciální energii.



- Napište vzorec pro celkovou potenciální energii soustavy jako funkci x .
- Napište lineární program, jehož optimum je rovno minimální potenciální energii soustavy. Není-li to možné, vysvětlete.

- 11.9. Uvažujme Příklad 11.5 takto pozměněný: pán má pomocníka, kterému platí 10 Kč za každý kg vyrobeného zboží (je jedno, zda to jsou lupínky nebo hranolky). Ovšem pokud se toho vyrobí hodně, chce pomocník větší plat, protože musí zůstat přesčas. Tak za každý kg nad 20 kg vyrobeného zboží si nechá připlatit dalších 10 Kč, a za každý kg nad 30 kg vyrobeného zboží si nechá připlatit dalších 20 Kč (tedy za každý kg nad 30 kg vyrobeného zboží dostane $10 + 10 + 20 = 40$ Kč). Kolik má pán vyrobít lupíneků a hranolků, aby měl co největší denní zisk (tj. tržbu z prodeje minus plat pomocníkovi)? Zformulujte jako LP.
- 11.10. Veverka před zimou potřebuje přerovnat zásoby oříšků. Stávající zásoby má v m jamkách, přičemž i -tá jamka má souřadnice $\mathbf{p}_i \in \mathbb{R}^2$ a je v ní a_i oříšků. Potřebuje je přenosit do n nových připravených jamek, přičemž j -tá jamka má souřadnice $\mathbf{q}_j \in \mathbb{R}^2$ a na konci v ní bude y_j oříšků. Veverka unese najednou jen jeden oříšek. Necht' x_{ij} označuje celkový počet oříšků přenesených ze staré jamky i do nové jamky j . Uvažujte dvě úlohy:

- Čísla y_j jsou dána. Hledají se taková čísla x_{ij} , aby se veverka vykonala co nejméně práce, kde práce na přenesení jednoho oříšku je přímo úměrná vzdálenosti (vzdušnou čarou). Běh bez oříšku se za práci nepovažuje.
- Hledají se čísla x_{ij} a y_j tak, aby veverka vykonala co nejméně práce a navíc byly v nových jamkách oříšky rozloženy co nejrovnoměrněji, čímž minimalizuje škodu způsobenou případnou krádeží. Přesněji, aby rozdíl mezi největším a největším z čísel y_j byl menší než dané číslo t .

Formulujte obě úlohy jako LP. Předpokládejte, že počty oršíků jsou nezáporná reálná čísla, ač ve skutečnosti mohou být pouze nezáporná celá čísla.

Návod a řešení

11.2.a) $\max\{ \mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{0} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{1} \} = \sum_{i=1}^n \max\{0, c_i\}$, tedy optimální hodnota je součet kladných čísel c_i .
 Důkaz: Ukažme, že optimum se nabývá pro takové \mathbf{x} , že $x_i = 0$ pro $c_i < 0$ a $x_i = 1$ pro $c_i > 0$ (pro $c_i = 0$ je x_i libovolné). Kdyby to tak totiž nebylo, mohli bychom číslo $\mathbf{c}^T \mathbf{x}$ zvětšit zmenšením nějakého x_i pro $c_i < 0$ nebo zvětšením pro $c_i > 0$. Tedy \mathbf{x} by nebyl optimální argument.

11.2.b) $\sum_{i=1}^n |c_i|$. Dokáže se podobně.

11.2.c) $\max_{i=1}^n c_i$

11.2.d) $\max_{i=1}^n \max\{0, c_i\} = \max\{0, \max_{i=1}^n c_i\}$

11.2.e) Když $c_i = a$ pro každé i (tj. všechna c_i jsou stejná), tak optimální hodnota je $|a|$. Jinak je úloha neomezená.

11.2.i) Návod: substituujte $y_i = x_i - x_{i-1}$

11.3.a) $\min\{z_1 + z_2 \mid x_1, x_2, z_1, z_2 \in \mathbb{R}, 2x_1 - x_2 \geq 1, -x_1 + 2x_2 \geq 1, x_1 \leq z_1, x_2 \leq z_2, -x_1 \leq z_1, -x_2 \leq z_2\}$

11.3.b) Nejde.

11.3.c) $\max\{ \mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \mathbf{d}^T \mathbf{x} \leq 1, -\mathbf{d}^T \mathbf{x} \leq 1, \mathbf{x} \geq \mathbf{0} \}$

11.3.d) $\min\{ \mathbf{1}^T \mathbf{z} \mid \mathbf{c}_{kl}^T \mathbf{x} + d_{kl} \leq z_l (\forall k, l), -\mathbf{c}_{kl}^T \mathbf{x} - d_{kl} \leq z_l (\forall k, l), \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{z} \in \mathbb{R}^L \}$ (analogické §11.1.1)

11.3.f) $\min\{ \mathbf{1}^T \mathbf{z} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{z} \in \mathbb{R}^m, -\mathbf{z} \leq \mathbf{Ax} - \mathbf{b} \leq \mathbf{z}, -\mathbf{1} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{1} \}$

11.3.i) $\min\{ \mathbf{1}^T \mathbf{y} + z \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^m, z \in \mathbb{R}, -\mathbf{z} \leq \mathbf{Ax} - \mathbf{b} \leq \mathbf{z}, -z\mathbf{1} \leq \mathbf{x} \leq z\mathbf{1} \}$

11.4. Postupem uvedeným v §11.1 nedokážeme převést na jedinou úlohu LP. Ale lze vyřešit vypočtením dvou úloh LP: optimální hodnota je $\max\{A, -B\}$, kde $A = \max\{ \mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \mathbf{x} \geq \mathbf{0} \}$ a $B = \max\{ -\mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \mathbf{x} \geq \mathbf{0} \}$.

11.8.a) $E(x) = \sum_{i=1}^n m_i \max(d_i + x, 0) + \sum_{i=1}^{n'} m'_i \max(d'_i - x, 0)$

11.8.b) $\min\{ \sum_{i=1}^n m_i z_i + \sum_{i=1}^{n'} m'_i z'_i \mid x, z_i, z'_i \in \mathbb{R}, z_i \geq d_i + x, z'_i \geq d'_i - x, z_i \geq 0, z'_i \geq 0 \}$

11.9. Stejná úloha jako v Příkladu 11.5, jen účelová funkce se změní na $120l + 76h - f(l + h)$ kde $f(t) = \max\{10t, 200 + 20(t - 20), 400 + 40(t - 30)\}$. To převedeme na LP

$$\begin{aligned} \max \quad & 120l + 76h - z \\ \text{za podmínek} \quad & 10l + 10h - z \leq 0 \\ & 20l + 20h - z \leq 200 \\ & 40l + 40h - z \leq 800 \\ & 2l + 1.5h \leq 100 \\ & 0.4l + 0.2h \leq 16 \\ & l, h \geq 0 \end{aligned}$$

Kapitola 12

Konvexní množiny a polyedry

Definice 12.1. Množina $X \subseteq \mathbb{R}^n$ se nazývá **konvexní**, jestliže

$$\mathbf{x} \in X, \mathbf{y} \in X, 0 \leq \alpha \leq 1 \implies \alpha\mathbf{x} + (1 - \alpha)\mathbf{y} \in X. \quad (12.1)$$

Množina $\{\alpha\mathbf{x} + (1 - \alpha)\mathbf{y} \mid 0 \leq \alpha \leq 1\}$ je úsečka spojující body \mathbf{x} a \mathbf{y} (viz Příklad 3.6). Definice tedy říká, že množina je konvexní, jestliže s každými dvěma body obsahuje i úsečku, která je spojuje. Obrázek ukazuje příklad konvexní a nekonvexní množiny v \mathbb{R}^2 :



Konvexní množinu lze definovat i abstraktněji. **Konvexní kombinace** vektorů $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k$ je jejich lineární kombinace $\alpha_1\mathbf{x}_1 + \dots + \alpha_k\mathbf{x}_k$ taková, že $\alpha_1 + \dots + \alpha_k = 1$ a $\alpha_1, \dots, \alpha_k \geq 0$. Množina je konvexní právě tehdy, když je uzavřená vůči konvexním kombinacím (neboli každá konvexní kombinace vektorů z množiny leží v množině). Lze dokázat indukcí, že tato definice je ekvivalentní Definici 12.1. Všimněte si, že $\alpha\mathbf{x} + (1 - \alpha)\mathbf{y}$ pro $0 \leq \alpha \leq 1$ je konvexní kombinací dvou vektorů \mathbf{x}, \mathbf{y} , neboť $\alpha + (1 - \alpha) = 1$, $\alpha \geq 0$, $1 - \alpha \geq 0$.

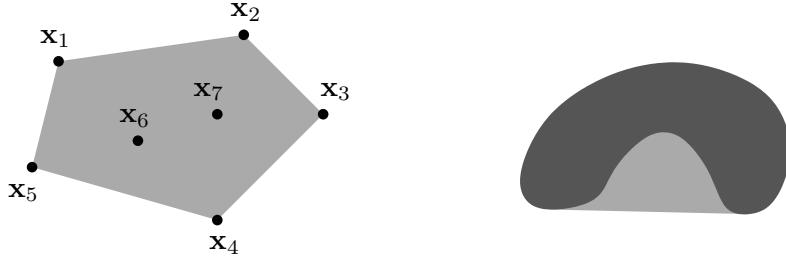
Konvexní obal vektorů $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k$ je množina všech jejich konvexních kombinací. Tuto k -tici vektorů můžeme vnímat jako množinu $X = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k\}$, konvexní obal pak značíme

$$\text{conv } X = \text{conv}\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k\} = \{\alpha_1\mathbf{x}_1 + \dots + \alpha_k\mathbf{x}_k \mid \alpha_1 + \dots + \alpha_k = 1, \alpha_1, \dots, \alpha_k \geq 0\}. \quad (12.2)$$

Jak se definuje konvexní obal množiny s *nekonečným* počtem prvků, např. pravém obrázku výše? Nelze použít definice (12.2), neboť není jasné, co znamená součet $\alpha_1\mathbf{x}_1 + \dots + \alpha_k\mathbf{x}_k$ pro nekonečný počet vektorů (množina X může být i nespočetná). Konvexní obal libovolné (konečné či nekonečné) množiny $X \subseteq \mathbb{R}^n$ se definuje jako průnik všech konvexních množin, které množinu obsahují, tedy

$$\text{conv } X = \bigcap \{Y \subseteq \mathbb{R}^n \mid Y \supseteq X, Y \text{ konvexní}\}.$$

Obrázek ukazuje konvexní obal konečné (vlevo) a nekonečné (vpravo) množiny pro $n = 2$:



12.1 Čtyři kombinace a čtyři obaly

Konvexní kombinace je lineární kombinace, jejíž koeficienty splňují omezení $\alpha_1 + \dots + \alpha_k = 1$ a $\alpha_1, \dots, \alpha_k \geq 0$. Všimněte si, že když vynecháme druhé omezení, dostaneme afinní kombinaci (viz §3.3). Podle toho, které ze dvou omezení vyžadujeme, dostaneme čtyři druhy kombinací. Udělejme si v nich nyní pořádek.

Vážený součet $\alpha_1 \mathbf{x}_1 + \dots + \alpha_k \mathbf{x}_k$ vektorů $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$ se nazývá jejich

lineární kombinace, jestliže $\alpha_1, \dots, \alpha_k \in \mathbb{R}$.

affinní kombinace, jestliže $\alpha_1, \dots, \alpha_k \in \mathbb{R}$, $\alpha_1 + \dots + \alpha_k = 1$.

nezáporná kombinace, jestliže $\alpha_1, \dots, \alpha_k \in \mathbb{R}$, $\alpha_1, \dots, \alpha_k \geq 0$.

konvexní kombinace, jestliže $\alpha_1, \dots, \alpha_k \in \mathbb{R}$, $\alpha_1 + \dots + \alpha_k = 1$, $\alpha_1, \dots, \alpha_k \geq 0$.

Množina, která je uzavřená vůči

lineárním kombinacím, se nazývá **lineární podprostor**.

affinním kombinacím, se nazývá **affinní podprostor**.

nezáporným kombinacím, se nazývá **konvexní kužel**.

konvexním kombinacím, se nazývá **konvexní množina**.

K tomu, co již znáte, přibyl pojem nezáporné kombinace a konvexního kuželu.

Lineární [affinní, nezáporný, konvexní] **obal** vektorů $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k$ je množina všech jejich lineárních [affinních, nezáporných, konvexních] kombinací. Obecněji, lineární [affinní, nezáporný, konvexní] obal množiny $X \subseteq \mathbb{R}^n$ je průnik všech lineárních podprostorů [affinních podprostorů, konvexních kuželů, konvexních množin] obsahující množinu X .

Příklad 12.1. Mějme tři body v \mathbb{R}^3 , které neleží v jedné rovině s počátkem. Jejich lineární obal je celé \mathbb{R}^3 . Jejich affinní obal je rovina jimi procházející. Jejich nezáporný obal je nekonečný trojboký hranol, jehož vrchol je v počátku a jehož hrany jsou tři polopřímky určené počátkem a danými body. Jejich konvexní obal je trojúhelník jimi určený. \square

Jako cvičení si nakreslete lineární, affinní, nezáporný a konvexní obal náhodně zvolených k vektorů v \mathbb{R}^n pro všechn devět případů $k, n \in \{1, 2, 3\}$.

12.2 Operace zachovávající konvexitu množin

Jaké operace s konvexními množinami mají za výsledek opět konvexní množinu? Zdaleka nejdůležitější taková operace je průnik. Následující větu je snadné dokázat.

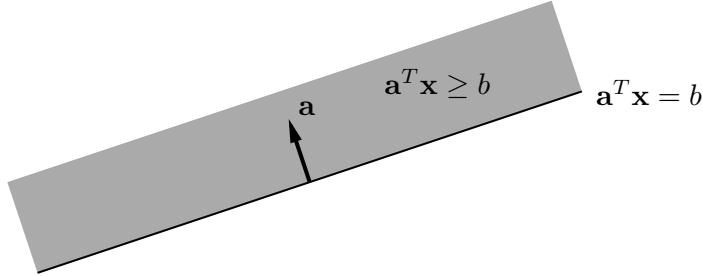
Věta 12.1. *Průnik (konečně či nekonečně mnoha) konvexních množin je konvexní množina.*

Důkaz. Uděláme jen pro dvě množiny, zobecnění na libovolná počet množin je očividné. Nechť $X, Y \subseteq \mathbb{R}^n$ jsou konvexní. Nechť $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in X \cap Y$, tedy každý z bodů \mathbf{x}, \mathbf{y} je současně v množině X i v množině Y . Proto pro $0 \leq \alpha \leq 1$ bude bod $\alpha\mathbf{x} + (1 - \alpha)\mathbf{y}$ také v množině X i Y , tedy bude v množině $X \cap Y$. \square

Sjednocení konvexních množin ale *nemusí* být konvexní množina.

12.3 Konvexní polyedry

Poloprostor je množina $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{a}^T \mathbf{x} \geq b \}$ pro nějaké $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$, $b \in \mathbb{R}$. Jeho hranice je nadrovina $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{a}^T \mathbf{x} = b \}$. Vektor $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$ je normála této nadroviny. Obrázek znázorňuje tyto pojmy pro $n = 2$:

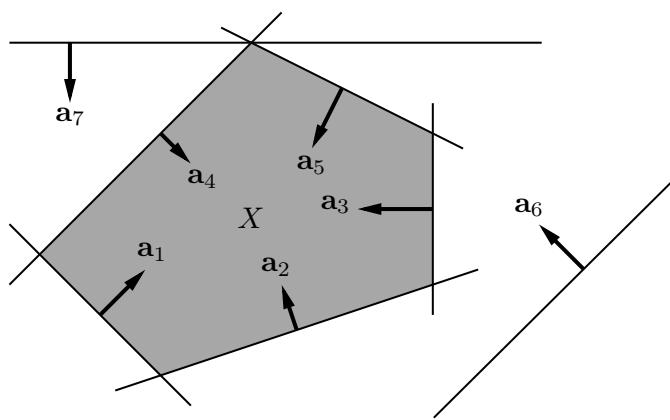


Definice 12.2. Konvexní polyedr je průnik konečně mnoha poloprostorů.

Konvexní polyedr je tedy množina

$$X = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{a}_i^T \mathbf{x} \geq b_i, i = 1, \dots, m \} = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{A}\mathbf{x} \geq \mathbf{b} \}, \quad (12.3)$$

kde $\mathbf{a}_1^T, \dots, \mathbf{a}_m^T$ jsou řádky matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ a $b_1, \dots, b_m \in \mathbb{R}$ jsou složky vektoru $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$. Všimněte si, že definice dovoluje i omezení typu rovnosti $\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} = b_i$, protože to je ekvivalentní $\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} \leq b_i$, $\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} \geq b_i$. Obrázek ukazuje příklad pro $n = 2$, $m = 7$:



Všimněte si, že omezení 6 a 7 jsou redundantní – jejich odebráním by se polyedr nezměnil.

Jelikož poloprostor je očividně konvexní množina, plyne konvexitu konvexního polyedru z Věty 12.1. Všimněte si, že konvexní polyedr nemusí být omezený.

Příklad 12.2. Množina X z Příkladu 11.1 je konvexní polyedr. \square

Příklad 12.3. Příklady konvexních polyedrů v \mathbb{R}^n :

- prázdná množina \emptyset
- celý prostor \mathbb{R}^n
- každý affinní podprostor (např. bod, přímka, rovina, nadrovina)
- polopřímka $\{ \mathbf{x} + \alpha \mathbf{v} \mid \alpha \geq 0 \}$
- poloprostor
- panel $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid b_1 \leq \mathbf{a}^T \mathbf{x} \leq b_2 \}$
- hyperkrychle $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \|\mathbf{x}\|_\infty \leq 1 \} = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid -1 \leq x_i \leq 1, i = 1, \dots, n \}$
- simplex, to jest konvexní obal $n+1$ affinně nezávislých bodů
- standardní simplex $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid x_i \geq 0, \sum_{i=1}^n x_i \leq 1 \}$
- pravděpodobnostní simplex $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid x_i \geq 0, \sum_{i=1}^n x_i = 1 \}$ (množina všech rozdělení pravděpodobnosti diskrétní náhodné proměnné)
- zobecněný osmistěn $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \|\mathbf{x}\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i| \leq 1 \}$. □

Příklad 12.4. Koule v \mathbb{R}^n je průnikem nekonečně mnoha poloprostorů $\mathbf{a}^T \mathbf{x} \leq 1$ pro všechna $\|\mathbf{a}\|_2 = 1$. Je to konvexní množina, ale není to konvexní polyedr (protože počet poloprostorů není konečný). □

12.3.1 Stěny konvexního polyedru

Definice 12.3. Stěna konvexního polyedru $X \subseteq \mathbb{R}^n$ je množina

$$F = \operatorname{argmin}_{\mathbf{x} \in X} \mathbf{c}^T \mathbf{x}$$

pro nějaké $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^n$.

Tak v Příkladu 11.1 je množina F na prvním i druhém obrázku stěna polyhedru X .

Dimenze stěny je dimenze jejího affinního obalu (zopakujte si pojem affinního obalu z §12.1 a dimenze affinního podprostoru z §3.3). Stěny některých dimenzí mají jméno:

- stěna dimenze 0 se nazývá **vrchol**,
- stěna dimenze 1 se nazývá **hrana**,
- stěna dimenze $n-1$ se nazývá **faseta** (angl. *facet*, zatímco *face* znamená stěnu).

Z Definice 12.3 a Věty 12.1 plyne, že každá stěna konvexního polyedru je sama o sobě konvexní polyedr.

Bez důkazu uvedeme ekvivalentní definici stěny, která předpokládá, že polyedr je ve tvaru (12.3).

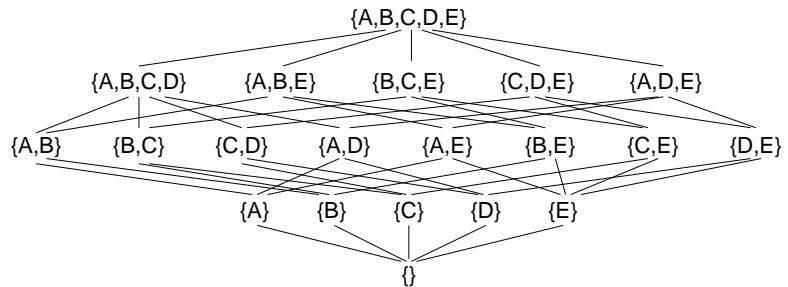
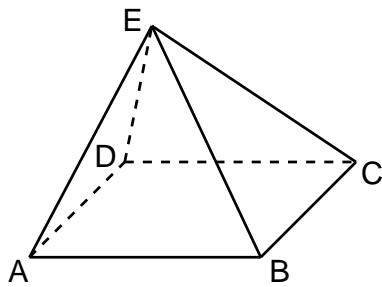
Věta 12.2. $F \subseteq X$ je stěna konvexního polyedru (12.3) právě tehdy, když

$$F = \{ \mathbf{x} \in X \mid \mathbf{a}_i^T \mathbf{x} = b_i, i \in I \} \tag{12.4}$$

pro nějakou podmnožinu indexů $I \subseteq \{1, \dots, m\}$.

Stěny konvexního polyedru tvoří množinu částečně uspořádanou množinovou inkluzí, tzv. *stěnový svaz*. Stěnový svaz popisuje 'kombinatorickou strukturu' polyedru.

Příklad 12.5. Necht' polyedr (12.3) je pyramida v \mathbb{R}^3 , na levém obrázku:



Tento polyedr je průnikem pěti poloprostorů (předpokládáme, že žádné omezení není redundantní), tedy $m = 5$ a $n = 3$. Necht' omezení $\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} \geq b_i$ pro $i = 1, 2, 3, 4, 5$ je poloprostor, jehož hranicí je polorovina určená po řadě body ABCD, ABE, BCE, CDE, ADE. Pro $I = \{1\}$ je množina (12.4) faceta ABCD. Pro $I = \{1, 2\}$ je množina (12.4) hrana AB. Pro $I = \{1, 2, 3\}$ je množina (12.4) vrchol B.

Obrázek vpravo je diagram¹ znázorňující stěnový svaz. V d -tém řádku diagramu jsou vypsány všechny stěny dimenze d (počítáno zdola). Stěna A dimenze d je spojena se stěnou B dimenze $d - 1$ jestliže $B \subseteq A$. \square

12.3.2 Jak byste vypsal všechny vrcholy konvexního polyedru?

Z Věty 12.2 plyne (po troše přemýšlení), že následující dvě tvrzení jsou ekvivalentní:

- Bod $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ je vrchol polyedru (12.3).
- Existuje množina $I \subseteq \{1, \dots, m\}$ tak, že soustava $\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} = b_i$, $i \in I$, má právě jedno řešení \mathbf{x} a toto řešení navíc patří do polyedru (12.3), tj. splňuje nerovnice $\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} \geq b_i$, i, \dots, m .

Toto nám dovoluje formulovat algoritmus, který vypíše všechny vrcholy polyedru (12.3). Najdeme všechny množiny $I \subseteq \{1, \dots, m\}$ takové, že soustava $\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} = b_i$, $i \in I$ má právě jedno řešení a toto řešení navíc splňuje soustavu $\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} \geq b_i$, i, \dots, m . Každé takové řešení je vrchol.

12.3.3 Dvě reprezentace konvexního polyedru

Následující věta je hluboká a uvádíme ji bez důkazu. Pro neomezené konvexní polyedry platí podobná věta, trochu složitější, kterou neuvádíme.

Věta 12.3. Konvexní obal konečně mnoha bodů je omezený konvexní polyedr. Obráceně, omezený konvexní polyedr je konvexním obalem svých vrcholů.

Máme tedy dvě reprezentace omezeného polyedru:

- **H-reprezentace:** průnik konečně mnoha poloprostorů ('H' jako *half-space*)
- **V-reprezentace:** konvexní obal konečně mnoha bodů ('V' jako *vertex*)

Přechod od jedné reprezentace ke druhé může být výpočetně těžký či prakticky nemožný. Důvodem je to, že polyedr definovaný jako průnik malého počtu poloprostorů může mít velký počet vrcholů (přesně: je-li m počet poloprostorů, tak počet vrcholů nebude omezen žádnou polynomiální funkcí proměnné m). Naopak, polyedr s malým počtem vrcholů může mít velký počet facet. V tom případě by algoritmus, který převádí *H*-reprezentaci na *V*-reprezentaci

¹Přesněji, je to *Hasseho diagram* částečně usporádané množiny, který máte znát.

nebo naopak, musel vydat velmi dlouhý výstup. V algoritmu v §12.3.2 se to projevuje tím, že musíme projít všechny podmnožiny množiny $\{1, \dots, m\}$, kterých je 2^m .

Příklad 12.6. Uvažujme následující konvexní polyedry v \mathbb{R}^n (viz Příklad 12.3):

- Simplex má $n + 1$ vrcholů a $n + 1$ facet.
- Hyperkrychle má $2n$ facet a 2^n vrcholů.
- Zobecněný osmistěn má $2n$ vrcholů a 2^n facet. □

12.4 Cvičení

12.1. Odpovězte, zda následující množiny jsou konvexní a odpověď dokažte z definice konvexní množiny:

- a) interval $[a, b] \subseteq \mathbb{R}$, kde $a \leq b$
- b) $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{Ax} \leq \mathbf{b}, \mathbf{Cx} = \mathbf{d} \}$
- c) $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{x}^T \mathbf{Ax} \leq 1 \}$, kde \mathbf{A} je pozitivně semidefinitní
- d) \mathbb{Z} (množina celých čísel)
- e) $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \max\{x_1, \dots, x_n\} \geq 0 \}$

12.2. Které z následujících množin jsou konvexní? Nemusíte dokazovat z definice, stačí uvést přesvědčivý argument. Množinu si nakreslete pro případ $n = 1$ a $n = 2$.

- a) $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \sum_{i=1}^n x_i = 1 \}$
- b) $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \sum_{i=1}^n x_i \geq 1 \}$
- c) $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{x} \geq \mathbf{0}, \sum_{i=1}^n x_i = 1 \}$
- d) $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{x} \geq \mathbf{0}, \sum_{i=1}^n x_i \leq 1 \}$
- e) $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \|\mathbf{x}\|_2 = 1 \}$
- f) $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \|\mathbf{x}\|_2 < 1 \}$
- g) $\{ (x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid x \geq 0, y \geq 0, xy = 1 \}$
- h) $\{ (x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid x^2 + y^2 \leq 2 \} \cap \{ (x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid (x - 1)^2 + y^2 \leq 2 \}$

12.3. Bude Věta 12.1 platit, pokud v ní sousloví ‘konvexní množina’ nahradíme souslovím ‘lineární podprostor’ (příp. ‘afinní podprostor’, ‘konvexní kužel’)? Kladnou i zápornou odpověď dokažte.

12.4. Které z následujících množin jsou konvexní polyedry? Pokud je množina konvexní polyedr, dokážete ji vyjádřit ve tvaru $\{ \mathbf{x} \mid \mathbf{Ax} \geq \mathbf{b} \}$ (tj. jako průnik poloprostorů)?

- a) $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{x} \geq \mathbf{0}, \sum_i x_i a_i = b, \sum_i x_i a_i^2 = c \}$, kde a_i, b, c jsou dané skaláry
- b) $\{ \mathbf{Cx} \mid \mathbf{x} \geq \mathbf{0}, \mathbf{1}^T \mathbf{x} = 1 \}$, kde matice \mathbf{C} je dána
- c) $\{ \mathbf{Cx} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \|\mathbf{x}\|_2 \leq 1 \}$, kde matice \mathbf{C} je dána
- d) $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \|\mathbf{x} - \mathbf{a}\|_2 \leq \|\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2 \}$, kde \mathbf{a}, \mathbf{b} jsou dány

12.5. Mějme konvexní polyedr ve tvaru $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{Ax} \geq \mathbf{b} \}$.

- a) Napište kód v Matlabu, který vypíše vrcholy polyedru pomocí postupu v §12.3.2.

b) Vypište vrcholy polyedru pro

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -1 & -2 \\ 3 & -1 \\ -1 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} -14 \\ 0 \\ -2 \\ 4 \end{bmatrix}.$$

12.6. Mějme vektory $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m \in \mathbb{R}^n$. Pro každé $i = 1, \dots, m$ definujeme množinu

$$X_i = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \|\mathbf{x} - \mathbf{a}_i\|_2 \leq \|\mathbf{x} - \mathbf{a}_j\|_2, j \neq i \}.$$

Ukažte, že množiny X_1, \dots, X_m jsou konvexní polyedry. Ukažte, že tyto množiny tvoří rozklad (zopakujte si, co je to rozklad množiny) množiny \mathbb{R}^n . Sjednocení hranic těchto množin se nazývá *Voronoiův diagram*. Nakreslete si ho pro $n = 2$ a $m = 4$ pro různé konfigurace bodů $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_4$.

Návod a řešení

- 12.1.a) Konvexní, protože pro libovolné $\alpha \in [0, 1]$ je $\alpha a + (1 - \alpha)b \in [a, b]$.
- 12.1.b) Konvexní.
- 12.1.c) Konvexní.
- 12.1.d) Nekonvexní. Např. pro $x = 1, y = 2, \alpha = \frac{1}{2}$ číslo $\alpha x + (1 - \alpha)y = 1.5$ není celé.
- 12.1.e) Nekonvexní.
- 12.2.a) nadrovina, konvexní
- 12.2.b) poloprostor, konvexní
- 12.2.c) průnik poloprostorů a nadroviny, konvexní polyedr
- 12.2.d) průnik poloprostorů, konvexní
- 12.2.e) sféra, není konvexní
- 12.2.f) koule bez hranice, konvexní
- 12.2.g) graf jedné větve hyperboly, není konvexní
- 12.2.h) průnik dvou koulí, konvexní

- 12.5.b) Zde jsou vrcholy a odpovídající množiny $I \subseteq \{1, \dots, 4\}$:
- | I | $\{1, 2\}$ | $\{1, 3\}$ | $\{2, 4\}$ | $\{3, 4\}$ |
|--------------|------------|------------|-------------------------------|------------|
| \mathbf{x} | (2, 6) | (6, 4) | $(\frac{4}{5}, \frac{12}{5})$ | (2, 0) |

Kapitola 13

Simplexová metoda

Zde popíšeme algoritmus na řešení úloh lineárního programování zvaný **simplexová metoda**.

Zapomeňme prozatím na účelovou funkci a zkoumejme množinu přípustných řešení LP ve tvaru

$$X = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \mathbf{x} \geq \mathbf{0} \}, \quad (13.1)$$

kde $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ je široká ($m < n$) matice s hodností m , tedy její řádky jsou lineárně nezávislé.

Soustava $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ má nekonečně mnoho řešení. Položíme-li však $n - m$ složek vektoru \mathbf{x} rovno nule (tedy učiníme-li $n - m$ z podmínek $\mathbf{x} \geq \mathbf{0}$ aktivních), soustava má nejvýše jedno řešení. Tato úvaha vede k následujícím definicím:

- Množina $J \subseteq \{1, 2, \dots, n\}$ se nazývá **báze** úlohy, pokud $|J| = m$ a sloupce matice \mathbf{A} s indexy J jsou lineárně nezávislé. Tedy sloupce J tvoří regulární matici $m \times m$.
- Vektor \mathbf{x} je **bázové řešení** příslušné bázi J , pokud $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ a $x_j = 0$ pro $j \notin J$.
- Bázové řešení \mathbf{x} je **přípustné**, pokud $\mathbf{x} \geq \mathbf{0}$.
- Bázové řešení \mathbf{x} je **degenerované**, pokud má méně než m nenulových složek.
- Dvě báze jsou **sousední**, pokud mají $m - 1$ společných prvků.

Protože matice \mathbf{A} má hodnost m , existuje aspoň jedna báze a každé bázi přísluší právě jedno bázové řešení. Bázové řešení však může příslušet více než jedné bázi, což se stane právě tehdy, když je toto bázové řešení degenerované.

Příklad 13.1. Necht' je soustava $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ dána tabulkou (blokovou maticí)

$$[\mathbf{A} \quad \mathbf{b}] = \left[\begin{array}{cccccc|c} -1 & 1 & 3 & 1 & 0 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 4 & 0 & 1 & 4 & 4 \\ -1 & 0 & 4 & 1 & 1 & 4 & 2 \end{array} \right]. \quad (13.2)$$

- $J = \{2, 3, 5\}$ není báze, protože sloupce 2, 3, 5 matice \mathbf{A} jsou lineárně závislé.
- $J = \{1, 4, 5\}$ je báze, protože tyto sloupce jsou lineárně nezávislé. Bázové řešení $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_6)$ příslušné bázi J se najde řešením soustavy

$$\left[\begin{array}{ccc|c} -1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} x_1 \\ x_4 \\ x_5 \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} 1 \\ 4 \\ 2 \end{array} \right] \quad (13.3)$$

a položením $x_2 = x_3 = x_6 = 0$. Soustava (13.3) má právě jedno řešení, neboť její matice je regulární. Dostaneme $\mathbf{x} = (3, 0, 0, 4, 1, 0)$. Toto bázové řešení je přípustné. Není degenerované, protože má $m = 3$ nenulových složek.

- $J = \{1, 2, 4\}$ je báze. Bázové řešení je $\mathbf{x} = (4, -1, 0, 6, 0, 0)$. Je nepřípustné, protože $x_2 < 0$.
- $J = \{3, 4, 5\}$ je báze. Bázové řešení $\mathbf{x} = (0, 0, 1, -2, 0, 0)$ je degenerované, protože má méně než $m = 3$ nenulových složek.
- Stejně bázové řešení $\mathbf{x} = (0, 0, 1, -2, 0, 0)$ dostaneme volbou báze $J = \{3, 4, 6\}$. Vidíme, že degenerované bázové řešení odpovídá více než jedné bázi.
- Báze $\{1, 4, 5\}$ a $\{2, 4, 5\}$ jsou sousední, protože mají společné dva prvky $\{4, 5\}$. Báze $\{1, 4, 5\}$ a $\{2, 4, 6\}$ nejsou sousední. \square

Polyedr (13.1) je speciální tvar polyedru (12.3). Dle Definice 12.3 se všechna minima lineární funkce na konvexním polyedru (13.1) nabývají na nějaké stěně tohoto polyedru. Pokud tato stěna obsahuje alespoň jeden vrchol polyedru (to nebude platit jen pro velmi jednoduché polyedry (13.1), zamyslete se nad tím!), pak se alespoň jedno minimum nabývá i v tomto vrcholu.

Z Věty 12.2 plyne, že přípustná bázová řešení jsou vrcholy polyedru (13.1). Dále lze ukázat (důkaz vynecháme), že dvojice sousedních bází odpovídají bud' jedinému (degenerovanému) vrcholu nebo dvojici vrcholů spojených hranou.

To nám dovoluje navrhnout naivní algoritmus na řešení LP: uděláme výčet všech přípustných bázových řešení a nalezneme to s nejlepší hodnotou účelové funkce. Tento algoritmus není praktický, protože bázových řešení je exponenciálně mnoho. Simplexová metoda je vylepšení tohoto přístupu: přechází mezi sousedními bázemi tak, že bázová řešení jsou stále přípustná (tedy přechází po hranách polyedru) a účelová funkce se zlepšuje (nebo aspoň nezhorší).

13.1 Stavební kameny algoritmu

Zde vysvětlíme jednotlivé stavební kameny simplexové metody, které nakonec v §13.2 spojíme v celý algoritmus.

13.1.1 Přechod k sousední standardní bázi

Simplexová metoda pracuje pouze se *standardními* bázemi, tj. sloupce J jsou (permutované) vektory standardní báze. To má výhodu v tom, že (i) nemusíme kontrolovat, zda jsou sloupce J lineárně nezávislé a (ii) nenulové složky bázového řešení \mathbf{x} jsou rovny přímo složkám vektoru \mathbf{b} . Na počátku algoritmu se předpokládá, že matice \mathbf{A} obsahuje standardní bázi.

Z lineární algebry známe *ekvivalentní rádkové úpravy* soustavy $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$: libovolný řádek tabulky $[\mathbf{A} \quad \mathbf{b}]$ můžeme vynásobit nenulovým číslem a můžeme k němu přičíst lineární kombinaci ostatních rádků. Tyto úpravy nemění množinu řešení soustavy.

Ukážeme, jak přejít od aktuální standardní báze J k sousední standardní bázi, tedy nějaký sloupec $j' \in J$ bázi opustí a nějaký sloupec $j \notin J$ do báze vstoupí. Necht' i je řádek, ve kterém je $a_{ij'} = 1$. Prvek (i, j) matice se nazývá **pivot** (angl. znamená *čep*). Necht' $a_{ij} \neq 0$. Chceme nastavit pivot a_{ij} na jedničku, vynulovat prvky nad i pod pivotem, a nezměnit přitom sloupce $J \setminus \{j'\}$. Toho se dosáhne těmito ekvivalentními rádkovými úpravami:

1. Vyděl řádek i číslem a_{ij} .
2. Pro každé $i' \neq i$ odečti $a_{i'j}$ -násobek řádku i od řádku i' .

Říkáme, že jsme provedli *ekvivalentní úpravu kolem pivotu* s indexy (i, j) .

Příklad 13.2. Mějme soustavu

$$[\mathbf{A} \quad \mathbf{b}] = \left[\begin{array}{cccccc|c} 0 & 2 & 6 & 1 & 0 & 4 & 4 \\ 1 & \boxed{1} & 3 & 0 & 0 & 2 & 3 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 1 & 2 & 1 \end{array} \right] \quad (13.4)$$

se (standardní) bází $J = \{1, 4, 5\}$. Vidíme ihned odpovídající bázové řešení, $\mathbf{x} = (3, 0, 0, 4, 1, 0)$.

Chceme nahradit bázový sloupec $j' = 1$ nebázovým sloupcem $j = 2$, tedy přejít k sousední bázi $\{2, 4, 5\}$. Máme $i = 2$, tedy pivot je prvek a_{22} (v tabulce orámován). Ekvivalentními řádkovými úpravami musíme docílit, aby pivot byl roven jedné a prvky nad ním a pod ním byly nulové. Při tom smíme změnit sloupec 1, ale sloupce 4 a 5 se změnit nesmějí. Toho se docílí vydělením řádku 2 číslem a_{22} (což zde nemá žádný efekt, protože náhodou $a_{22} = 1$) a pak přičtením vhodných násobků řádku 2 k ostatním řádkům. Výsledek:

$$[\mathbf{A} \quad \mathbf{b}] = \left[\begin{array}{cccccc|c} -2 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -2 \\ 1 & 1 & 3 & 0 & 0 & 2 & 3 \\ 1 & 0 & 4 & 0 & 1 & 4 & 4 \end{array} \right].$$

Nyní sloupce $\{2, 4, 5\}$ tvoří standardní bázi. \square

13.1.2 Kdy je sousední bázové řešení přípustné?

Uvedeným způsobem můžeme od aktuální báze přejít k libovolné sousední bázi. Přitom nové bázové řešení může nebo nemusí být přípustné. Je-li aktuální bázové řešení přípustné, jak poznáme, zda i nové bázové řešení bude přípustné?

Protože nenulové složky bázového řešení \mathbf{x} jsou rovny složkám vektoru \mathbf{b} , bázové řešení je přípustné právě tehdy, když $\mathbf{b} \geq \mathbf{0}$. Necht' v aktuální tabulce je $\mathbf{b} \geq \mathbf{0}$. Proved'me ekvivalentní úpravu kolem pivotu (i, j) . Hledáme podmínky na (i, j) , za kterých bude i po úpravě $\mathbf{b} \geq \mathbf{0}$.

Po ekvivalentní úpravě kolem pivotu (i, j) se vektor \mathbf{b} změní takto (viz §13.1.1):

- b_i se změní na b_i/a_{ij} ,
- pro každé $i' \neq i$ se $b_{i'}$ změní na $b_{i'} - a_{i'j}b_i/a_{ij}$.

Tato čísla musejí být nezáporná. To nastane právě tehdy, když platí následující podmínky:

$$a_{ij} > 0, \quad (13.5a)$$

$$\text{pro každé } i' \neq i \text{ platí } a_{i'j} \leq 0 \text{ nebo } \frac{b_i}{a_{ij}} \leq \frac{b_{i'}}{a_{i'j}}, \quad (13.5b)$$

kde 'nebo' je užito v nevylučovacím smyslu. Podmínka (13.5a) je zřejmá. Podmínka (13.5b) je ekvivalentní podmínce $b_{i'} - a_{i'j}b_i/a_{ij} \geq 0$, neboť $a_{ij} > 0$, $b_i \geq 0$, $b_{i'} \geq 0$ (rozmyslete!).

Příklad 13.3. Uvažujme opět tabulkou (13.4).

- Ekvivalentní úprava okolo pivotu $(i, j) = (3, 2)$ nepovede k přípustnému bázovému řešení, neboť $a_{ij} = -1 < 0$, což porušuje podmínu (13.5a).
- Ekvivalentní úprava okolo pivotu $(i, j) = (2, 2)$ nepovede k přípustnému bázovému řešení, neboť pro $i' = 1$ je $a_{i'j} > 0$ a $\frac{3}{1} > \frac{4}{2}$, tedy podmínka (13.5b) je porušena.
- Ekvivalentní úprava okolo pivotu $(i, j) = (3, 6)$ povede k přípustnému bázovému řešení. Podmínky (13.5) jsou splněny, neboť $a_{ij} = 2 > 0$ a $\frac{1}{2} \leq \frac{4}{4}$, $\frac{1}{2} \leq \frac{3}{2}$. \square

13.1.3 Co když je celý sloupec nekladný?

Jestliže jsou všechny prvky v nějakém nebázovém sloupci j nekladné, víme z podmínky (13.5a), že tento sloupec se nemůže stát bázovým. Platí ale navíc, že souřadnice x_j bodu \mathbf{x} se může libovolně zvětšovat a bod \mathbf{x} přesto zůstane v polyedru X . Tedy existuje polopřímka s počátkem v \mathbf{x} ležící celá v polyedru X . Tedy polyedr X je neomezený.

Příklad 13.4. Necht' $[\mathbf{A} \quad \mathbf{b}]$ je tabulka

$$\begin{array}{ccccccc|c} & 0 & -2 & 6 & 1 & 0 & 4 & 4 \\ & 1 & -1 & 3 & 0 & 0 & 2 & 3 \\ & 0 & -1 & 1 & 0 & 1 & 2 & 1 \\ \hline \mathbf{x} = & 3 & 0 & 0 & 4 & 1 & 0 & \end{array}$$

s bází $\{1, 4, 5\}$. Pod tabulkou je napsáno bázové řešení \mathbf{x} . Když se x_2 bude libovolně zvětšovat, změnu lze kompenzovat současným zvětšováním bázových proměnných x_1, x_4, x_5 tak, že vektor \mathbf{Ax} zůstane nezměněn a tedy roven \mathbf{b} . Konkrétně, vektor pro každé $\alpha \geq 0$ bude vektor $\mathbf{x} = (3, 0, 0, 4, 1, 0) + \alpha(1, 1, 0, 2, 1, 0)$ splňovat $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ a $\mathbf{x} \geq \mathbf{0}$. \square

13.1.4 Ekvivalentní úpravy účelového řádku

Dosud jsme prováděli ekvivalentní řádkové úpravy pouze na soustavě $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ a účelové funkce si nevšímali. Tyto úpravy lze rozšířit na celou úlohu LP včetně účelové funkce. Nebudeme účelovou funkci uvažovat ve tvaru $\mathbf{c}^T \mathbf{x}$, ale v mírně obecnějším tvaru $\mathbf{c}^T \mathbf{x} - d$. Tedy řešíme LP

$$\min\{\mathbf{c}^T \mathbf{x} - d \mid \mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \mathbf{x} \geq \mathbf{0}\}. \quad (13.6)$$

Úlohu budeme reprezentovat **simplexovou tabulkou**

$$\begin{bmatrix} \mathbf{c}^T & d \\ \mathbf{A} & \mathbf{b} \end{bmatrix}. \quad (13.7)$$

Přiříme k účelovému řádku $[\mathbf{c}^T \quad d]$ libovolnou lineární kombinaci $\mathbf{y}^T [\mathbf{A} \quad \mathbf{b}]$ ostatních řádků $[\mathbf{A} \quad \mathbf{b}]$, kde \mathbf{y} jsou koeficienty lineární kombinace. Ukážeme, že tato úprava zachová hodnotu účelové funkce $\mathbf{c}^T \mathbf{x} - d$ pro každé \mathbf{x} splňující $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$. Nový účelový řádek bude

$$[\mathbf{c}^T \quad d] + \mathbf{y}^T [\mathbf{A} \quad \mathbf{b}] = [\mathbf{c}^T + \mathbf{y}^T \mathbf{A} \quad d + \mathbf{y}^T \mathbf{b}].$$

Nová účelová funkce bude tedy

$$(\mathbf{c}^T + \mathbf{y}^T \mathbf{A}) \mathbf{x} - (d + \mathbf{y}^T \mathbf{b}) = \mathbf{c}^T \mathbf{x} - d + \mathbf{y}^T (\mathbf{Ax} - \mathbf{b}).$$

Ale to je rovno $\mathbf{c}^T \mathbf{x} - d$ pro každé \mathbf{x} splňující $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$.

13.1.5 Co udělá přechod k sousední bázi s účelovou funkcí?

Necht' J je standardní báze. Přiříme k účelovému řádku takovou lineární kombinaci ostatních řádků, aby pro všechna $j \in J$ bylo $c_j = 0$ (novému vektoru \mathbf{c} se pak říká *redukované ceny*). Protože bázové řešení \mathbf{x} je v nebázových sloupcích nulové, znamená to $\mathbf{c}^T \mathbf{x} = 0$. Tedy hodnota účelové funkce $\mathbf{c}^T \mathbf{x} - d$ v bázovém řešení \mathbf{x} je rovna jednoduše $-d$.

Navíc je snadno vidět, co udělá přechod k nové bázi s účelovou funkcí. Necht' j' je sloupec opouštějící bázi a j je sloupec vstupující do báze. Při přechodu k nové bázi se číslo $x_{j'}$ stane nulovým a číslo x_j se zvětší z nuly na kladné (nebo se nezmění). Protože $c_{j'} = 0$, číslo $\mathbf{c}^T \mathbf{x} - d$ při $c_j \geq 0$ stoupne (nebo se nezmění) a při $c_j \leq 0$ klesne (nebo se nezmění).

Příklad 13.5. Mějme úlohu se simplexovou tabulkou

$$\begin{bmatrix} \mathbf{c}^T & d \\ \mathbf{A} & \mathbf{b} \end{bmatrix} = \left[\begin{array}{cccccc|c} 1 & -2 & -3 & -1 & 2 & 1 & 4 \\ 0 & 2 & 6 & 1 & 0 & 4 & 4 \\ 1 & 1 & 3 & 0 & 0 & 2 & 3 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 1 & 2 & 1 \end{array} \right],$$

kde $J = \{1, 4, 5\}$. Složky vektoru \mathbf{c} v bázových sloupcích vynuluje tak, že k účelovému řádku přičteme první řádek, odečteme druhý řádek, a odečteme dvojnásobek třetího řádku:

$$\begin{array}{cccccc|c} 0 & 1 & -2 & 0 & 0 & -1 & 3 \\ \hline 0 & 2 & 6 & 1 & 0 & 4 & 4 \\ 1 & 1 & 3 & 0 & 0 & 2 & 3 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 1 & 2 & 1 \\ \hline \mathbf{x} = & 3 & 0 & 0 & 4 & 1 & 0 \end{array}$$

Pod tabulkou jsme napsali bázové řešení \mathbf{x} . Nyní je $\mathbf{c}^T \mathbf{x} = 0$, a tedy hodnota účelové funkce v bázovém řešení je $\mathbf{c}^T \mathbf{x} - d = -d = -3$.

Dejme tomu, že chceme přidat do báze nebázový sloupec 2 a vyloučit z ní některý z bázových sloupců $\{1, 4, 5\}$. Po tomto přechodu se x_2 stane kladné nebo zůstane nulové a jedna ze složek x_1, x_4, x_5 se vynuluje. Protože $c_1 = c_4 = c_5 = 0$, změna x_1, x_4, x_5 se na účelové funkci neprojeví a ta se změní o $c_2 x_2$. Kritérium tedy stoupne nebo zůstane stejné, protože $c_2 = 1 > 0$. \square

Pokud v některém sloupci j je $c_j \leq 0$ a $a_{ij} \leq 0$ pro všechna i , pak můžeme proměnnou x_j libovolně zvětšovat (viz §13.1.3) a účelovou funkci libovolně zmenšovat. Úloha je tedy neomezená.

13.2 Základní algoritmus

Spojením popsaných stavebních kamenů dostaneme iteraci simplexového algoritmu na řešení úlohy (13.6). Iterace přejde k sousední standardní bázi takové, že bázové řešení zůstane přípustné a účelová funkce se zmenší nebo alespoň nezmění. Vstupem i výstupem iterace je simplexová tabulka (13.7) s těmito vlastnostmi:

- podmnožina sloupců \mathbf{A} tvoří standardní bázi J ,
- bázové řešení odpovídající této bázi je přípustné, $\mathbf{b} \geq \mathbf{0}$,
- složky vektoru \mathbf{c} v bázových sloupcích jsou nulové, $c_j = 0$ pro $j \in J$.

Iterace se provede v těchto krocích:

1. Vyber index j pivotu tak, aby $c_j < 0$ (§13.1.5).
2. Vyber index i pivotu podle podmínek (13.5). Z těchto podmínek plyne (promyslete!)

$$i \in \operatorname{argmin}_{i' \mid a_{i'j} > 0} \frac{b_{i'}}{a_{i'j}}, \quad (13.8)$$

kde $\operatorname{argmin}_{i' \mid a_{i'j} > 0}$ označuje, že se minimalizuje přes všechna i' splňující $a_{i'j} > 0$.

3. Udělej ekvivalentní úpravu okolo pivotu (i, j) (§13.1.1).
4. Udělej ekvivalentní úpravu účelového řádku, která vynuluje c_j v novém bázovém sloupci j (§13.1.5).

Algoritmus, který opakuje uvedenou iteraci, nazveme **základní simplexový algoritmus**. Algoritmus končí, když už nelze iteraci provést. To nastane z jednoho z těchto důvodů:

- Všechny koeficienty c_j jsou nezáporné. Účelovou funkci nelze zlepšit a jsme v optimu.
- V některém sloupci j je $c_j < 0$ a $a_{ij} \leq 0$ pro všechna i . Úloha je neomezená.

Výběr indexů (i, j) pivotu v krocích 1 a 2 nemusí být jednoznačný, tedy může být více sloupců j s vhodným znaménkem c_j a více řádků i může splňovat podmínky (13.5) (tedy může být více argumentů minima v podmínce (13.8)). Algoritmus, který vybírá jediný pivot z těchto možností, se nazývá **pivotové pravidlo**.

Zřídka se algoritmus může dostat do stavu, kdy cyklicky prochází stále stejnou množinu bází, které odpovídají jedinému degenerovanému bázovému řešení a tedy účelová funkce se nemění. Tomuto problému **cyklení** se dá zabránit použitím vhodného pivotového pravidla (nejznámější je *Blandovo anticyklící pravidlo*), které ale popisovat nebudeme.

Příklad 13.6. Vyřešte lineární program (13.6) simplexovou metodou, když výchozí simplexová tabulka (13.7) je

$$\begin{array}{ccccccc|c} 0 & -2 & 1 & 0 & 0 & -3 & 0 \\ \hline 0 & 2 & 6 & 1 & 0 & 4 & 4 \\ 1 & 1 & 3 & 0 & 0 & 2 & 3 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 1 & 2 & 1 \end{array}.$$

Báze je $J = \{1, 4, 5\}$ a bázové řešení $\mathbf{x} = (3, 0, 0, 4, 1, 0)$.

Účelový řádek budeme nazývat nultý, ostatní pak první, druhý atd. První iterace simplexového algoritmu se provede v těchto krocích:

1. Vybereme sloupec j , který vstoupí do báze. To může být libovolný sloupec, který má v nultém řádku záporné číslo. Je rozumné vzít nejmenší takové číslo, zde -3 , tedy $j = 6$.
2. Vybereme řádek i pivotu dle (13.8) nalezením argumentu minima z čísel $\frac{4}{-3}, \frac{3}{-1}, \frac{1}{-2}$. Bude tedy $i = 3$. Výsledný pivot je označen rámečkem. Všimněte si, že řádek $i = 3$ má v aktuální bázi jedničku ve sloupci 5, sloupec 5 tedy bázi opustí.
- 3, 4. Uděláme ekvivalentní úpravu okolo pivotu (i, j) a zároveň vynulujeme číslo c_j . Neboli chceme, aby se z pivotu a_{ij} stala jednička a nad i pod pivotem byly nuly, a to včetně nultého řádku. Tedy nejprve třetí řádek vydělíme dvěma a potom k nultému řádku přičteme trojnásobek třetího řádku, od prvního řádku odečteme čtyřnásobek třetího řádku, a od druhého řádku odečteme dvojnásobek třetího řádku. Všimněte si: k žádnému řádku nikdy nepřičítáme násobky jiného řádku než pivotového. Výsledek:

$$\begin{array}{ccccccc|c} 0 & -3.5 & 2.5 & 0 & 1.5 & 0 & 1.5 \\ \hline 0 & 4 & 4 & 1 & -2 & 0 & 2 \\ 1 & 2 & 2 & 0 & -1 & 0 & 2 \\ 0 & -0.5 & 0.5 & 0 & 0.5 & 1 & 0.5 \end{array}$$

Na konci první iterace máme bázi $J = \{1, 4, 6\}$, bázové řešení $\mathbf{x} = (2, 0, 0, 2, 0, 0.5)$, a hodnotu účelové funkce $-d = -1.5$.

Druhá iterace: pivot je ve sloupci $j = 2$. Jeho řádek najdeme dle (13.8) porovnáním čísel $\frac{2}{4}, \frac{2}{2}$, tedy $i = 1$. Výsledek druhé iterace:

$$\begin{array}{ccccccc|c} 0 & 0 & 6 & 0.875 & -0.25 & 0 & 3.25 \\ \hline 0 & 1 & 1 & 0.25 & -0.5 & 0 & 0.5 \\ 1 & 0 & 0 & -0.5 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0.125 & 0.25 & 1 & 0.75 \end{array}$$

Výsledek třetí iterace:

$$\begin{array}{cccccc|c} 0 & 0 & 7 & 1 & 0 & 1 & 4 \\ \hline 0 & 1 & 3 & 0.5 & 0 & 2 & 2 \\ 1 & 0 & 0 & -0.5 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 4 & 0.5 & 1 & 4 & 3 \end{array}$$

Protože všechna čísla v účelovém řádku jsou nezáporná, algoritmus končí. Úloha má optimální řešení s hodnotou -4 v bodě $(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6) = (1, 2, 0, 0, 3, 0)$. \square

Příklad 13.7. Necht' simplexová tabulka (13.7) je

$$\begin{array}{ccccc|c} -2 & 6 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline -1 & -1 & -1 & 1 & 0 & 2 \\ 2 & -1 & -2 & 0 & 1 & 1 \end{array}$$

Tabulka po první iteraci je

$$\begin{array}{ccccc|c} 0 & 5 & -1 & 0 & 1 & 1 \\ \hline 0 & -1.5 & -2 & 1 & 0.5 & 2.5 \\ 1 & -0.5 & -1 & 0 & 0.5 & 0.5 \end{array}$$

Podle nultého řádku by další pivot měl být ve třetím sloupci. Ale čísla a_{i3} jsou všechna záporná (viz §13.1.3). Tedy úloha je neomezená. V nové tabulce je vidět, že můžeme zvětšovat x_3 libovolně a kompenzovat to vhodným nárůstem x_1 a x_4 . Jelikož $c_1 = c_4 = 0$, změny x_1 a x_4 se na účelové funkci neprojeví a jediný vliv na ní bude mít x_3 , které ho bude libovolně zmenšovat. \square

13.3 Inicializace algoritmu

Na začátku základního simplexového algoritmu musí být úloha zadána ve tvaru

$$\min\{\mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}, \mathbf{x} \geq \mathbf{0}\}, \quad (13.9)$$

kde matice \mathbf{A} obsahuje standardní bázi a $\mathbf{b} \geq \mathbf{0}$. Ukážeme, jak lze obecnou úlohu LP převést na tento tvar.

Někdy je převod snadný. Pokud má úloha tvar $\min\{\mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{A}\mathbf{x} \leq \mathbf{b}, \mathbf{x} \geq \mathbf{0}\}$ a platí $\mathbf{b} \geq \mathbf{0}$, přidáním slacků úlohu převedeme na $\min\{\mathbf{c}^T \mathbf{u} \mid \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{u} = \mathbf{b}, \mathbf{x} \geq \mathbf{0}, \mathbf{u} \geq \mathbf{0}\}$. Tato úloha simplexovou tabulkou

$$\begin{bmatrix} \mathbf{c}^T & \mathbf{0} & 0 \\ \mathbf{A} & \mathbf{I} & \mathbf{b} \end{bmatrix},$$

ve které sloupce příslušné proměnným \mathbf{u} tvoří standardní bázi.

Příklad 13.8. Vyřešte simplexovým algoritmem:

$$\begin{array}{ll} \min & -3x_1 - x_2 - 3x_3 \\ \text{za podmínek} & \begin{array}{l} 2x_1 + x_2 + x_3 \leq 2 \\ x_1 + 2x_2 + 3x_3 \leq 5 \\ 2x_1 + 2x_2 + x_3 \leq 6 \\ x_1, x_2, x_3 \geq 0 \end{array} \end{array}$$

Přidáme slackové proměnné $u_1, u_2, u_3 \geq 0$, abychom omezení uvedli do tvaru rovností:

$$\begin{array}{ll} \min & -3x_1 - x_2 - 3x_3 \\ \text{za podmínek} & \begin{array}{lll} 2x_1 + x_2 + x_3 + u_1 & = 2 \\ x_1 + 2x_2 + 3x_3 + u_2 & = 5 \\ 2x_1 + 2x_2 + x_3 + u_3 & = 6 \\ x_1, x_2, x_3, u_1, u_2, u_3 \geq 0 & \end{array} \end{array}$$

Zde je výchozí simplexová tabulka:

-3	-1	-3	0	0	0	0
2	1	1	1	0	0	2
1	2	3	0	1	0	5
2	2	1	0	0	1	6

□

13.3.1 Dvoufázová simplexová metoda

Pokud je úloha zadána v obecném tvaru, operacemi z §11.1 ji lze vždy převést do tvaru (13.9). Vynásobením vhodných řádků záporným číslem vždy zajistíme $\mathbf{b} \geq \mathbf{0}$, matice \mathbf{A} ale nemusí obsahovat standardní bázi. Máme dokonce vážnější problém: není vůbec jasné, zda úloha (13.9) je přípustná. V tomto případě nejdříve vyřešíme pomocnou úlohu LP, která najde nějaké (ne nutně optimální) přípustné řešení. Z něj pak získáme standardní bázi. Pomocná úloha je

$$\min\{\mathbf{1}^T \mathbf{u} \mid \mathbf{Ax} + \mathbf{u} = \mathbf{b}, \mathbf{x} \geq \mathbf{0}, \mathbf{u} \geq \mathbf{0}\} \quad (13.10)$$

a má simplexovou tabulkou

$$\left[\begin{array}{ccc} \mathbf{0} & \mathbf{1}^T & 0 \\ \mathbf{A} & \mathbf{I} & \mathbf{b} \end{array} \right].$$

Pro libovolné $\mathbf{u} \geq \mathbf{0}$ je $\mathbf{1}^T \mathbf{u} \geq 0$, přičemž $\mathbf{1}^T \mathbf{u} = 0$ právě tehdy, když $\mathbf{u} = \mathbf{0}$. Tedy úloha (13.9) je přípustná právě tehdy, je-li optimální hodnota úlohy (13.10) rovna 0. Na počátku tvoří sloupce příslušné proměnným \mathbf{u} standardní bázi, lze tedy na ní pustit základní simplexový algoritmus. Ten může skončit dvěma způsoby:

- Pokud je optimum větší než 0, pak úloha (13.9) je nepřípustná.
- Pokud je optimum rovno 0, pak úloha (13.9) je přípustná. Pokud není optimální řešení (\mathbf{x}, \mathbf{u}) úlohy (13.10) degenerované, po skončení simplexového algoritmu jsou všechny bázové proměnné kladné. Protože $\mathbf{u} = \mathbf{0}$, proměnné \mathbf{u} budou tedy nebázové. Proto mezi sloupci příslušnými proměnným \mathbf{x} bude existovat standardní báze.

Pokud je optimální řešení (\mathbf{x}, \mathbf{u}) úlohy (13.10) degenerované, některé proměnné \mathbf{u} mohou být na konci algoritmu bázové. Pak je nutno udělat dodatečné úpravy kolem pivotů ve sloupcích příslušných bázovým proměnným \mathbf{u} , abychom tyto sloupce dostali z báze ven.

Nalezení nějakého přípustného řešení v pomocné úloze (13.10) se nazývá **první fáze** a řešení původní úlohy pak **druhá fáze** algoritmu, mluvíme tedy o **dvoufázové simplexové metodě**.

Příklad 13.9. Řešte

$$\begin{array}{ll} \min & -20x_1 - 30x_2 - 40x_3 \\ \text{za podmínek} & 3x_1 + 2x_2 + x_3 = 10 \\ & x_1 + 2x_2 + 2x_3 = 15 \\ & x_1, x_2, x_3 \geq 0 \end{array}$$

Máme sice $\mathbf{b} \geq \mathbf{0}$, ale není jasné, zda existuje přípustné \mathbf{x} , tím méně není vidět standardní báze. Provedeme první fázi algoritmu. Pomocná úloha bude

$$\begin{array}{ll} \min & u_1 + u_2 \\ \text{za podmínek} & 3x_1 + 2x_2 + x_3 + u_1 = 10 \\ & x_1 + 2x_2 + 2x_3 + u_2 = 15 \\ & x_1, x_2, x_3, u_1, u_2 \geq 0 \end{array}$$

s tabulkou

0	0	0	1	1	0
3	2	1	1	0	10
1	2	2	0	1	15

Sloupce nad přidanými proměnnými tvoří standardní bázi, můžeme tedy na pomocnou úlohu pustit základní simplexový algoritmus. Po vynulování ceny nad bázovými proměnnými budou kroky algoritmu vypadat takto:

-4	-4	-3	0	0	-25
3	2	1	1	0	10
1	2	2	0	1	15

2	0	-1	2	0	-5
1.5	1	0.5	0.5	0	5
-2	0	1	-1	1	5

0	0	0	1	1	0
2.5	1	0	1	-0.5	2.5
-2	0	1	-1	1	5

Optimum je rovno 0, tedy původní úloha je přípustná. Proměnné u_1, u_2 jsou nebázové a tedy rovny nule, bázové proměnné jsou x_2, x_3 . Ted' tedy můžeme začít druhou fázi (řešení původní úlohy) s počáteční tabulkou

-20	-30	-40	0	
2.5	1	0	2.5	
-2	0	1	5	

□

13.4 Cvičení

13.1. Najděte všechny báze a bázová řešení polyedru $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \mathbf{x} \geq \mathbf{0} \}$ pro

$$[\mathbf{A} \quad \mathbf{b}] = \left[\begin{array}{cccc|c} 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 2 & -1 & 4 & 1 & 4 \end{array} \right].$$

Která z nich jsou přípustná? Která z nich jsou degenerovaná?

13.2. V tabulce zakroužkujte všechny pivoty takové, že ekvivalentní úprava kolem nich povede k přípustnému bázovému řešení:

$$[\mathbf{A} \quad \mathbf{b}] = \left[\begin{array}{ccccccc|c} 0 & 2 & 6 & 1 & 0 & -4 & 3 & 0 & 4 \\ 1 & 1 & -3 & 0 & 0 & 2 & 3 & 0 & 3 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 1 & -2 & -3 & 0 & 1 \\ 0 & -2 & 2 & 0 & 0 & 2 & -1 & 1 & 1 \end{array} \right]$$

13.3. Zapište lineární program

$$\begin{aligned} \min \quad & -x_1 & - & x_4 - 3x_5 \\ \text{za podmínek} \quad & 2x_1 & + & x_4 + x_5 + x_6 = 2 \\ & -x_1 + x_2 & + & 2x_4 + 3x_5 & = 4 \\ & 2x_1 & + & x_3 + 2x_4 - x_5 & = 6 \\ & & & x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6 & \geq 0 \end{aligned}$$

do simplexové tabulky. Předpokládejte, že aktuální báze je $\{2, 3, 6\}$. Jaké je aktuální bázové řešení? Je toto bázové řešení přípustné. Je degenerované? Pokud je to možné, udělejte jeden krok simplexového algoritmu. Pokud to možné není, vysvětlete proč.

13.4. Vyřešte simplexovou metodou:

$$\begin{aligned} \max \quad & 2x_1 - x_2 - 3x_3 \\ \text{za podmínek} \quad & -2x_1 - x_2 + x_3 \leq 2 \\ & -x_1 + 2x_2 - 3x_3 \leq 5 \\ & -2x_1 - 4x_2 + x_3 \leq 6 \\ & x_1, x_2, x_3 \geq 0 \end{aligned}$$

13.5. Vyřešte simplexovou metodou (navzdory tomu, že lze řešit úvahou):

$$\begin{aligned} \max \quad & 6x_1 + 9x_2 + 5x_3 + 9x_4 \\ \text{za podmínek} \quad & x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1 \\ & x_1, x_2, x_3, x_4 \geq 0 \end{aligned}$$

13.6. Necht' úloha (13.6) má více než jedno optimální řešení. Jak se to pozná v simplexové tabulce? Navrhněte algoritmus, jehož výstupem bude výčet všech optimálních bázových řešení.

13.7. Mějme lineární program

$$\begin{array}{ll} \min & 2x_1 - 3x_3 + x_4 \\ \text{za podmínek} & \begin{array}{l} x_1 - x_2 - x_3 \geq 0 \\ -x_1 + 2x_2 - 3x_3 \leq 5 \\ 2x_1 - x_2 - x_3 + 2x_4 = 6 \\ x_1, x_2, x_3, x_4 \geq 0 \end{array} \end{array}$$

Inicializujte co nejjednodušším způsobem základní simplexový algoritmus. Vyřešte tímto algoritmem. Nepoužívejte dvoufázovou metodu.

13.8. Upravte do vhodného tvaru a vyřešte dvoufázovou simplexovou metodou:

$$\begin{array}{ll} \max & 3x_1 - 4x_2 \\ \text{za podmínek} & \begin{array}{l} -2x_1 - 5x_2 \leq 10 \\ 3x_1 + x_2 \leq 3 \\ -2x_1 + x_2 \leq -2 \\ x_1 \geq 0 \\ x_2 \leq -1 \end{array} \end{array}$$

Návod a řešení

	J	$\{1, 2\}$	$\{1, 3\}$	$\{1, 4\}$	$\{2, 3\}$	$\{3, 4\}$	
13.1.	\mathbf{x}	(1, -1)	(0, 1)	(1, 2)	(0, 1)	(1, 0)	
	příp.	ne	ano	ano	ano	ano	
	degen.	ne	ano	ne	ano	ano	

13.4. Úloha je neomezená kvůli prvnímu sloupci.

13.7. Např. otočíme znaménko prvního omezení, třetí omezení vydělíme dvěma, přidáme slackové proměnné pro první a druhé omezení. Pak vynulujeme ceny nad bázovými sloupcí. Iterace algoritmu:

$$\left[\begin{array}{cccccc|c} 1 & 0.5 & -2.5 & 0 & 0 & 0 & -3 \\ -1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -3 & 0 & 0 & 1 & 5 \\ 1 & -0.5 & -0.5 & 1 & 0 & 0 & 3 \end{array} \right] \quad \left[\begin{array}{cccccc|c} -1.5 & 3 & 0 & 0 & 2.5 & 0 & -3 \\ -1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -4 & 5 & 0 & 0 & 3 & 1 & 5 \\ 0.5 & 0 & 0 & 1 & 0.5 & 0 & 3 \end{array} \right] \quad \left[\begin{array}{cccccc|c} 0 & 3 & 0 & 3 & 4 & 0 & 6 \\ 0 & 1 & 1 & 2 & 2 & 0 & 6 \\ 0 & 5 & 0 & 8 & 7 & 1 & 29 \\ 1 & 0 & 0 & 2 & 1 & 0 & 6 \end{array} \right]$$

Výsledek: $(x_1, x_2, x_3, x_4) = (6, 0, 6, 0)$, hodnota optima -6 .

13.8. Optimum je $(x_1, x_2) = (25, -36)/13$.

Kapitola 14

Konvexní funkce

Definice 14.1. Funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ je **konvexní** na konvexní množině $X \subseteq \mathbb{R}^n$, jestliže

$$\mathbf{x} \in X, \mathbf{y} \in X, 0 \leq \alpha \leq 1 \implies f(\alpha\mathbf{x} + (1 - \alpha)\mathbf{y}) \leq \alpha f(\mathbf{x}) + (1 - \alpha)f(\mathbf{y}). \quad (14.1)$$

Funkce f je **konkávní** na množině X , jestliže je funkce $-f$ konvexní na množině X .

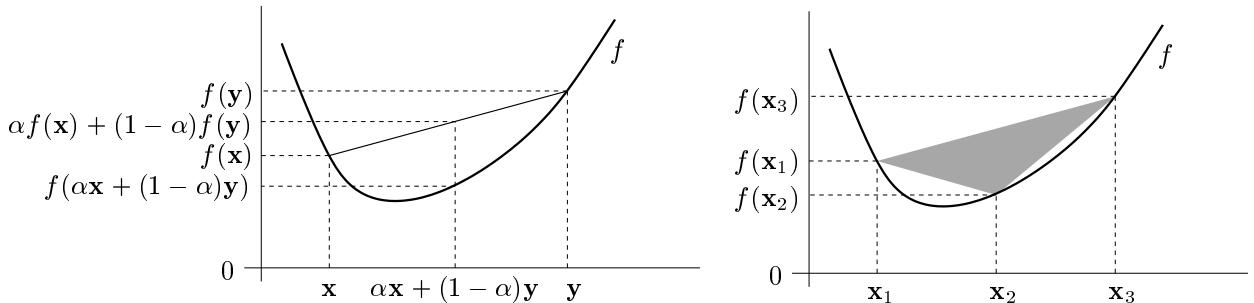
Rozlišujte pojem *konvexní množina* a *konvexní funkce*, jde o různé věci. Dále si všimněte, že X musí být konvexní množina – pojem konvexní funkce na nekonvexní množině není definován. Pokud X je celý definiční obor funkce f , odkaz na X můžeme vynechat a říkáme pouze, že funkce f je konvexní.

Podmínu (14.1) lze zobecnit pro více než dva body: funkce f je konvexní právě tehdy, když

$$\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k \in X, \alpha_1, \dots, \alpha_k \geq 0, \alpha_1 + \dots + \alpha_k = 1 \implies f(\alpha_1\mathbf{x}_1 + \dots + \alpha_k\mathbf{x}_k) \leq \alpha_1 f(\mathbf{x}_1) + \dots + \alpha_k f(\mathbf{x}_k). \quad (14.2)$$

Podmínka (14.2) (známá jako **Jensenova nerovnost**) zjevně implikuje (14.1) a indukcí lze dokázat, že to platí i naopak. Porovnejte s definicí lineárního zobrazení (3.3)!

Geometrický význam podmíny (14.1) je ten, že úsečka spojující body $(\mathbf{x}, f(\mathbf{x}))$ a $(\mathbf{y}, f(\mathbf{y}))$ leží nad grafem funkce (viz levý obrázek). Geometrický význam podmíny (14.2) je ten, že konvexní polyedr vybarvený šedě (viz pravý obrázek) leží nad grafem funkce. Podrobně rozmyslete, jak tyto geometrické interpretace odpovídají výrazům (14.1) a (14.2)!



Příklad 14.1. Dokažme z Definice 14.1, že funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ definovaná jako $f(\mathbf{x}) = \max_{i=1}^n x_i$

je konvexní. Máme dokázat, že pro každé \mathbf{x}, \mathbf{y} a $0 \leq \alpha \leq 1$ platí

$$f(\alpha\mathbf{x} + (1 - \alpha)\mathbf{y}) = \max_i (\alpha x_i + (1 - \alpha)y_i) \quad (14.3a)$$

$$\leq \max_i \alpha x_i + \max_i (1 - \alpha)y_i \quad (14.3b)$$

$$= \alpha \max_i x_i + (1 - \alpha) \max_i y_i \quad (14.3c)$$

$$= \alpha f(\mathbf{x}) + (1 - \alpha)f(\mathbf{y}) \quad (14.3d)$$

kde rovnost (14.3c) plyne z nezápornosti čísel α a $1 - \alpha$.

Nerovnost (14.3b) plyne z toho, že pro každé $a_1, \dots, a_n, b_1, \dots, b_n \in \mathbb{R}$ platí

$$\max_i (a_i + b_i) \leq \max_i a_i + \max_i b_i. \quad (14.4)$$

Nerovnost (14.4) dokážeme například takto. Necht' i^*, j^*, k^* jsou indexy, ve kterých se nabývají maxima, tedy $a_{i^*} + b_{i^*} = \max_i (a_i + b_i)$, $a_{j^*} = \max_i a_i$, $b_{k^*} = \max_i b_i$. Proto $a_{i^*} \leq a_{j^*}$ a $b_{i^*} \leq b_{k^*}$. Tedy $\max_i (a_i + b_i) = a_{i^*} + b_{i^*} \leq a_{j^*} + b_{k^*} = \max_i a_i + \max_i b_i$. \square

Příklad 14.2. Dokažme z Definice 14.1, že funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ definovaná jako $f(\mathbf{x}) = \min_{i=1}^n x_i$ není konvexní. Např. volba $n = 2$, $\mathbf{x} = (0, 2)$, $\mathbf{y} = (2, 0)$, $\alpha = \frac{1}{2}$ nesplňuje (14.1), neboť

$$f((\mathbf{x} + \mathbf{y})/2) = f(1, 1) = 1 > (f(\mathbf{x}) + f(\mathbf{y}))/2 = (0 + 0)/2 = 0. \quad \square$$

Použitím Jensenovy nerovnosti na vhodnou konvexní funkci lze získat mnoho užitečných nerovností.

Příklad 14.3. Funkce \log je konkávní na \mathbb{R}_{++} . Napišme pro tuto funkci Jensenovu nerovnost (14.2) (jelikož funkce je konkávní a ne konvexní, musíme v Jensenově nerovnosti obrátit znaménko nerovnosti), ve které položíme $\alpha_1 = \dots = \alpha_n = \frac{1}{n}$:

$$\log \frac{x_1 + \dots + x_n}{n} \geq \frac{\log x_1 + \dots + \log x_n}{n}$$

kde x_1, \dots, x_n jsou kladné. Vezmeme-li exponenciálu každé strany, dostaneme

$$\frac{x_1 + \dots + x_n}{n} \geq (x_1 \cdots x_n)^{1/n}.$$

Tato známá nerovnost říká, že aritmetický průměr není menší než geometrický. \square

Příklad 14.4. Uved'me často potkávané jednoduché konvexní či konkávní funkce:

1. Exponenciála $f(x) = e^{ax}$ je konvexní na \mathbb{R} , pro libovolné $a \in \mathbb{R}$.
2. Mocnina $f(x) = x^a$ je na \mathbb{R}_{++} konvexní pro $a \geq 1$ nebo $a \leq 0$ a konkávní pro $0 \leq a \leq 1$.
3. Mocnina absolutní hodnoty $f(x) = |x|^a$ je pro $a \geq 1$ konvexní na \mathbb{R} (speciálně: absolutní hodnota $|x|$ je konkávní).
4. Logaritmus $f(x) = \log x$ je konkávní na \mathbb{R}_{++} .
5. Záporná entropie $f(x) = x \log x$ je konvexní na \mathbb{R}_{++} (nebo i na \mathbb{R}_+ , pokud dodefinujeme $0 \log 0 = 0$, což se často dělá, protože $\lim_{x \rightarrow 0^+} x \log x = 0$).
6. Afinní funkce $f(\mathbf{x}) = \mathbf{a}^T \mathbf{x} + b$ je zároveň konvexní i konkávní.

7. Kvadratická forma $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$ je konvexní pro \mathbf{A} pozitivně semidefinitní, konkávní pro \mathbf{A} negativně semidefinitní, a nekonvexní a nekonkávní pro \mathbf{A} indefinitní (viz Příklad 14.5).
8. Maximum složek $f(\mathbf{x}) = \max_{i=1}^n x_i = \max\{x_1, \dots, x_n\}$ je konvexní na \mathbb{R}^n .
9. Log-sum-exp funkce $f(\mathbf{x}) = \log(e^{x_1} + \dots + e^{x_n})$ je konvexní. Tato funkce se někdy nazývá *měkké maximum*, neboť funkce

$$f_t(\mathbf{x}) = f(t\mathbf{x})/t = \log(e^{tx_1} + \dots + e^{tx_n})/t$$

se pro $t \rightarrow +\infty$ blíží funkci $\max_{i=1}^n x_i$ (dokažte výpočtem limity!).

10. Geometrický průměr $f(\mathbf{x}) = (x_1 \cdots x_n)^{1/n}$ je konkávní na \mathbb{R}_+^n .
11. Každá norma (viz Definice 11.1) je konvexní funkce, neboť pro každé $0 \leq \alpha \leq 1$ máme

$$\|\alpha \mathbf{x} + (1 - \alpha) \mathbf{y}\| \leq \|\alpha \mathbf{x}\| + \|(1 - \alpha) \mathbf{y}\| = \alpha \|\mathbf{x}\| + (1 - \alpha) \|\mathbf{y}\|,$$

kde nerovnost plyne z trojúhelníkové nerovnosti a rovnost z homogenity.

Nakreslete či představte si vrstevnice a grafy těchto funkcí (v případě více proměnných pro $n = 1$ a $n = 2$)! \square

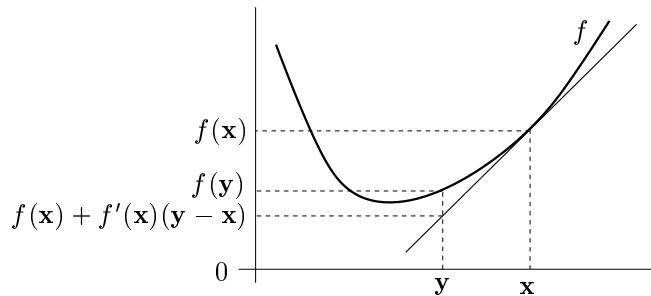
14.1 Konvexitá diferencovatelných funkcí

Konvexní funkce nemusí být v každém bodě diferencovatelná (uvažte např. funkci $f(x) = |x|$). Pokud je ale funkce jednou či dvakrát diferencovatelná, její konvexitu lze snadněji než pomocí podmínky (14.1) (které se někdy říká podmínka nultého řádu) charakterizovat pomocí derivací. Následující dvě věty uvedeme bez důkazů.

Věta 14.1 (Podmínka prvního řádu). Necht' funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ je diferencovatelná na konvexní množině $X \subseteq \mathbb{R}^n$. Funkce f je konvexní na množině X právě tehdy, když

$$\mathbf{x} \in X, \mathbf{y} \in X \implies f(\mathbf{y}) \geq f(\mathbf{x}) + f'(\mathbf{x})(\mathbf{y} - \mathbf{x}).$$

To znamená, že Taylorův polynom prvního řádu funkce f v každém bodě $\mathbf{x} \in X$ (viz (8.13b)) je všude (tj. pro každé \mathbf{y}) menší nebo roven funkci f :



Věta 14.2 (Podmínka druhého řádu). Necht' $X \subseteq \mathbb{R}^n$ je konvexní množina, která má pouze vnitřní body. Necht' funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ je dvakrát diferencovatelná na X . Funkce f je konvexní na množině X právě tehdy, když v každém bodě $\mathbf{x} \in X$ je Hessova matice $f''(\mathbf{x})$ pozitivně semidefinitní.

Příklad 14.5. Nechť $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$, kde \mathbf{A} je symetrická pozitivně semidefinitní. Ukažme konvexitu této funkce třemi způsoby:

- Dokažme konvexitu z Věty 14.2. To je triviální, protože Hessián je $f''(\mathbf{x}) = 2\mathbf{A}$ a tedy je pozitivně semidefinitní.
- Dokažme konvexitu z Věty 14.1. Protože $f'(\mathbf{x}) = 2\mathbf{x}^T \mathbf{A}$, máme dokázat, že

$$\mathbf{y}^T \mathbf{A} \mathbf{y} \geq \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + 2\mathbf{x}^T \mathbf{A}(\mathbf{y} - \mathbf{x}).$$

To jde upravit na $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} - 2\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{y} + \mathbf{y}^T \mathbf{A} \mathbf{y} \geq 0$. Platí¹

$$\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} - 2\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{y} + \mathbf{y}^T \mathbf{A} \mathbf{y} = (\mathbf{x} - \mathbf{y})^T \mathbf{A}(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad (14.5)$$

což je nezáporné pro každé \mathbf{x}, \mathbf{y} , protože \mathbf{A} je pozitivně semidefinitní.

- Dokážme konvexitu z Definice 14.1. Musíme dokázat, že pro každé $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ a $0 \leq \alpha \leq 1$ platí (14.1), tedy

$$[\alpha \mathbf{x} + (1 - \alpha) \mathbf{y}]^T \mathbf{A} [\alpha \mathbf{x} + (1 - \alpha) \mathbf{y}] \leq \alpha \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + (1 - \alpha) \mathbf{y}^T \mathbf{A} \mathbf{y}$$

Po roznásobení a převedení všech členů na jednu stranu upravujeme:

$$\begin{aligned} (\alpha - \alpha^2) \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} - 2\alpha(1 - \alpha) \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{y} + ((1 - \alpha) - (1 - \alpha)^2) \mathbf{y}^T \mathbf{A} \mathbf{y} &\geq 0 \\ \alpha(1 - \alpha) (\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} - 2\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{y} + \mathbf{y}^T \mathbf{A} \mathbf{y}) &\geq 0. \end{aligned}$$

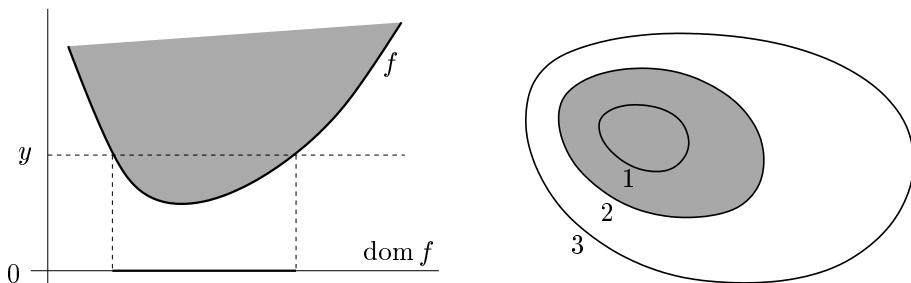
Výraz $\alpha(1 - \alpha)$ je pro každé $0 \leq \alpha \leq 1$ nezáporný. Nezápornost výrazu (14.5) jsme již ukázali. \square

14.2 Vztah konvexní funkce a konvexní množiny

Zopakujte si pojmy vrstevnice a graf funkce z §1.1.3! Zavedeme dva podobné pojmy, které se liší pouze nahrazením rovnosti nerovností. Pro funkci $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ definujeme:

- **Subkontura**² výšky y je množina $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid f(\mathbf{x}) \leq y \}$.
- **Epigraf** funkce je množina $\{ (\mathbf{x}, y) \in \mathbb{R}^{n+1} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, f(\mathbf{x}) \leq y \}$.

Levý obrázek znázorňuje subkonturu výšky y a epigraf funkce $\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, pravý obrázek subkonturu výšky 2 funkce $\mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$:



¹ Všimněte si, že pro $n = 1$ a $\mathbf{A} = 1$ se rovnost (14.5) zjednoduší na známé $x^2 - 2xy + y^2 = (x - y)^2$.

² Slovo 'subkontura' je pokus o český překlad anglického 'sublevel set'.

Existují těsné vztahy mezi konvexitou funkce a konvexitou jejího epigrafu a subkontur (což jsou množiny), dané následujícími větami.

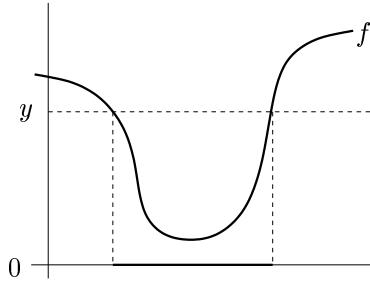
Věta 14.3. *Je-li f konvexní funkce, pak je každá subkontura této funkce konvexní množina.*

Důkaz. Předpokládejme, že body \mathbf{x}_1 a \mathbf{x}_2 patří do subkontury, tedy $f(\mathbf{x}_1) \leq y$ a $f(\mathbf{x}_2) \leq y$. Pro každé $0 \leq \alpha \leq 1$ platí

$$f(\alpha\mathbf{x}_1 + (1 - \alpha)\mathbf{x}_2) \leq \alpha f(\mathbf{x}_1) + (1 - \alpha)f(\mathbf{x}_2) \leq \alpha y + (1 - \alpha)y = y,$$

kde první nerovnost plyne z konvexity funkce a druhá z nerovností $f(\mathbf{x}_1) \leq y$, $f(\mathbf{x}_2) \leq y$. Tedy bod $\alpha\mathbf{x}_1 + (1 - \alpha)\mathbf{x}_2$ patří do subkontury, která je proto konvexní množina. \square

Obrácená implikace ve Větě 14.3 neplatí: snadno najdeme funkci, která není konvexní a jejíž každá subkontura je konvexní množina³. Příklad je na obrázku:



Věta 14.4. *Funkce f je konvexní právě tehdy, když její epigraf je konvexní množina.*

Důkaz. Předpokládejme, že funkce f je konvexní. Vezměme dva body (\mathbf{x}_1, y_1) a (\mathbf{x}_2, y_2) z epigrafu, tedy $f(\mathbf{x}_1) \leq y_1$ a $f(\mathbf{x}_2) \leq y_2$. Pro každé $0 \leq \alpha \leq 1$ platí

$$f(\alpha\mathbf{x}_1 + (1 - \alpha)\mathbf{x}_2) \leq \alpha f(\mathbf{x}_1) + (1 - \alpha)f(\mathbf{x}_2) \leq \alpha y_1 + (1 - \alpha)y_2,$$

kde první nerovnost plyne z konvexity funkce a druhá nerovnost z $f(\mathbf{x}_1) \leq y_1$ a $f(\mathbf{x}_2) \leq y_2$. Tedy bod $\alpha(\mathbf{x}_1, y_1) + (1 - \alpha)(\mathbf{x}_2, y_2)$ patří do epigrafu, který je proto konvexní množina.

Předpokládejme, že epigraf je konvexní množina. Tedy pokud body (\mathbf{x}_1, y_1) a (\mathbf{x}_2, y_2) patří do epigrafu, pak také bod $\alpha(\mathbf{x}_1, y_1) + (1 - \alpha)(\mathbf{x}_2, y_2)$ patří do epigrafu pro každé $0 \leq \alpha \leq 1$. Volbou $y_1 = f(\mathbf{x}_1)$ a $y_2 = f(\mathbf{x}_2)$ máme

$$f(\alpha\mathbf{x}_1 + (1 - \alpha)\mathbf{x}_2) \leq \alpha y_1 + (1 - \alpha)y_2 = \alpha f(\mathbf{x}_1) + (1 - \alpha)f(\mathbf{x}_2),$$

proto je funkce f konvexní. \square

14.3 Operace zachovávající konvexitu funkcí

Operace zachovávající konvexitu funkcí umožňují z jednoduchých konvexních funkcí získat složitější. Konvexitu složitější funkce je často snadnější dokázat pohodlněji pomocí těchto operací než z Definice 14.1 nebo Vět 14.1 a 14.2.

³ Funkce, jejíž každá subkontura je konvexní množina, se nazývá *kvazikonvexní*. Kvazikonvexní funkce nejsou zdaleka tak hezké jako konvexní funkce.

Jsou-li $g_1, \dots, g_k: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ konvexní funkce a $\alpha_1, \dots, \alpha_k \geq 0$, je snadné dokázat z Definice 14.1 (proved'te!), že také funkce

$$f = \alpha_1 g_1 + \dots + \alpha_k g_k \quad (14.6)$$

je konvexní. Speciálně, jsou-li f a g konvexní funkce, pak $f + g$ je konvexní.

Zkoumejme nyní složenou funkci $f(\mathbf{x}) = (h \circ \mathbf{g})(\mathbf{x}) = h(\mathbf{g}(\mathbf{x}))$, kde $\mathbb{R}^n \xrightarrow{\mathbf{g}} \mathbb{R}^m \xrightarrow{h} \mathbb{R}$. Obecně neplatí ani v případě $m = n = 1$, že konvexitu funkcí g a h zaručuje konvexitu funkce f . Nutné a postačující podmínky pro konvexitu složené funkce jsou obecně dosti komplikované a nebudeme je uvádět. Uvedeme jen nejdůležitější případ, kdy \mathbf{g} je afinní zobrazení.

Věta 14.5. Necht' funkce $h: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ je konvexní. Necht' $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ a $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$. Pak funkce $f(\mathbf{x}) = h(\mathbf{Ax} + \mathbf{b})$ je konvexní.

Důkaz. Pro každé $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ a $0 \leq \alpha \leq 1$ platí

$$\begin{aligned} f(\alpha \mathbf{x} + (1 - \alpha) \mathbf{y}) &= h(\mathbf{A}[\alpha \mathbf{x} + (1 - \alpha) \mathbf{y}] + \mathbf{b}) \\ &= h(\alpha(\mathbf{Ax} + \mathbf{b}) + (1 - \alpha)(\mathbf{Ay} + \mathbf{b})) \\ &\leq \alpha h(\mathbf{Ax} + \mathbf{b}) + (1 - \alpha)h(\mathbf{Ay} + \mathbf{b}) \\ &= \alpha f(\mathbf{x}) + (1 - \alpha)f(\mathbf{y}). \end{aligned} \quad \square$$

Příklad 14.6. Funkce $f: \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R}$ daná vzorcem $f(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|$, kde $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$, je konvexní funkce argumentu $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \mathbb{R}^{2n}$. Ve Větě 14.5 vezmeme $\mathbf{A} = [\mathbf{I} \ -\mathbf{I}] \in \mathbb{R}^{n \times (2n)}$ a $\mathbf{b} = \mathbf{0}$. \square

Nejzajímavější operace zachovávající konvexitu funkcí je maximum.

Věta 14.6. Necht' I je libovolná množina a $g_i: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $i \in I$, jsou konvexní funkce. Pak

$$f(\mathbf{x}) = \max_{i \in I} g_i(\mathbf{x}) \quad (14.7)$$

je konvexní funkce, kde předpokládáme, že pro každé \mathbf{x} maximum existuje⁴.

Důkaz. Postupujeme podobně jako v Příkladu 14.1:

$$f(\alpha \mathbf{x} + (1 - \alpha) \mathbf{y}) = \max_{i \in I} g_i(\alpha \mathbf{x} + (1 - \alpha) \mathbf{y}) \quad (14.8a)$$

$$\leq \max_{i \in I} [\alpha g_i(\mathbf{x}) + (1 - \alpha)g_i(\mathbf{y})] \quad (14.8b)$$

$$\leq \max_{i \in I} [\alpha g_i(\mathbf{x})] + \max_{i \in I} [(1 - \alpha)g_i(\mathbf{y})] \quad (14.8c)$$

$$= \alpha \max_{i \in I} g_i(\mathbf{x}) + (1 - \alpha) \max_{i \in I} g_i(\mathbf{y}) \quad (14.8d)$$

$$= \alpha f(\mathbf{x}) + (1 - \alpha)f(\mathbf{y}). \quad (14.8e)$$

Nerovnost (14.8b) plyne z konvexitu funkcí g_i . Nerovnost (14.8c) plyne z nerovnosti (14.4), kterou jsme sice dokázali jen pro konečnou množinu I ale zřejmě platí i pro nekonečnou I . Rovnost (14.8d) plyne z nezápornosti α a $1 - \alpha$. \square

⁴ Pokud pro nějaké \mathbf{x} množina $\{g_i(\mathbf{x}) \mid i \in I\}$ nemá největší prvek (což se může stát jen tehdy, je-li množina I nekonečná), můžeme maximum v (14.7) nahradit supremem a věta stále platí.

Uved'me ještě jiný důkaz Věty 14.6, který využívá pojem epigrafu.

Důkaz. Epigraf funkce f je množina

$$\begin{aligned} \{(\mathbf{x}, y) \in \mathbb{R}^{n+1} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \max_{i \in I} g_i(\mathbf{x}) \leq y\} &= \{(\mathbf{x}, y) \in \mathbb{R}^{n+1} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, (\forall i \in I)(g_i(\mathbf{x}) \leq y)\} \\ &= \bigcap_{i \in I} \{(\mathbf{x}, y) \in \mathbb{R}^{n+1} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, g_i(\mathbf{x}) \leq y\}, \end{aligned}$$

kde jsme využili ekvivalence (11.5). Vidíme, že epigraf funkce f je průnik epigrafů funkcí g_i .

Protože funkce g_i jsou konvexní, dle Věty 14.4 jsou jejich epigrafy konvexní množiny. Dle Věty 12.1 je průnik konvexních množin konvexní množina. Tedy epigraf funkce (14.7) je konvexní množina. Dle Věty 14.4 je tedy funkce f konvexní. \square

Příklad 14.7. Necht' $f(\mathbf{x}) = \max_{i=1}^n x_i$ je maximum ze složek \mathbf{x} . Konvexitu této funkce jsme dokázali z Definice 14.1, nicméně dokažme ji z Věty 14.6. Máme $g_i(\mathbf{x}) = x_i$. Funkce g_i jsou lineární, tedy konvexní. Tedy funkce $f(\mathbf{x}) = \max_{i=1}^n g_i(\mathbf{x})$ je konvexní. \square

Příklad 14.8. Funkce

$$f(\mathbf{x}) = \max_{i=1}^k (\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} + b_i)$$

je maximem affiných funkcií. Tuto funkci jsme již potkali v §11.1.1. Protože affiní funkce jsou konvexní, je i jejich maximum konvexní. \square

Příklad 14.9. Necht' $C \subseteq \mathbb{R}^n$ je libovolná (ne nutně konvexní) množina. Funkce

$$f(\mathbf{x}) = \max_{\mathbf{y} \in C} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|$$

udává vzdálenost bodu \mathbf{x} od nejvzdálenějšího bodu množiny C (zde předpokládáme, že maximum existuje). Dle Věty 14.5 je pro každé pevné \mathbf{y} výraz $\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|$ konvexní funkci \mathbf{x} . Tedy výraz $\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|$ lze chápout jako množinu konvexních funkcií \mathbf{x} indexovaných indexem \mathbf{y} (můžeme označit $\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| = g_{\mathbf{y}}(\mathbf{x})$). Jelikož f je maximem těchto funkcií, je i funkce f konvexní. \square

Příklad 14.10. Mějme funkci

$$f(\mathbf{c}) = \max\{ \mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{A}\mathbf{x} \geq \mathbf{b} \},$$

která vyjadřuje závislost optimální hodnoty daného lineárního programu na vektoru \mathbf{c} (viz §11). Máme $f(\mathbf{c}) = \max_{\mathbf{x} \in X} \mathbf{c}^T \mathbf{x}$ a $X = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{A}\mathbf{x} \geq \mathbf{b} \}$ (zde předpokládáme, že pro každé \mathbf{c} maximum existuje, neboli množina X je neprázdná a omezená). Je-li \mathbf{x} pevné, je $\mathbf{c}^T \mathbf{x}$ lineární funkce vektoru \mathbf{c} . Funkce f je tedy maximum nekonečného množství lineárních funkcií, tedy je konvexní. \square

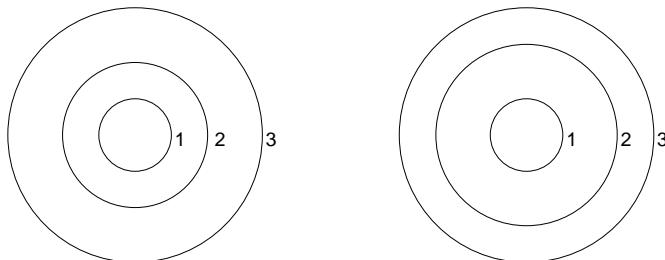
Příklad 14.11. Necht' $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n \in \mathbb{R}^m$, $b_1, \dots, b_n \in \mathbb{R}$ a $\mathbf{w} = (w_1, \dots, w_n) \in \mathbb{R}^n$ je vektor nezáporných vah. Přibližné řešení soustavy $\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} = b_i$, $i = 1, \dots, n$, ve smyslu *vážených nejmenších čtverců* (viz §5.4) znamená vypočítat

$$f(\mathbf{w}) = \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m} \sum_{i=1}^n w_i (\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} - b_i)^2,$$

kde jsme označili hodnotu výsledného minima jako funkci vektoru vah. Funkce f je konkávní, protože je minimem lineárních funkcií. \square

14.4 Cvičení

- 14.1. Pro každou funkci $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ dokažte z Definice 14.1, které z těchto čtyř tvrzení platí: funkce je konvexní, konkávní, konvexní i konkávní, ani konvexní ani konkávní.
- $f(\mathbf{x}) = \mathbf{a}^T \mathbf{x} + b$
 - $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{x}$
 - $f(\mathbf{x}) = \text{aritmetický průměr čísel } x_1, \dots, x_n$
 - $f(\mathbf{x}) = \text{median}_{i=1}^n x_i$ (medián čísel x_1, \dots, x_n)
- 14.2. Pro každou funkci dokažte, které z těchto čtyřech tvrzení platí: funkce je konvexní, konkávní, konvexní i konkávní, ani konvexní ani konkávní. Můžete to dokázat buď z Definice 14.1, pomocí derivací, nebo pomocí operací zachovávajících konvexitu.
- $f(x) = e^{x^2}$
 - $f(x) = e^{-x^2}$
 - $f(x, y) = |x - y|$
 - $f(x, y) = -y$
 - $f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2^2$
 - $f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n x_i \log x_i$ na množině \mathbb{R}_{++}^n
 - $f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^k \log(b_i - \mathbf{a}_i^T \mathbf{x})$ na množině $X = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{a}_i^T \mathbf{x} < b_i, i = 1, \dots, k \}$
 - $f(\mathbf{x}) = \min_{i=1}^n |x_i|$
 - $f(\mathbf{x}) = \max_{i=1}^n x_i + \min_{i=1}^n x_i$
 - $f(\mathbf{x}) = \max_{i=1}^n x_i - \min_{i=1}^n x_i$
 - $(\star) f(\mathbf{x}) = \text{součet } k \text{ největších čísel } x_1, \dots, x_n$ (kde $k \leq n$ je dáno)
- 14.3. Robustní prokládání přímky množinou bodů $(\mathbf{x}_i, y_i) \in (\mathbb{R}^n \times \mathbb{R})$, $i = 1, \dots, m$ vyžaduje minimalizaci funkce
- $$f(\mathbf{a}, b) = \sum_{i=1}^m \max\{-\mathbf{a}^T \mathbf{x}_i + b + y_i - \varepsilon, 0, \mathbf{a}^T \mathbf{x}_i + b - y_i - \varepsilon\},$$
- kde $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$ a $b \in \mathbb{R}$. Dokažte, že $f(\mathbf{a}, b)$ je konvexní funkce.
- 14.4. Je dána funkce $f(x) = -\cos x$ a množina $X = [-\pi, +\pi]$ (kde $[\cdot]$ značí uzavřený interval). Zakroužkujte pravdivá tvrzení (může jich být i více):
- Funkce f je na množině X konvexní.
 - Funkce f je na množině X konkávní.
 - Funkce f není na množině X ani konvexní ani konkávní.
- 14.5. Každý z obrázků zobrazuje některé vrstevnice funkce dvou proměnných a jejich výšky. Je možné, aby funkce, která má tyto vrstevnice, byla konvexní? Dokažte z Definice 14.1.



- 14.6. Co je subkontura výšky 2 funkce jedné proměnné $f(x) = x^2 - x$?
- 14.7. Zkuste dokázat z Definice 14.1 konvexitu či konkavitu funkcí z Příkladu 14.4. Jestliže to nesvedete, dokažte jejich konvexitu či konkavitu pomocí Vět 14.1 a 14.2.
- 14.8. Dokažte, že účelové funkce vystupující v následujících úlohách jsou nekonvexní:
 - a) Příklad 10.6
 - b) Cvičení 10.3

Návod a řešení

- 14.1.a) Konvexní i konkávní, nerovnost (14.1) platí s rovností.
- 14.1.b) Je konvexní, není koknávní.
- 14.1.c) Konvexní i konkávní, nerovnost (14.1) platí s rovností.
- 14.1.d) Pro $n \leq 2$ konvexní i konkávní, pro $n > 2$ ani konvexní ani konkávní.
- 14.5. V Definici 14.1 zvolte \mathbf{x}, \mathbf{y} na vrstevnicích výšky 1 a 3. Zvolte chytře α . Odpověď: ne, ano.
- 14.7. Interval $[-1, 2]$.

Kapitola 15

Konvexní optimalizační úlohy

Najít globální minimum funkce na množině je obvykle mnohem těžší než najít *nějaké* lokální minimum. Mohli bychom si myslet, že globální mimimum najdeme tak, že najdeme všechna lokální minima a vybereme to, pro které je účelová funkce nejmenší. Problém je v tom, že lokálních minim může být velmi mnoho.

Příklad 15.1. Řešme úlohu

$$\max\{ \mathbf{x}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in [-1, 1]^n \}, \quad (15.1)$$

tedy maximalizujeme konvexní funkci $\mathbf{x}^T \mathbf{x}$ na hyperkrychli $[-1, 1]^n$. Je jasné (nakreslete si obrázek pro $n = 2$, tedy pro čtverec!), že funkce má lokální maximum v každém vrcholu hyperkrychle. Jelikož hyperkrychle má 2^n vrcholů (viz §12.3.3), úloha má 2^n lokálních maxim.

V tomto symetrickém případě globální maximum snadno najdeme úvahou. Uvažme však mírnou modifikaci úlohy:

$$\min\{ \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in [-1, 1]^n \}. \quad (15.2)$$

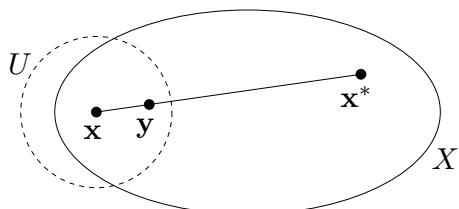
□

kde $\mathbf{A} \in \mathbb{Z}^{n \times n}$ (tedy matice má celočíselné prvky). Nalezení globálního maxima této úlohy je pravděpodobně velmi těžké, v následujícím smyslu.

Řekneme, že daný algoritmus řeší úlohu (15.2) v *polynomiálním čase*¹, jestliže existuje polynom p takový, že algoritmus pro každou matici \mathbf{A} skončí v čase menším než $p(L)$, kde L je počet bitů potřebných k zápisu všech prvků a_{ij} matice \mathbf{A} v binárním kódu. Algoritmus, který by řešil úlohu v polynomiálním čase, není znám.

Věta 15.1. Necht' funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ je konvexní na konvexní množině $X \subseteq \mathbb{R}^n$. Pak každé lokální minimum funkce f na množině X je zároveň globální.

Důkaz. Necht' \mathbf{x} je lokálním minimem f na X , viz obrázek:



¹Zde se dotýkáme *teorie složitosti algoritmů*, kterou budete brát až později.

Dle Definice 9.2 tedy existuje okolí U bodu \mathbf{x} tak, že $f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{y})$ pro všechna $\mathbf{y} \in U \cap X$. Necht' ale \mathbf{x} není globální minimum, tedy existuje $\mathbf{x}^* \in X$ takové, že $f(\mathbf{x}^*) < f(\mathbf{x})$. Ukážeme, že to vede ke sporu. Můžeme totiž zvolit $0 < \alpha < 1$ tak, že bod $\mathbf{y} = \alpha\mathbf{x} + (1 - \alpha)\mathbf{x}^*$ leží v U . Protože je množina X konvexní, leží bod \mathbf{y} zároveň i v X . Máme

$$f(\mathbf{y}) = f(\alpha\mathbf{x} + (1 - \alpha)\mathbf{x}^*) \leq \alpha f(\mathbf{x}) + (1 - \alpha)f(\mathbf{x}^*) < \alpha f(\mathbf{x}) + (1 - \alpha)f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}).$$

Ale tvrzení $f(\mathbf{y}) < f(\mathbf{x})$ je ve sporu s předpokladem, že \mathbf{x} je lokální minimum. \square

Věta 15.1 tedy definuje třídu úloh, pro které nám stačí najít libovolné lokální minimum, abychom našli globální minimum. Úloze, ve které minimalizujeme konvexní funkci na konvexní množině, se říká **konvexní optimalizační úloha**.

Uvažujme nyní obecnou úlohu spojité optimalizace ve standarním tvaru (1.7),

$$\min\{f(\mathbf{x}) \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}, \mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}\} \quad (15.3)$$

neboli

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

kde $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $(g_1, \dots, g_m) = \mathbf{g}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, $(h_1, \dots, h_l) = \mathbf{h}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^l$. Množina přípustných řešení této úlohy je konvexní, jestliže funkce f, g_1, \dots, g_m jsou konvexní a funkce h_1, \dots, h_l jsou affinní (tedy zobrazení \mathbf{h} je affinní). Tato množina je totiž průnik množin $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid g_i(\mathbf{x}) \leq 0\}$ (které jsou konvexní, nebot' jsou to subkontury konvexní funkce g_i) a $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}\}$ (což je affinní podprostor, tedy také konvexní).

Podmínka, že funkce f, g_1, \dots, g_m jsou konvexní a zobrazení \mathbf{h} je affinní, je postačující ale nikoliv nutná pro konvexitu množiny přípustných řešení.

Příklad 15.2. Uvažujme dvě ekvivalentní definice téže množiny

$$\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 \mid x_1/(1+x_2^2) \leq 0, (x_1+x_2)^2 = 0\} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 \mid x_1 \leq 0, x_1+x_2 = 0\}.$$

Oba tvary definují stejnou množinu (proč?). V prvním tvaru funkce $g(\mathbf{x}) = x_1/(1+x_2^2)$ není konvexní a funkce $h(\mathbf{x}) = (x_1+x_2)^2$ není affinní. Přesto je množina konvexní, což je vidět ze druhého tvaru. \square

Úloze tvaru (15.3), ve které jsou funkce f, g_1, \dots, g_m konvexní a zobrazení \mathbf{h} affinní, říkáme **konvexní optimalizační úloha ve standardním tvaru**.

15.1 Ekvivalentní transformace úlohy

Dvě úlohy ve tvaru (15.3) nazveme **ekvivalentní**, když se z množiny optimálních řešení jedné dá 'snadno' (v lineárním čase) získat množina optimálních řešení druhé. **Ekvivalentní transformace** je pak každá transformace úlohy, jejímž výsledkem je úloha ekvivalentní. Dále uvedeme příklady ekvivalentních transformací. U každé poznamenáme, zda zachovává konvexitu úlohy.

Změna proměnných

Necht' $\varphi: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ je bijektivní zobrazení (viz §1.1.2). Pak úloha (15.3) je ekvivalentní úloze

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

Tato transformace nemusí zachovat konvexitu úlohy.

Monotónní transformace účelové funkce

Necht' $\psi: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ je monotónní rostoucí funkce. Pak

$$\min\{ f(\mathbf{x}) \mid \mathbf{x} \in X \} = \min\{ \psi(f(\mathbf{x})) \mid \mathbf{x} \in X \}.$$

Tato transformace nemusí zachovat konvexitu funkce f .

Příklad 15.3. Tuto transformaci jsme již několikrát použili v nejmenších čtvercích. Máme minimalizovat např. funkci $f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2$, ale zvolíme $\psi(y) = y^2$ a minimalizujeme funkci $\psi(f(\mathbf{x})) = \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2 = (\mathbf{Ax} - \mathbf{b})^T(\mathbf{Ax} - \mathbf{b})$. Nová funkce má výhodu, že je na rozdíl od staré diferencovatelná, a to při zachování konvexity. \square

Slackové proměnné

Podobně jako v lineárním programování, úloha (15.3) je ekvivalentní úloze

$$\min\{ f(\mathbf{x}) \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{s} \in \mathbb{R}^m, \mathbf{s} \geq \mathbf{0}, \mathbf{g}(\mathbf{x}) + \mathbf{s} = \mathbf{0}, \mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \}.$$

Transformace zachová konvexitu úlohy jen v případě, kdy $\mathbf{g}(\mathbf{x}) + \mathbf{s}$ je afinní zobrazení vektoru (\mathbf{x}, \mathbf{s}) , tedy kdy zobrazení \mathbf{g} je afinní,

Epigrafový tvar

Úlohu (15.3) je ekvivalentní úloze

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

Tato transformace zachovává konvexitu úlohy. Plyne z ní důležité pozorování, že každou optimalizační úlohu lze převést na úlohu s lineární účelovou funkcí.

15.2 Třídy konvexních optimalizačních úloh

Optimalizační úlohy ve tvaru (15.3) se taxonomizují podle druhu funkcí f, g_i, h_i . Pro každou třídu existují specializované algoritmy schopné najít lokální minimum².

15.2.1 Lineární programování (LP)

V lineárním programování jsou všechny funkce f, g_i, h_i affinní. Jde tedy v jistém smyslu o nej-jednodušší případ konvexní optimalizační úlohy. Přesto jsme viděli v Kapitole 11, že již tento jednoduchý případ má velmi mnoho aplikací.

² Viz např. <http://www.neos-guide.org>.

15.2.2 Kvadratické programování (QP)

V kvadratickém programování jsou funkce g_i, h_i affinní a funkce f je kvadratická konvexní, tedy $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c$ kde \mathbf{A} je pozitivně semidefinitní (viz Příklad 14.5).

Příklad 15.4. Při řešení soustavy ve smyslu nejmenších čtverců (§5.1) počítáme konvexní QP bez omezení $\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2$. Tuto úlohu lze všelijak modifikovat, např. můžeme přidat omezení $\mathbf{c} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{d}$, tj. každá proměnná x_j musí být v intervalu $[c_j, d_j]$. To vede na konvexní QP s omezeními. \square

Příklad 15.5. Hledání řešení přeuročené lineární soustavy s nejmenší normou (§5.2) vede na úlohu $\min\{\|\mathbf{x}\| \mid \mathbf{Ax} = \mathbf{b}\}$, což je konvexní QP. \square

Příklad 15.6. Chceme spočítat vzdálenost $d(P_1, P_2) = \min\{\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|_2 \mid \mathbf{x}_1 \in P_1, \mathbf{x}_2 \in P_2\}$ dvou konvexních polyedrů $P_1 = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{A}_1 \mathbf{x} \leq \mathbf{b}_1\}$, $P_2 = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{A}_2 \mathbf{x} \leq \mathbf{b}_2\}$. Úloha vede na QP

$$d(P_1, P_2)^2 = \min\{\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|_2^2 \mid \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \mathbb{R}^n, \mathbf{A}_1 \mathbf{x}_1 \leq \mathbf{b}_1, \mathbf{A}_2 \mathbf{x}_2 \leq \mathbf{b}_2\}. \quad \square$$

Příklad 15.7. Je dáno m bodů v \mathbb{R}^n , z nichž každý patří do jedné ze dvou tříd, označených -1 a 1 . Jinými slovy, je dána množina dvojic $(\mathbf{x}_i, y_i) \in \mathbb{R}^n \times \{-1, 1\}$ pro $i = 1, \dots, m$. V úloze *lineární klasifikace* hledáme nadrovinu, která odděluje body z obou tříd. Tedy hledáme $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$ a $b \in \mathbb{R}$ takové, aby

$$\begin{aligned} \mathbf{a}^T \mathbf{x}_i - b &< 0 & \text{pro } y_i = -1, \\ \mathbf{a}^T \mathbf{x}_i - b &> 0 & \text{pro } y_i = 1, \end{aligned}$$

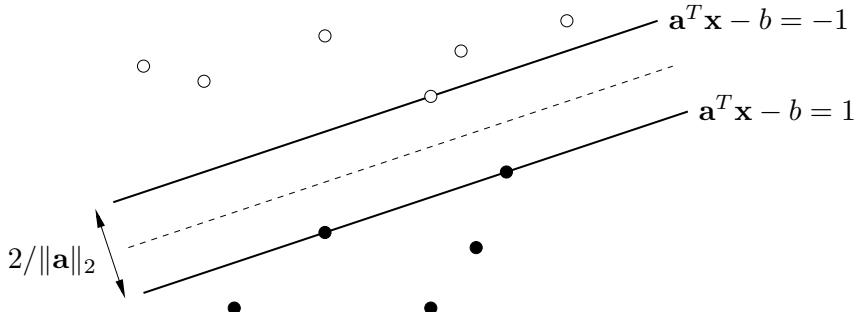
což lze napsat jako

$$y_i(\mathbf{a}^T \mathbf{x}_i - b) > 0, \quad i = 1, \dots, m. \quad (15.4)$$

Označme $\varepsilon_i = y_i(\mathbf{a}^T \mathbf{x}_i - b)$ a vydělme vektor (\mathbf{a}, b) kladným číslem $\min_{i=1}^m \varepsilon_i$. Pak soustavu (15.4) můžeme ekvivalentně psát jako

$$y_i(\mathbf{a}^T \mathbf{x}_i - b) \geq 1, \quad i = 1, \dots, m. \quad (15.5)$$

Hledáme-li libovolnou oddělující nadrovinu, stačí nám najít libovolné řešení soustavy nerovnic (15.5). Soustava ale navíc říká, že body jsou odděleny pásem $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid -1 \geq \mathbf{a}^T \mathbf{x} - b \geq 1\}$:



Snadno spočítáme (srov. Cvičení 5.18), že šířka pásu je $2/\|\mathbf{a}\|_2$. V úloze *support vector machine* (SVM) najít rozdělující nadrovinu která maximalizuje šířku pásu, tedy minimalizuje $\|\mathbf{a}\|_2^2 = \mathbf{a}^T \mathbf{a}$ za podmínek (15.5). To je úloha QP. \square

15.2.3 Kvadratické programování s kvadratickými omezeními (QCQP)

Obecnější variantou je *kvadratické programování s kvadratickými omezeními* (QCQP, *quadratically constrained quadratic programming*), kde funkce f, g_i jsou kvadratické konvexní a funkce h_i jsou afinní.

15.2.4 Programování na kuželu druhého řádu (SOCP)

V úloze *programování na kuželu druhého řádu* (SOCP, *second-order cone programming*) jsou funkce f, h_i afinní a funkce g_i mají tvar

$$g_i(\mathbf{x}) = \|\mathbf{A}_i \mathbf{x} + \mathbf{b}_i\|_2 - (\mathbf{c}_i^T \mathbf{x} + d_i). \quad (15.6)$$

Tedy úloha SOCP má tvar (vynecháváme afinní omezení $h_i(\mathbf{x}) = 0$)

$$\begin{aligned} & \min \quad \mathbf{e}^T \mathbf{x} \\ \text{za podmínek } & \|\mathbf{A}_i \mathbf{x} + \mathbf{b}_i\|_2 \leq \mathbf{c}_i^T \mathbf{x} + d_i, \quad i = 1, \dots, m. \end{aligned}$$

Funkce g_i jsou konvexní (nebot' norma je konvexní funkce, dále viz Věta 14.5). Podmínu $g_i(\mathbf{x}) \leq 0$ lze psát také jako $(\mathbf{A}_i \mathbf{x} + \mathbf{b}_i, \mathbf{c}_i^T \mathbf{x} + d_i) \in K_2^n$, kde konvexní množina

$$K_2^n = \{(\mathbf{x}, y) \in \mathbb{R}^{n+1} \mid \|\mathbf{x}\|_2 \leq y\}$$

je epigraf Euklidovské normy $\|\cdot\|_2$ (která je konvexní funkce, viz Příklad 14.4), kterému se také říká *kužel druhého řádu*.

Pro $\mathbf{A}_i = \mathbf{0}$ se podmínka $g_i(\mathbf{x}) \leq 0$ stane lineární nerovnicí. Pro $\mathbf{c}_i = \mathbf{0}$ se podmínka $g_i(\mathbf{x}) \leq 0$ po umocnění na druhou stane konvexní kvadratická. Tedy LP a QCQP jsou speciální případy SOCP.

Příklad 15.8. Jsou dány body $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m \in \mathbb{R}^n$ a chceme minimalizovat funkci

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m \|\mathbf{x} - \mathbf{a}_i\|_2 \quad (15.7)$$

přes $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$. Řešení této úlohy je známo jako *geometrický medián*. Pro $n = 1$ se funkce redukuje na $f(x) = \sum_{i=1}^m |x - a_i|$, jejímž minimem je obyčejný medián.

Úloha je konvexní, ale nelze ji převést na LP, QP ani QCQP. Po zavedení pomocných proměnných z_i (podobná úprava jako v §11.1.1) ji lze formulovat jako SOCP:

$$\begin{aligned} & \min \quad z_1 + \dots + z_m \\ \text{za podmínek } & \|\mathbf{x} - \mathbf{a}_i\|_2 \leq z_i, \quad i = 1, \dots, m. \end{aligned}$$

Pro případ $n = 2$ má úloha jednoduchý mechanický model³. Do vodorovného prkna vyvrátáme díry o souřadnicích \mathbf{a}_i . Každou dírou provlečeme provázek. Provázky jsou nahoře svázané uzlem do jednoho bodu a dole mají závaží o stejně hmotnosti. Poloha uzlu je \mathbf{x} . Hodnota $f(\mathbf{x})$ je potenciální energie soustavy a ustálený stav odpovídá minimu $f(\mathbf{x})$. \square

³Toto mechanické zařízení, známé jako *Varignon frame*, se v minulosti opravdu používalo na řešení úlohy. Úloha má bohatou historii, je známa také jako Fermat-Weberův problém.

15.2.5 Semidefinitní programování (SDP)

Věta 15.2. Množina všech pozitivně semidefinitních matic rozměru $n \times n$ je konvexní kužel.

Důkaz. Necht' pro $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ a $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ je $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \geq 0$ a $\mathbf{x}^T \mathbf{B} \mathbf{x} \geq 0$. Pak pro každé $\alpha, \beta \geq 0$

$$\mathbf{x}^T (\alpha \mathbf{A} + \beta \mathbf{B}) \mathbf{x} = \alpha \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + \beta \mathbf{x}^T \mathbf{B} \mathbf{x} \geq 0. \quad \square$$

Konvexní kužel je konvexní množina. To umožňuje formulovat třídu konvexních úloh známou jako *semidefinitní programování* (SDP). Jednou z možných formulací je

$$\begin{array}{ll} \min & \mathbf{C} \cdot \mathbf{X} \\ \text{za podmínek} & \mathbf{X} \text{ je pozitivně semidefinitní} \\ & \mathbf{A}_i \cdot \mathbf{X} = b_i, \quad i = 1, \dots, m. \end{array} \quad (15.8)$$

kde matice $\mathbf{C}, \mathbf{A}_i \in \mathbb{R}^{n \times n}$ a skaláry b_i jsou dány a optimalizujeme přes pozitivně semidefinitní matice $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Operace

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n A_{ij} X_{ij}$$

označuje skalární součin matic.

SDP je velmi obecná třída konvexních úloh. Lze ukázat, že konvexní úlohy LP, QP, QCQP i SOCP jsou speciální případy SDP. Pro ilustraci ukážeme, že pokud matice \mathbf{C}, \mathbf{A}_i jsou diagonální, úloha (15.8) se redukuje na LP. V tom případě v součinech $\mathbf{C} \cdot \mathbf{X}$ a $\mathbf{A}_i \cdot \mathbf{X}$ nediagonální prvky matice \mathbf{X} nehrají žádnou roli. Diagonální matice je pozitivně semidefinitní právě tehdy, když všechny její prvky jsou nezáporné (viz Cvičení 6.19). Tedy úloha (15.8) se redukuje na

$$\min \{ \mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{x} \geq \mathbf{0}, \mathbf{a}_i^T \mathbf{x} = b_i \forall i = 1, \dots, m \},$$

kde vektory $\mathbf{c}, \mathbf{a}_i \in \mathbb{R}^n$ jsou diagonální matic \mathbf{C}, \mathbf{A}_i .

Některé konvexní úlohy nepatří do žádné z uvedených tříd.

Příklad 15.9. Analytický střed soustavy nerovnic $X = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{A} \mathbf{x} \geq \mathbf{b} \}$ je bod, který maximalizuje funkci

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m \log(\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} - b_i) \quad (15.9)$$

na vnitřku množiny X , kde \mathbf{a}_i^T jsou řádky matice \mathbf{A} . Pokud je polyedr X neprázdný a omezený, úloha má maximum a toto maximum je jediné.

Každou nerovnici $\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} \geq b_i$ vydělme nezáporným číslem tak, aby $\|\mathbf{a}_i\|_2 = 1$. Nyní $\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} - b_i$ je vzdálenost bodu \mathbf{x} od nadroviny $\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} = b_i$. Číslo $f(\mathbf{x})$ je tedy logaritmus součinu vzdáleností bodu \mathbf{x} od nadrovin. Analytický střed tedy minimalizuje součin těchto vzdáleností. \square

15.3 Cvičení

- 15.1. Významnou vlastností konvexních funkcí je to, že každé lokální minimum funkce je zároveň globální (Věta 15.1). Ne každá funkce s touto vlastností je ovšem konvexní. Člověk by si mohl myslit, že součet dvou funkcí (ne nutně konvexních) s touto vlastností bude mít tuto vlastnost také. Je toto tvrzení pravdivé? Odpověď dokažte.

15.2. Dokažte, že množina optimálních řešení konvexní optimalizační úlohy je konvexní.

15.3. Mějme úlohu

$$\min \{ f(x, y) \mid x, y \geq 0, 2x + y \geq 1, x + 3y \geq 1 \}.$$

Nakreslete množinu přípustných řešení. Pro každou z následujících účelových funkcí najděte úvahou množinu optimálních řešení a optimální hodnotu:

- a) $f(x, y) = x + y$
- b) $f(x, y) = x$
- c) $f(x, y) = \min\{x, y\}$
- d) $f(x, y) = \max\{x, y\}$
- e) $f(x, y) = |x + y|$
- f) $f(x, y) = x^2 + 9y^2$

V kterých případech se jedná o konvexní optimalizační úlohu?

15.4. Uvažujme úlohu, známou jako *lineární lomené programování*:

$$\begin{aligned} \min \quad & (\mathbf{c}^T \mathbf{x} + d) / (\mathbf{e}^T \mathbf{x} + f) \\ \text{za podmínek} \quad & \mathbf{A}\mathbf{x} \geq \mathbf{b} \\ & \mathbf{e}^T \mathbf{x} + f > 0 \end{aligned}$$

- a) Je účelová funkce na množině přípustných řešení konvexní?
- b) Dokažte, že úloha je ekvivalentní lineárnímu programu (s proměnnými \mathbf{x}, z)

$$\begin{aligned} \min \quad & \mathbf{c}^T \mathbf{y} + dz \\ \text{za podmínek} \quad & \mathbf{A}\mathbf{y} \geq \mathbf{b}z \\ & \mathbf{e}^T \mathbf{y} + fz = 1 \\ & z \geq 0 \end{aligned}$$

15.5. Najděte explicitní řešení pro následující úlohy QCQP (\mathbf{A}, \mathbf{B} jsou pozitivně definitní):

- a) $\min \{ \mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \leq 1 \}$
- b) $\min \{ \mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, (\mathbf{x} - \mathbf{b})^T \mathbf{A} (\mathbf{x} - \mathbf{b}) \leq 1 \}$
- c) $\min \{ \mathbf{x}^T \mathbf{B} \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \leq 1 \}$

15.6. Formulujte úlohu $\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_4$ jako konvexní QCQP.

15.7. Dokažte, že pro libovolný vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ a skaláry $y \geq 0, z \geq 0$ platí

$$\mathbf{x}^T \mathbf{x} \leq yz \iff \|(2\mathbf{x}, y - z)\|_2 \leq y + z.$$

Uvažujte úlohu, kdy maximalizujeme harmonický průměr afinních funkcí, tedy funkci

$$f(\mathbf{x}) = \left(\sum_{i=1}^m (\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} - b_i)^{-1} \right)^{-1}$$

za podmínek $\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} > b_i$. Je tato úloha (po možné jednoduché transformaci) konvexní? Vyjádřete úlohu jako SOCP pomocí dokázané ekvivalence.

15.8. (*) Máme konvexní funkci jedné proměnné $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. Dáme do grafu funkce žebřík o délce 1 tak, aby oba konce ležely na grafu. Předpokládáme-li, že tření mezi žebříkem a grafem je nulové, zaujmě žebřík stav lokálního minima potenciální energie (která je přímo úměrná výšce středu žebříku). Zformulujte jako optimalizační úlohu. Bude tato úloha konvexní? Zkuste najít situaci, kdy potenciální energie bude mít více než jedno lokální minimum.

Návod a řešení

15.4.a) Ne.

15.4.b) Uvažujte substituci $\mathbf{y} = \mathbf{x}/(\mathbf{e}^T \mathbf{x} + f)$, $z = /(\mathbf{e}^T \mathbf{x} + f)$.

15.5.a) Viz Cvičení 11.5.

15.5.b) Substituujte $\mathbf{y} = \mathbf{x} - \mathbf{b}$.

15.5.c) Optimální hodnota je nula.

15.7. Místo maximalizace funkce $f(\mathbf{x})$ minimalizujme funkci $1/f(\mathbf{x})$, která je konvexní na množině přípustných hodnot. Úloha je ekvivalentní úloze

$$\begin{aligned} & \min \quad t_1 + \cdots + t_m \\ \text{za podmínek} \quad & t_i(\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} - b_i) \geq 1, \quad i = 1, \dots, m \\ & t_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, m. \end{aligned}$$

Použitím dokázané ekvivalence převedeme na SOCP

$$\begin{aligned} & \min \quad t_1 + \cdots + t_m \\ \text{za podmínek} \quad & \|2, \mathbf{a}_i^T \mathbf{x} - b_i - t_i\|_2 \geq \mathbf{a}_i^T \mathbf{x} - b_i + t_i, \quad i = 1, \dots, m \\ & \mathbf{a}_i^T \mathbf{x} \geq b_i, \quad i = 1, \dots, m \\ & t_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, m. \end{aligned}$$

Kapitola 16

Dualita v lineárním programování

Ke každé úloze LP lze sestavit podle jistého postupu jinou úlohu LP. Novou úlohu nazýváme **duální**, původní úlohu nazýváme **primární** či **přímou**. Konstrukce je symetrická (viz Cvičení 16.1): duální úloha k duální úloze je původní úloha. Tedy má smysl říkat, že primární a duální úloha jsou *navzájem* duální. Dvojice duálních úloh je svázána zajímavými vztahy.

16.1 Konstrukce duální úlohy

K úloze LP v obecném tvaru (viz §11.1) se duální úloha získá dle tohoto postupu:

$$\begin{array}{llll}
 \min & \sum_{j \in J} c_j x_j & \max & \sum_{i \in I} b_i y_i \\
 \text{za podm.} & \sum_{j \in J} a_{ij} x_j = b_i & \text{za podm.} & y_i \in \mathbb{R}, \quad i \in I_0 \\
 & \sum_{j \in J} a_{ij} x_j \geq b_i & & y_i \geq 0, \quad i \in I_+ \\
 & \sum_{j \in J} a_{ij} x_j \leq b_i & & y_i \leq 0, \quad i \in I_- \\
 & x_j \in \mathbb{R} & \sum_{i \in I} a_{ij} y_i = c_j, & j \in J_0 \\
 & x_j \geq 0 & \sum_{i \in I} a_{ij} y_i \leq c_j, & j \in J_+ \\
 & x_j \leq 0 & \sum_{i \in I} a_{ij} y_i \geq c_j, & j \in J_-
 \end{array}$$

V levém sloupci je primární úloha, v prostředním sloupci je z ní vytvořená duální úloha. V pravém sloupci jsou množiny indexů pro obě úlohy: $I = \{1, \dots, m\} = I_0 \cup I_+ \cup I_-$ je indexová množina primárních omezení a duálních proměnných, $J = \{1, \dots, n\} = J_0 \cup J_+ \cup J_-$ je indexová množina primárních proměnných a duálních omezení.

Všimněte si symetrie: i -tému primárnímu omezení $\sum_j a_{ij} x_j \geq b_i$ odpovídá duální proměnná $y_i \geq 0$. Opačně, j -tá primární proměnná $x_j \geq 0$ odpovídá j -tému duálnímu omezení $\sum_i a_{ij} y_i \leq c_j$. Podobně pro ostatní řádky.

Pro speciální tvary LP se dvojice duálních úloh přehledněji napíše v maticové formě. Např. pro $I_0 = I_- = J_0 = J_- = \emptyset$ obdržíme

$$\begin{array}{llll}
 \min & \mathbf{c}^T \mathbf{x} & \max & \mathbf{b}^T \mathbf{y} \\
 \text{za podm.} & \mathbf{Ax} \geq \mathbf{b} & \text{za podm.} & \mathbf{y} \geq \mathbf{0} \\
 & \mathbf{x} \geq \mathbf{0} & & \mathbf{A}^T \mathbf{y} \leq \mathbf{c}
 \end{array} \tag{16.1}$$

16.2 Věty o dualitě

Následující věty platí pro obecný tvar LP, ale důkazy uděláme pouze pro speciální tvar (16.1). V důkazech si všimněte, že $\mathbf{b}^T \mathbf{y} = \mathbf{y}^T \mathbf{b}$ a $\mathbf{A}^T \mathbf{y} \leq \mathbf{c}$ je totéž jako $\mathbf{y}^T \mathbf{A} \leq \mathbf{c}^T$.

Věta 16.1 (o slabé dualitě). Necht' \mathbf{x} je přípustné primární řešení a \mathbf{y} přípustné duální řešení. Pak $\mathbf{c}^T \mathbf{x} \geq \mathbf{b}^T \mathbf{y}$.

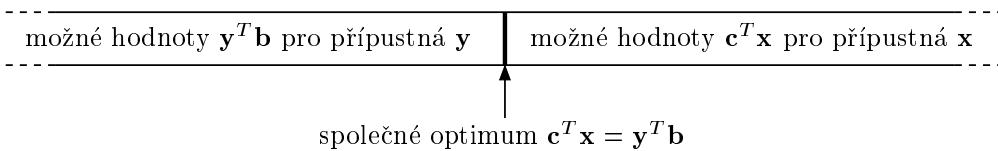
Důkaz. Díky přípustnosti \mathbf{x} a \mathbf{y} platí $\mathbf{y}^T \mathbf{A} \leq \mathbf{c}^T$ a $\mathbf{x} \geq \mathbf{0}$, z čehož plyne $\mathbf{y}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \leq \mathbf{c}^T \mathbf{x}$. Podobně, díky přípustnosti \mathbf{x} a \mathbf{y} platí $\mathbf{A} \mathbf{x} \geq \mathbf{b}$ a $\mathbf{y} \geq \mathbf{0}$, z čehož plyne $\mathbf{y}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \geq \mathbf{y}^T \mathbf{b}$. Z toho

$$\mathbf{c}^T \mathbf{x} \geq \mathbf{y}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \geq \mathbf{y}^T \mathbf{b}. \quad (16.2)$$

□

Věta 16.2 (o silné dualitě). Primární úloha má optimální řešení právě tehdy, když má duální úloha optimální řešení. Má-li primární úloha optimální řešení \mathbf{x} a duální úloha optimální řešení \mathbf{y} , platí $\mathbf{c}^T \mathbf{x} = \mathbf{b}^T \mathbf{y}$.

Důkaz věty o silné dualitě není jednoduchý a vynecháme jej. Věty o slabé a silné dualitě mají jasnou interpretaci: pro přípustná \mathbf{x} a \mathbf{y} není hodnota duální účelové funkce nikdy větší než hodnota primární účelové funkce a tyto hodnoty se potkají ve společném optimu:



Věta 16.3 (o komplementaritě). Necht' \mathbf{x} je přípustné primární řešení a \mathbf{y} přípustné duální řešení. Pak $\mathbf{c}^T \mathbf{x} = \mathbf{b}^T \mathbf{y}$ právě tehdy, když zároveň platí tyto dvě podmínky:

$$y_i \left(\sum_{j \in J} a_{ij} x_j - b_i \right) = 0 \quad \forall i \in I, \quad (16.3a)$$

$$x_j \left(\sum_{i \in I} a_{ij} y_i - c_j \right) = 0 \quad \forall j \in J. \quad (16.3b)$$

Všimněte si, co podmínky (16.3) říkají: na každém řádku ve dvojici duálních úloh je vždy ale spoň jedno omezení aktivní, bud' primární nebo duální (přičemž omezení typu rovnosti bereme vždy za aktivní).

Důkaz. Pro libovolné vektory $\mathbf{u}, \mathbf{v} \geq \mathbf{0}$ platí

$$\forall i (u_i = 0 \text{ nebo } v_i = 0) \iff \forall i (u_i v_i = 0) \iff \mathbf{u}^T \mathbf{v} = 0.$$

Protože \mathbf{x} a \mathbf{y} jsou přípustné, podmínky (16.3) je tedy možno psát jako

$$\mathbf{y}^T (\mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b}) = 0, \quad (16.4a)$$

$$(\mathbf{c}^T - \mathbf{y}^T \mathbf{A}) \mathbf{x} = 0, \quad (16.4b)$$

neboli

$$\mathbf{c}^T \mathbf{x} = \mathbf{y}^T \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{y}^T \mathbf{b}. \quad (16.5)$$

Vztah (16.5) zjevně implikuje $\mathbf{c}^T \mathbf{x} = \mathbf{y}^T \mathbf{b}$. Obráceně, $\mathbf{c}^T \mathbf{x} = \mathbf{y}^T \mathbf{b}$ implikuje (16.5), nebot' jsme dříve ukázali, že pro přípustné \mathbf{x}, \mathbf{y} platí (16.2). □

Příklad 16.1. Mějme dvojici navzájem duálních úloh LP:

$$\begin{array}{ll}
 \min & 2x_1 + 5x_2 + 6x_3 = \mathbf{5.4} \\
 \mathbf{3} = & 2x_1 + x_2 + 2x_3 \geq 3 \\
 \mathbf{2.4} = & x_1 + 2x_2 + 2x_3 \geq 1 \\
 \mathbf{3} = & x_1 + 3x_2 + x_3 \geq 3 \\
 -\mathbf{0.6} = & -x_1 + x_2 - 2x_3 \geq -1 \\
 \mathbf{1.2} = & x_1 \geq 0 \\
 \mathbf{0.6} = & x_2 \geq 0 \\
 \mathbf{0} = & x_3 \geq 0
 \end{array}
 \quad
 \begin{array}{ll}
 \max & 3y_1 + y_2 + 3y_3 - y_4 = \mathbf{5.4} \\
 \mathbf{0.2} = & y_1 \geq 0 \\
 \mathbf{0} = & y_2 \geq 0 \\
 \mathbf{1.6} = & y_3 \geq 0 \\
 \mathbf{0} = & y_4 \geq 0 \\
 \mathbf{2} = & 2y_1 + y_2 + y_3 - y_4 \leq 2 \\
 \mathbf{5} = & y_1 + 2y_2 + 3y_3 + y_4 \leq 5 \\
 \mathbf{2} = & 2y_1 + 2y_2 + y_3 - 2y_4 \leq 6
 \end{array}$$

Spočetli jsme optimální řešení obou úloh a dosadili tato řešení do účelových funkcí a do omezení. Hodnoty optimálních řešení $\mathbf{x}^* = (1.2, 0.6, 0)$ a $\mathbf{y}^* = (0.2, 0, 1.6)$ a hodnoty omezení a účelových funkcí v optimech jsou napsané tučně před/za rovnítky. Dle věty o silné dualitě se optima rovnají. Vezmeme-li libovolný rádek (kromě účelového), je na něm alespoň jedno z obou omezení aktivní. Např. ve druhém řádku je primární omezení $2x_1 + x_2 + 2x_3 \geq 3$ aktivní a duální omezení $y_1 \geq 0$ je neaktivní. Podle věty o komplementaritě se nemůže stát, že by na některém řádku byly obě omezení zároveň neaktivní (mohou být obě ale zároveň aktivní, což zde nenastává, ale může to nastat v případě degenerace). \square

Předložíme-li přípustná primární a duální řešení taková, že se účelové funkce rovnají, dokázali jsme optimalitu obou úloh. Pro velké úlohy to může být nejsnadnější důkaz optimality.

Máme-li duální optimální řešení, jak z něj co nejlevněji spočítat primární optimální řešení? Obecně je k tomu nutno vyřešit soustavu lineárních nerovnic (což není o moc snadnější než vyřešit lineární program). Někdy ale postačí vyřešit soustavu rovnic.

Příklad 16.2. Je dána primární úloha z Příkladu 16.1. Zkuste dokázat bez použití algoritmu na řešení LP, že $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3) = (1.2, 0.6, 0)$ je optimální řešení primární úlohy (přičemž optimální duální řešení \mathbf{y} není zadáno).

Pomocí věty o komplementaritě zkusíme z daného optimálního \mathbf{x} zkusíme spočítat optimální \mathbf{y} . Protože jsou druhé a čtvrté primární omezení neaktivní, z komplementarity plyne $y_2 = y_4 = 0$. Protože $x_1 > 0$ a $x_2 > 0$, z komplementarity musí být první a druhé duální omezení aktivní. Máme tedy soustavu lineárních rovnic

$$\begin{aligned}
 2y_1 + y_3 &= 2 \\
 y_1 + 3y_3 &= 5
 \end{aligned} \tag{16.6}$$

která má jediné řešení $(y_1, y_3) = (0.2, 1.6)$. Tedy $\mathbf{y} = (0.2, 0, 1.6, 0)$. Toto duální řešení je přípustné (tj. splňuje všechna duální omezení). Protože se hodnota primární účelové funkce v bodě \mathbf{x} rovná hodnotě duální účelové funkce v bodě \mathbf{y} , musejí být \mathbf{x} a \mathbf{y} optimální řešení.

Tento postup nemusí vést vždy k cíli. Pokud by duální úloha by měla nekonečně mnoho optimálních řešení, soustava (16.6) by měla nekonečně mnoho řešení (měla by např. více proměnných než neznámých). Z nich by bylo nutno vybrat přípustná duální řešení, tedy $\mathbf{y} \geq \mathbf{0}$. Museli bychom tedy řešit soustavu rovnic a nerovnic. \square

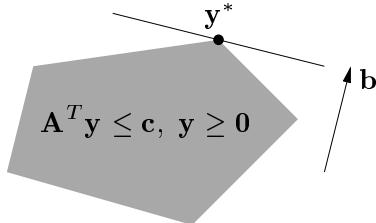
Zkoumejme, jak se změní optimální hodnota úlohy $\min\{\mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{A}\mathbf{x} \geq \mathbf{b}, \mathbf{x} \geq \mathbf{0}\}$, jestliže nepatrнě změníme pravé strany omezení \mathbf{b} . Odpověď je snadno vidět v duálu.

Věta 16.4 (o stínových cenách). Nechť funkce $f: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ je definována jako

$$f(\mathbf{b}) = \min\{ \mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{A}\mathbf{x} \geq \mathbf{b}, \mathbf{x} \geq \mathbf{0} \} = \max\{ \mathbf{b}^T \mathbf{y} \mid \mathbf{A}^T \mathbf{y} \leq \mathbf{c}, \mathbf{y} \geq \mathbf{0} \}.$$

Jestliže má duální úloha pro dané \mathbf{b} jediné optimální řešení \mathbf{y}^* , pak je funkce f v bodě \mathbf{b} diferencovatelná a platí $f'(\mathbf{b}) = \mathbf{y}^{*T}$, neboli $\partial f(\mathbf{b})/\partial b_i = \mathbf{y}_i^*$.

Důkaz. Je-li \mathbf{y}^* duální optimální řešení pro dané \mathbf{b} , je $f(\mathbf{b}) = \mathbf{b}^T \mathbf{y}^*$. Jelikož je toto optimální řešení jediné, nabývá se ve vrcholu polyedru přípustných řešení $\{ \mathbf{y} \in \mathbb{R}^m \mid \mathbf{A}^T \mathbf{y} \leq \mathbf{c}, \mathbf{y} \geq \mathbf{0} \}$, viz obrázek:



Změníme-li nepatrнě \mathbf{b} , optimální duální řešení \mathbf{y}^* se nezmění a zůstane jediné (toto odůvodnění není zcela rigorózní, ale geometricky je dostatečně názorné). Tedy při malé změně vektoru \mathbf{b} je hodnota optima stále rovna $f(\mathbf{b}) = \mathbf{b}^T \mathbf{y}^*$. Derivací získáme $f'(\mathbf{b}) = \mathbf{y}^{*T}$. \square

Zdůrazněme předpoklad jednoznačnosti optimálního řešení. Kdyby množina duálních optimálních řešení byla ne jediný vrchol, ale stěna vyšší dimenze, po malé změně vektoru \mathbf{b} by se optimální stěna mohla stát vrcholem a funkce f by tedy v bodě \mathbf{b} nebyla diferencovatelná.

Protože \mathbf{b} je zároveň vektor pravých stran primární úlohy, optimální duální proměnné \mathbf{y}^* vyjadřují *citlivost* optima primární úlohy na změnu pravých stran primárních omezení $\mathbf{A}\mathbf{x} \geq \mathbf{b}$. Interpretujeme-li naše LP jako optimální výrobní plán (11.6) (pozor, liší se obrácenou nerovností v omezení), pak hodnota y_i^* říká, jak by se nás výdělek zvětšil, kdybychom trochu uvolnili omezení na výrobní zdroje $\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} \leq b_i$. V ekonomii se proto duálním proměnným říká **stínové ceny** primárních omezení.

Všimněte si, že věta o stínových cenách je ve shodě s větou o komplementaritě. Pokud $y_i^* = 0$, je $\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} < b_i$, tedy malá změna b_i nemá na optimum vliv.

Příklad 16.3. Nechť je známo, že duální úloha v Příkladu 16.1 má jediné optimální řešení. Stínová cena prvního primárního omezení $2x_1 + x_2 + 2x_3 \geq 3$ je $y_1 = 0.2$. Změňme pravou stranu $b_1 = 3$ tohoto omezení o malou hodnotu $h = 0.01$ a zkoumejme, jak se změní optimum. Tato změna nezmění argument \mathbf{y}^* duálního optima, pouze jeho hodnotu $\mathbf{b}^T \mathbf{y}^*$. Podle silné duality hodnota primárního optima musí být rovna hodnotě duálního optima (argument \mathbf{x}^* primárního optima se může nějak změnit, to nás ale nezajímá). Dvojice úloh tedy bude vypadat takto:

min $2x_1 + 5x_2 + 6x_3 = \mathbf{5.402}$	max $3.01y_1 + y_2 + 3y_3 - y_4 = \mathbf{5.402}$
$2x_1 + x_2 + 2x_3 \geq 3.01$	$0.2 = y_1 \geq 0$
$x_1 + 2x_2 + 2x_3 \geq 1$	$0 = y_2 \geq 0$
$x_1 + 3x_2 + x_3 \geq 3$	$1.6 = y_3 \geq 0$
$-x_1 + x_2 - 2x_3 \geq -1$	$0 = y_4 \geq 0$
$x_1 \geq 0$	$2 = 2y_1 + y_2 + y_3 - y_4 \leq 2$
$x_2 \geq 0$	$5 = y_1 + 2y_2 + 3y_3 + y_4 \leq 5$
$x_3 \geq 0$	$2 = 2y_1 + 2y_2 + y_3 - 2y_4 \leq 6$

V okolí bodu $\mathbf{b} = (3, 1, 3, -1)$, ve kterém se nemění optimální \mathbf{y}^* , bude $f(\mathbf{b}) = \mathbf{b}^T \mathbf{y}^*$ a tedy hodnota společného optima se změní o $h \cdot \partial f(\mathbf{b})/\partial b_1 = h \cdot y_1 = 0.2 \cdot 0.01$ na 5.402. \square

16.3 Příklady na konstrukci a interpretaci duálních úloh

Dualita umožňuje *vhled* do řešeného problému, často velmi netriviální. Abychom danou úlohu (fyzikální, ekonomickou či jinou) popsanou lineárním programem pochopili do hloubky, je třeba pochopit význam nejen primární úlohy, ale i duální úlohy a jejich vztahu.

Příklad 16.4 (Ekonomická interpretace duality). Vrat'me se k Příkladu 11.5 o výrobci lupínek a hranolků z brambor a oleje. Napišme k této úloze duální úlohu:

$$\begin{array}{ll} \max & 120l + 76h \\ \text{za podm.} & 2l + 1.5h \leq 100 \\ & 0.4l + 0.2h \leq 16 \\ & l \geq 0 \\ & h \geq 0 \end{array} \quad \begin{array}{ll} \min & 100a + 16b \\ \text{za podm.} & a \geq 0 \\ & b \geq 0 \\ & 2a + 0.4b \geq 120 \\ & 1.5a + 0.2b \geq 76 \end{array}$$

Přijde překupník a chce kupit od výrobce jeho zásoby brambor a oleje. Překupník řeší tuto otázku: Jaké nejnižší ceny musí nabídnout, aby mi výrobce své zásoby prodal? Tvrdíme, že toto je význam duální úlohy.

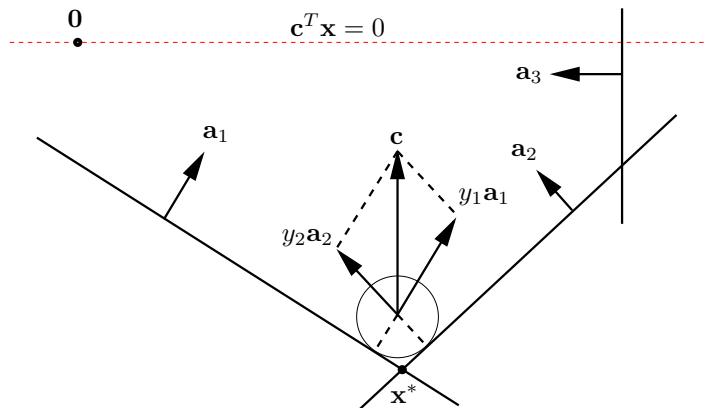
Vskutku, necht' a, b označují nabízenou cenu za jednotku brambor a oleje. Překupník chce minimalizovat celkovou cenu za suroviny $100a + 16b$. Musí být $2a + 0.4b \geq 120$, nebot' jinak by výrobci více vyplatilo vyrobit ze všech brambor a oleje lupínky a prodat je, než prodat suroviny. Ze stejného důvodu musí být $1.5a + 0.2b \geq 76$. Optimální duální řešení je $a = 32$ a $b = 140$.

Toto je další důvod (kromě Věty 16.4), proč se optimálním duálním proměnným někdy říká *stínové ceny* odpovídajících primárních omezení. Např. stínová cena brambor je 32 Kč/kg. \square

Příklad 16.5 (Fyzikální interpretace duality). Uvažujme dvojici duálních úloh

$$\min\{ \mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{A}\mathbf{x} \geq \mathbf{b}, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \} = \max\{ \mathbf{b}^T \mathbf{y} \mid \mathbf{A}^T \mathbf{y} = \mathbf{c}, \mathbf{y} \geq \mathbf{0} \}.$$

Uvažujme následující 'analogový počítač'. Mějme polyedr tvořený třemi poloprostory $\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} \geq b_i$ a vektor \mathbf{c} mířící svisle vzhůru:



Hod'me do polyedru malý míček, na který působí tíhová síla $-\mathbf{c}$. Míček s pozicí \mathbf{x} má potenciální energii $\mathbf{c}^T \mathbf{x}$. Míček se bude pohybovat do té doby, než nalezne místo s nejmenší potenciální energií, což je nejnižší vrchol \mathbf{x}^* . Tedy \mathbf{x}^* je řešením primární úlohy.

V bodě \mathbf{x}^* je míček v klidu a proto pro něj platí rovnováha sil: tíha $-\mathbf{c}$ se vyrovnává silami stěn. Tedy existují skaláry y_i^* tak, že $\mathbf{c} = \sum_i y_i^* \mathbf{a}_i = \mathbf{A}^T \mathbf{y}^*$. Musí být $y_i^* \geq 0$, protože stěny působí silou jen dovnitř polyedru, ne ven.

Pokud $\mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^* > b_i$, míček se i -té stěny nedotýká. V tom případě je síla stěny na míček nutně nulová, $y_i^* = 0$. Proto pro každé i platí $y_i^*(\mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^* - b_i) = 0$, což jsou podmínky (16.3). Dle věty o komplementaritě tedy je $\mathbf{c}^T \mathbf{x}^* = \mathbf{b}^T \mathbf{y}^*$.

To ale říká, že potenciální energie míčku v bodě \mathbf{x}^* je $\mathbf{b}^T \mathbf{y}^*$. Proč tomu tak je? Tato energie se rovná práci, která by se vykonala posunutím míčku do počátku $\mathbf{0}$. Posunujme míček takto: nejdříve posuneme první stěnu rovnoběžně tak, aby procházela počátkem, pak druhou stěnu, až budou všechny stěny, kterých se míček dotýká, procházet počátkem. Při tomto posunování se síly stěn působící na míček nemění. Vzdálenost stěny i od počátku je $b_i / \|\mathbf{a}_i\|_2$ (viz Cvičení 5.18). Síla stěny i působící na míček je $y_i^* \mathbf{a}_i$. Síla je ve směru posouvání, tedy vykonaná práce je $(b_i / \|\mathbf{a}_i\|_2) \cdot \|y_i^* \mathbf{a}_i\|_2 = b_i y_i^*$. Po odtlačení všech stěn, jichž se míček dotýká, do počátku, tedy vykonáme práci $\sum_i b_i y_i^* = \mathbf{b}^T \mathbf{y}^*$.

Zdůrazněme, že tato úvaha *nedokazuje* žádnou z vět o dualitě. Předpokládá totiž platnost fyzikálních zákonů, které nelze matematicky dokázat ale pouze experimentálně pozorovat. \square

Příklad 16.6. Mějme úlohu

$$\min\{\mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{1}^T \mathbf{x} = 1, \mathbf{x} \geq \mathbf{0}\} = \min\left\{\sum_{i=1}^n c_i x_i \mid \sum_{i=1}^n x_i = 1, x_i \geq 0\right\},$$

kde $\mathbf{c} = (c_1, \dots, c_n)$ je dáno a optimalizuje se přes $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$. Napište duální úlohu a interpretujte věty o silné dualitě a komplementaritě.

Úvahou snadno vidíme (viz Příklad 11.2), že optimální hodnota je $\min_{i=1}^n c_i$ a nabývá se ve vektoru \mathbf{x} jehož všechny složky jsou nulové kromě složek příslušných minimálnímu c_i . Pokud je více minimálních prvků c_i , optimální \mathbf{x} není dáno jednoznačně. Např. pro $\mathbf{c} = (1, 3, 1, 2)$ bude optimálním řešením každé $\mathbf{x} = (x_1, 0, x_3, 0)$ pro $x_1, x_3 \geq 0$ splňující $x_1 + x_3 = 1$.

Podle návodu na konstrukci duální úlohy dostaneme duál

$$\max\{y \in \mathbb{R} \mid y \mathbf{1} \leq \mathbf{c}\} = \max\{y \in \mathbb{R} \mid y \leq c_i, i = 1, \dots, n\}.$$

Neboli hledá se největší číslo y , které je menší než všechna čísla c_i . Takové číslo y se rovná minimu z čísel c_i . Tedy platí silná dualita.

Podmínky komplementarity říkají, že v optimech bude alespoň jedno z odpovídající dvojice primární-duální omezení aktivní. Dvojice omezení $\sum_i x_i = 1, y \in \mathbb{R}$ splňuje podmínky komplementarity triviálně. Dvojice omezení $x_i \geq 0, y \leq c_i$ je splňuje právě tehdy, když je splněna aspoň jedna z rovností $x_i = 0, y = c_i$. To znamená:

- Pokud je v duálu $y < c_i$, v primáru musí být $x_i = 0$. To je ale jasné, protože $y < c_i$ znamená, že c_i není nejmenší ze složek vektoru \mathbf{c} a tudíž (dle úvahy výše) mu v primáru nemůžeme přiřadit nenulovou váhu x_i .
- Obráceně, pokud je v primáru $x_i > 0$, musí být v duálu $y = c_i$. To je jasné, protože pokud jsme v primáru přiřadili číslu c_i nenulovou váhu, musí být nejmenší. \square

Příklad 16.7. Z §11.3 víme, že optimální argument úlohy

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}} \sum_{i=1}^n |x - a_i| &= \min\left\{\sum_{i=1}^n z_i \mid z_i \in \mathbb{R}, x \in \mathbb{R}, -z_i \leq x - a_i \leq z_i\right\} \\ &= \min\{\mathbf{1}^T \mathbf{z} \mid \mathbf{z} \in \mathbb{R}^n, x \in \mathbb{R}, -\mathbf{z} \leq \mathbf{1}x - \mathbf{a} \leq \mathbf{z}\} \end{aligned} \quad (16.7)$$

je medián z čísel a_1, \dots, a_n . Napište duální úlohu a co nejvíce ji zjednodušte. Úvahou nalezněte optimální hodnotu primární a duální úlohy a ověřte, že se (dle silné duality) rovnají.

Ryclý způsob jak vytvořit duální úlohu je podle předpisu v §16.1, to ovšem vyžaduje zkušenosť a snadno se v tom udělá chyba. Zdlouhavější avšak bezpečnější způsob je přes maticovou formu. Primární a duální úlohu napišeme v maticovém tvaru, kde zvolíme názvy matic tak, aby nekolidovaly s (16.7):

$$\begin{array}{ll} \min & \mathbf{h}^T \mathbf{u} \\ \text{za podm.} & \mathbf{F}\mathbf{u} \geq \mathbf{g} \\ & \mathbf{u} \in \mathbb{R}^{1+n} \end{array} \quad \begin{array}{ll} \max & \mathbf{g}^T \mathbf{v} \\ \text{za podm.} & \mathbf{v} \geq \mathbf{0} \\ & \mathbf{F}^T \mathbf{v} = \mathbf{h} \end{array}$$

Matice zvolíme tak, aby primární úloha odpovídala úloze (16.7):

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{I} \\ -\mathbf{1} & \mathbf{I} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{g} = \begin{bmatrix} \mathbf{a} \\ -\mathbf{a} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{h} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{1} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u} = \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{z} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{v} = \begin{bmatrix} \mathbf{p} \\ \mathbf{q} \end{bmatrix}.$$

Vektor duálních proměnných \mathbf{v} jsme zároveň rozdělili na dva bloky \mathbf{p}, \mathbf{q} , odpovídající blokům matic \mathbf{F} a \mathbf{g} . Vynásobním matic přepíšeme duální úlohu do tvaru (ověřte!)

$$\begin{aligned} & \max \{ \mathbf{a}^T(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \mid \mathbf{1}^T(\mathbf{p} - \mathbf{q}) = 0, \mathbf{p} + \mathbf{q} = \mathbf{1}, \mathbf{p} \geq \mathbf{0}, \mathbf{q} \geq \mathbf{0} \} \\ &= \max \left\{ \sum_{i=1}^n a_i(p_i - q_i) \mid \sum_{i=1}^n (p_i - q_i) = 0, p_i + q_i = 1, p_i \geq 0, q_i \geq 0 \right\} \end{aligned} \quad (16.8)$$

Úlohu (16.8) lze dále zjednodušit substitucí

$$2p_i = 1 + t_i, \quad 2q_i = 1 - t_i.$$

Po této substituci je $p_i - q_i = t_i$ a podmínka $p_i + q_i = 1$ je splněna automaticky. Podmínka $\sum_i (p_i - q_i) = 0$ odpovídá podmínce $\sum_i t_i = 0$. Podmínka $p_i \geq 0$ odpovídá $t_i \geq -1$ a podmínka $q_i \geq 0$ odpovídá $t_i \leq 1$. Duální úloha s novými proměnnými $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^n$ je tedy

$$\max \left\{ \sum_{i=1}^n a_i t_i \mid \sum_{i=1}^n t_i = 0, -1 \leq t_i \leq 1 \right\} = \max \{ \mathbf{a}^T \mathbf{t} \mid \mathbf{1}^T \mathbf{t} = 0, -\mathbf{1} \leq \mathbf{t} \leq \mathbf{1} \}. \quad (16.9)$$

Primární úloha (16.7) a duální úloha (16.9) spolu zdánlivě vůbec nesouvisejí – avšak podle silné duality jejich optimální hodnoty musí být stejné! Zkusme pochopit, proč tomu tak je.

Nejprve si všimneme, že optimální hodnota primární úlohy (16.7) se nezmění, posuneme-li čísla a_1, \dots, a_n o libovolnou konstantu $b \in \mathbb{R}$. To je jasné, neboť medián x se posune o stejnou konstantu a je $|(x - b) - (a_i - b)| = |x - a_i|$. Totéž platí pro duální úlohu (16.9), neboť díky podmínce $\sum_i t_i = 0$ je $\sum_i (a_i - b)t_i = \sum_i a_i t_i$. Proto bez ztráty obecnosti můžeme zvolit $b = \text{median}_i a_i$, neboli posunout body tak, že jejich medián bude $x = 0$.

Nyní je primární optimální hodnota rovna jednoduše $\sum_i |x - a_i| = \sum_i |a_i|$. Protože kladných a záporných čísel a_i je stejný počet, duální úloha nabývá optima v takovém vektoru \mathbf{t} , kde $t_i = -1$ pro $a_i < 0$ a $t_i = 1$ pro $a_i > 0$ (což splňuje podmínu $\sum_i t_i = 0$). Tedy duální optimální hodnota je také $\sum_i a_i t_i = \sum_i |a_i|$. \square

16.4 Cvičení

- 16.1. Ukažte pro dvojici úloh v §16.1, že duál duálu se rovná původní úloze.
- 16.2. Napište duální úlohu a podmínky komplementarity k následujícím úlohám. Pokud úloha není LP, nejdříve převeděte na LP (dle §11.1). Výslednou duální úlohu co nejvíce zjednodušte, příp. převeděte do skalární formy, je-li skalární forma výstižnější.
- $\min_{x \in \mathbb{R}} \max_{i=1}^n |a_i - x|$ (střed intervalu)
 - úloha (11.11)
 - úloha (11.13)
 - dopravní problém (11.8)
 - všechny úlohy ze Cvičení 11.2
 - úloha vzniklá ve Cvičení 11.8
 - $\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \max_{i=1}^m (\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} + b_i)$ (viz §11.1.1)

(*) Pro každou úlohu se pokuste nalézt význam duální úlohy, podobně jako v Příkladu 16.6.

- 16.3. Dokažte bez užití algoritmu na řešení LP, že $\mathbf{x} = (1, 1, 1, 1)$ je optimální řešení úlohy

$$\begin{aligned} \min & [47 \quad 93 \quad 17 \quad -93] \mathbf{x} \\ \text{za podm.} & \begin{bmatrix} -1 & -6 & 1 & 3 \\ -1 & -2 & 7 & 1 \\ 0 & 3 & -10 & -1 \\ -6 & -11 & -2 & 12 \\ 1 & 6 & -1 & -3 \end{bmatrix} \mathbf{x} \leq \begin{bmatrix} -3 \\ 5 \\ -8 \\ -7 \\ 4 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Nápověda a řešení

- 16.1. Pravou úlohu nejdříve převedeme na tvar levé úlohy a pak k ní napíšeme duální úlohu. Ukážeme jen pro tvar (16.1):

$$\begin{array}{ll} -\min & (-\mathbf{b})^T \mathbf{y} \\ \text{za podm.} & (-\mathbf{A}^T) \mathbf{y} \geq -\mathbf{c} \\ & \mathbf{y} \geq \mathbf{0} \end{array} \quad \begin{array}{ll} -\max & (-\mathbf{c})^T \mathbf{x} \\ \text{za podm.} & \mathbf{x} \geq \mathbf{0} \\ & (-\mathbf{A}) \mathbf{x} \leq -\mathbf{b} \end{array} \quad (16.10)$$

Levá úloha (16.10) je ekvivalentní pravé úloze (16.1), pravá úloha (16.10) je ekvivalentní levé úloze (16.1).

16.2.d) $\max \left\{ \sum_{i=1}^m a_i p_i + \sum_{j=1}^n b_j q_j \mid p_i \in \mathbb{R}, q_i \in \mathbb{R}, p_i + q_j \leq c_{ij} \right\}$

16.2.f) Duál: $\max \left\{ \sum_{i=1}^n y_i d_i + \sum_{i=1}^{n'} y'_i d'_i \mid \sum_{i=1}^n y_i = \sum_{i=1}^{n'} y'_i, y_i \leq m_i, y'_i \leq m'_i, y_i, y'_i \geq 0 \right\}$.
Podmínky komplementarity: $z_i(y_i - m_i) = 0, z'_i(y'_i - m'_i) = 0, (z_i - d_i - x)y_i = 0, (z'_i - d'_i + x)y'_i = 0$.

Kapitola 17

Lagrangeova dualita

Zatímco v §16 jsme odvodili dualitu pro lineární programování, zde popišeme základ teorie duality pro obecné optimalizační úlohy. Dualita v LP se pak bude jevit jako speciální případ.

17.1 Minimaxní nerovnost

Pro libovolné množiny X a Y a libovolnou funkci $L: X \times Y \rightarrow \mathbb{R}$ platí **minimaxní nerovnost**

$$\underbrace{\min_{x \in X} \max_{y \in Y} L(x, y)}_{F(x)} \geq \max_{y \in Y} \underbrace{\min_{x \in X} L(x, y)}_{G(y)}. \quad (17.1)$$

Zde předpokládáme, že všechna minima a maxima existují¹. V nerovnosti (17.1) nastává rovnost právě tehdy, když existuje bod $(x^*, y^*) \in X \times Y$ takový, že

$$L(x^*, y) \leq L(x^*, y^*) \leq L(x, y^*) \quad \forall x \in X, y \in Y. \quad (17.2)$$

Takovému bodu (x^*, y^*) říkáme **sedlový bod** funkce L na $X \times Y$.

Uvedené skutečnosti se snadno dokáží, podrobné důkazy vynecháme. Pro důkaz druhého tvrzení je užitečné si uvědomit, že podmínu (17.2) lze psát jako $F(x^*) = G(y^*)$.

Příklad 17.1. Necht' $X = Y = \{1, 2, 3, 4\}$.

	1	2	3	4	$F(x)$		1	2	3	4	$F(x)$
1	-1	4	7	4	7	1	-1	4	7	4	7
2	4	4	6	-2	6	2	4	4	6	-2	6
3	1	5	3	3	5	3	1	0	3	3	3
4	3	5	3	2	5	4	3	3	3	2	3
$G(y)$	-1	4	3	-2		$G(y)$	-1	0	3	-2	

Funkce L v levé tabulce nemá sedlový bod a máme $\min_{x \in X} F(x) > \max_{y \in Y} G(y)$. Funkce L v pravé tabulce má sedlový bod (dokonce dva, v rámečcích) a $\min_{x \in X} F(x) = \max_{y \in Y} G(y)$. \square

¹Kdyby ne, mohli bychom min/max nahradit inf/sup a nerovnost by stále platila.

17.2 Lagrangeova duální úloha

Ke každé optimalizační úloze (kterou nazýváme primární) lze sestrojit jinou optimalizační úlohu (nazývanou duální) tak, že mezi nimi platí více či méně užitečné vztahy. Jedna forma duality se získá následovně: chytře zvolíme množiny X, Y a funkci L tak, aby levá strana minimaxní nerovnosti (17.1) byla primární (tedy původní) úloha. Pravá strana pak bude duální úloha.

Nechť množina $X \subseteq \mathbb{R}^n$, funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ a zobrazení $\mathbf{g}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ jsou dány; jak dále uvidíme, reprezentují primární úlohu. Zvolme $Y = \mathbb{R}_+^m$ a

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = f(\mathbf{x}) + \mathbf{y}^T \mathbf{g}(\mathbf{x}). \quad (17.3)$$

Podívejme se, jak po této volbě vypadá levá strana nerovnosti (17.1), tedy primární úloha. Je

$$F(\mathbf{x}) = \max_{\mathbf{y} \in Y} L(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \max_{\mathbf{y} \geq \mathbf{0}} [f(\mathbf{x}) + \mathbf{y}^T \mathbf{g}(\mathbf{x})] = \begin{cases} f(\mathbf{x}) & \text{když } \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}, \\ \infty & \text{jinak,} \end{cases} \quad (17.4)$$

kde ‘ ∞ ’ značí, že úloha $\max_{\mathbf{y} \in Y} L(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ je neomezená. Abyste to uviděli, promyslete si, že pro každý vektor $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^m$ platí

$$\max_{\mathbf{y} \geq \mathbf{0}} \mathbf{y}^T \mathbf{a} = \begin{cases} 0 & \text{když } \mathbf{a} \leq \mathbf{0}, \\ \infty & \text{jinak.} \end{cases}$$

Po dosazení (17.4) do levé strany (17.1) tedy

$$\min_{\mathbf{x} \in X} \max_{\mathbf{y} \in Y} L(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \min \{ f(\mathbf{x}) \mid \mathbf{x} \in X, \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0} \}. \quad (17.5)$$

Toto je naše primární úloha. Všimněme si, jak jsme omezující podmínky $\mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}$ zahrnuli do funkce F za cenu, že funkce F může nabývat i nekonečných hodnot.

Nyní se podívejme na duální úlohu. Ta zní

$$\max_{\mathbf{y} \in Y} \min_{\mathbf{x} \in X} L(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \max_{\mathbf{y} \geq \mathbf{0}} G(\mathbf{y}), \quad (17.6)$$

kde

$$G(\mathbf{y}) = \min_{\mathbf{x} \in X} L(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \min_{\mathbf{x} \in X} [f(\mathbf{x}) + \mathbf{y}^T \mathbf{g}(\mathbf{x})]. \quad (17.7)$$

Přesnější tvar duální úlohy nezískáme, dokud nebudeš mít zadánu primární úlohu (tedy X, f, \mathbf{g}) konkrétněji. Nyní můžeme říci jen to, že úloha (17.7) může být pro nějaká \mathbf{y} neomezená a tedy funkce G nabývat hodnot $-\infty$. To bude opět reprezentovat omezení duální úlohy.

Všimněte si, že pro každé \mathbf{x} je funkce L affinní funkcí proměnné \mathbf{y} . Dle Věty 14.6 je tedy duální funkce G konkávní a tedy duální úloha bude maximalizace konkávní funkce, tedy konvexní úloha. To platí vždy, i když primární úloha není konvexní.

Právě sestrojená úloha (17.6) se nazývá **Lagrangeova duální úloha** k (primární) úloze (17.5). Funkce (17.3) se říká Lagrangeova funkce – všimněte si, že je to ta samá funkce, kterou jste potkali u metody Lagrangeových multiplikátorů.

17.3 Silná dualita

Z nerovnosti (17.1) plyne, že optimální hodnota primární úlohy není menší než optimální hodnota duální úlohy. Tato skutečnost je známa jako věta o **slabé dualitě**. Rozdílu mezi primární a duální optimální hodnotou se říká **dualitní mezera**. Když v nerovnosti (17.1) nastane rovnost, jsou si optimální hodnoty primární a duální úlohy rovny neboli dualitní mezera je nulová. V tom případě říkáme, že pro naši úlohu platí **silná dualita**.

Silná dualita může platit pro velice různé úlohy. Uvedeme nyní, ve Větě 17.1, jednu postačující (avšak nikoliv nutnou) podmínsku, za které platí silná dualita.

Řekneme, že funkce $g_1, \dots, g_m: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ na množině X splňují *Slaterovu podmínsku*, když existuje vnitřní bod \mathbf{x} množiny X takový, že $\mathbf{g}(\mathbf{x}) < \mathbf{0}$, neboli

$$g_1(\mathbf{x}) < 0, \dots, g_m(\mathbf{x}) < 0. \quad (17.8)$$

Pokud je prvních $k \leq m$ funkcí g_i affinních, podmínsku (17.8) lze změknit na

$$g_1(\mathbf{x}) \leq 0, \dots, g_k(\mathbf{x}) \leq 0, g_{k+1}(\mathbf{x}) < 0, \dots, g_m(\mathbf{x}) < 0. \quad (17.9)$$

Věta 17.1. Necht'

- množina $X \subseteq \mathbb{R}^n$ je konvexní,
- funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ a $g_1, \dots, g_m: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ jsou konvexní na X ,
- funkce g_1, \dots, g_m na množině X splňují Slaterovu podmínsku.

Pak platí silná dualita, neboli optimální hodnoty úloh (17.5) a (17.6) jsou si rovny.

Dále uvedeme obdobu věty o komplementaritě.

Věta 17.2. Necht' $\mathbf{x} \in X$ je optimum primární úlohy a $\mathbf{y} \in \mathbb{R}_+^m$ je optimum duální úlohy a nastává silná dualita. Pak platí podmínky komplementarity

$$y_i g_i(x_i) = 0 \quad \forall i = 1, \dots, n. \quad (17.10)$$

Důkaz. Platí

$$F(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) = G(\mathbf{y}) = \min_{\mathbf{x}' \in X} [f(\mathbf{x}') + \mathbf{y}\mathbf{g}(\mathbf{x}')] \leq f(\mathbf{x}) + \mathbf{y}^T \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x}).$$

Druhá rovnost plyne ze silné duality. Třetí rovnost je definice duální úlohy. První nerovnost plyne z definice minima. Druhá nerovnost platí, protože $\mathbf{y} \geq \mathbf{0}$ a $\mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}$.

Ale protože $f(\mathbf{x})$ je na začátku i na konci řetězce nerovností, musí obě nerovnosti být rovnostmi, $f(\mathbf{x}) + \mathbf{y}^T \mathbf{g}(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x})$. Z toho plyne

$$\mathbf{y}^T \mathbf{g}(\mathbf{x}) = 0. \quad (17.11)$$

To je ale ekvivalentní podmínskám (17.10), protože $\mathbf{y} \geq \mathbf{0}$ a $\mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}$. \square

17.4 Příklady

Příklad 17.2. Necht' $f(\mathbf{x}) = \mathbf{c}^T \mathbf{x}$, $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}$, $X = \mathbb{R}^n$. Primární úloha je

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \max_{\mathbf{y} \geq \mathbf{0}} L(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \min\{ \mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{A}\mathbf{x} \geq \mathbf{b} \}. \quad (17.12)$$

Odvodíme duální úlohu. Lagrangeova funkce je

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{c}^T \mathbf{x} + \mathbf{y}^T (\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}) = (\mathbf{c}^T - \mathbf{y}^T \mathbf{A})\mathbf{x} + \mathbf{y}^T \mathbf{b}, \quad (17.13)$$

tedy

$$G(\mathbf{y}) = \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} L(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \begin{cases} \mathbf{y}^T \mathbf{b} & \text{když } \mathbf{c}^T - \mathbf{y}^T \mathbf{A} = \mathbf{0}, \\ \infty & \text{jinak.} \end{cases}$$

Duální úloha tedy je

$$\max_{\mathbf{y} \geq \mathbf{0}} G(\mathbf{y}) = \max\{ \mathbf{b}^T \mathbf{y} \mid \mathbf{y} \in \mathbb{R}^m, \mathbf{A}^T \mathbf{y} = \mathbf{c}, \mathbf{y} \geq \mathbf{0} \}. \quad (17.14)$$

To je stejný výsledek, jaký bychom dostali podle návodu v §16.1 na konstrukci duálního LP. Konkrétně, primární a duální úloha je dvojice úloh (16.1). \square

Příklad 17.3. Necht' $f(\mathbf{x}) = \mathbf{c}^T \mathbf{x}$, $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}$, $X = \mathbb{R}_+^n$. Primární úloha je

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}_+^n} \max_{\mathbf{y} \geq \mathbf{0}} L(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \min\{ \mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{A}\mathbf{x} \geq \mathbf{b}, \mathbf{x} \geq \mathbf{0} \}. \quad (17.15)$$

Lagrangeova funkce je (17.13). Je

$$G(\mathbf{y}) = \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}_+^n} L(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \begin{cases} \mathbf{y}^T \mathbf{b} & \text{když } \mathbf{c}^T - \mathbf{y}^T \mathbf{A} \geq 0, \\ -\infty & \text{jinak.} \end{cases}$$

Duální úloha tedy je

$$\max_{\mathbf{y} \geq \mathbf{0}} G(\mathbf{y}) = \max\{ \mathbf{b}^T \mathbf{y} \mid \mathbf{A}^T \mathbf{y} \leq \mathbf{c}, \mathbf{y} \geq \mathbf{0} \}. \quad (17.16)$$

To je opět stejný výsledek, jaký bychom dostali podle návodu v §16.1. \square

Zatím jsme v primární úloze uvažovali jen omezení typu nerovnosti. Omezení typu rovnosti $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ lze nahradit dvěma omezeními typu nerovnosti $\mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}$ a $-\mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}$. Pak

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{y}_+, \mathbf{y}_-) = f(\mathbf{x}) + \mathbf{y}_+^T \mathbf{g}(\mathbf{x}) - \mathbf{y}_-^T \mathbf{g}(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) + (\mathbf{y}_+ - \mathbf{y}_-)^T \mathbf{g}(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) + \mathbf{y}^T \mathbf{g}(\mathbf{x}), \quad (17.17)$$

kde jsme označili $\mathbf{y} = \mathbf{y}_+ - \mathbf{y}_-$. Funkci (17.17) můžeme nyní přejmenovat na $L(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, která má stejný tvar jako (17.3). Podmínky $\mathbf{y}_+, \mathbf{y}_- \geq \mathbf{0}$ se v rozdílu zruší, tedy $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$. Ověříme, že

$$F(\mathbf{x}) = \max_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m} L(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \begin{cases} f(\mathbf{x}) & \text{když } \mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}, \\ \infty & \text{jinak,} \end{cases}$$

tedy primární úloha je

$$\min_{\mathbf{x} \in X} \max_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m} L(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \min\{ f(\mathbf{x}) \mid \mathbf{x} \in X, \mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \}, \quad (17.18)$$

jak jsme chtěli. Duální úloha je

$$\max_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m} \min_{\mathbf{x} \in X} L(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \max_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m} G(\mathbf{y}). \quad (17.19)$$

Všimněte si, že Slaterova podmínka nebude platit, když zobrazení \mathbf{g} nebude afinní.

Příklad 17.4. Napišme duální úlohu k úloze

$$\min\{ \mathbf{x}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{Ax} = \mathbf{b} \}.$$

Máme $X = \mathbb{R}^n$ a

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{x}^T \mathbf{x} + \mathbf{y}^T (\mathbf{b} - \mathbf{Ax}) = \mathbf{x}^T \mathbf{x} - \mathbf{y}^T \mathbf{Ax} + \mathbf{y}^T \mathbf{b},$$

duální funkce je tedy

$$G(\mathbf{y}) = \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} L(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} (\mathbf{x}^T \mathbf{x} - \mathbf{y}^T \mathbf{Ax} + \mathbf{y}^T \mathbf{b}).$$

Řešení musí splňovat $\partial L(\mathbf{x}, \mathbf{y}) / \partial \mathbf{x} = \mathbf{0}$, což dá $\mathbf{x} = \mathbf{A}^T \mathbf{y} / 2$. Po dosazení dostaneme

$$G(\mathbf{y}) = L(\mathbf{A}^T \mathbf{y} / 2, \mathbf{y}) = \mathbf{b}^T \mathbf{y} - \mathbf{y}^T \mathbf{A} \mathbf{A}^T \mathbf{y} / 4. \quad \square$$

Příklad 17.5. Řešme lineární program

$$\min\{ \mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \mathbf{0} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{1} \}.$$

Duál bychom mohli sestrojit podle návodu v kapitole o dualitě v LP. Ale postupujme jinak. Zvolme Lagrangeovu funkci jako (17.12) a $X = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{0} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{1} \}$. Duální funkce bude

$$G(\mathbf{y}) = \min_{\mathbf{x} \in X} L(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \min_{\mathbf{0} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{1}} [(\mathbf{c}^T - \mathbf{y}^T \mathbf{A}) \mathbf{x} + \mathbf{y}^T \mathbf{b}] = \mathbf{b}^T \mathbf{y} + \mathbf{1}^T \max\{\mathbf{0}, \mathbf{A}^T \mathbf{y} - \mathbf{c}\}$$

neboť $\min_{\mathbf{0} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{1}} \mathbf{d}^T \mathbf{x} = \min\{\mathbf{0}, \mathbf{d}\} = -\max\{\mathbf{0}, -\mathbf{d}\}$ (kde min a max se rozumí po složkách). \square

Příklad 17.6. Řešme celočíselný lineární program

$$\min\{ \mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in \{0, 1\}^n, \mathbf{Ax} = \mathbf{b} \}.$$

Necht' Lagrangeova funkce je (17.12) a necht' $X = \{0, 1\}^n$. Duální úloha je stejná jako v minulém příkladě. Zde předpoklady Věty 17.1 neplatí, protože množina X není konvexní. Opravdu, silná dualita u celočíselného programování obecně neplatí. \square

Silná dualita může nastat (i když spíše vyjímečně) i pro nekonvexní úlohu. Jednou takovou třídou úloh je libovolné (tedy ne nutně konvexní) QCQP s nejvýše jedním omezením.

Příklad 17.7. Úloha QCQP

$$\min\{ \mathbf{x}^T \mathbf{Ax} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{x}^T \mathbf{x} = 1 \} \quad (17.20)$$

není konvexní, pokud matice \mathbf{A} není pozitivně semidefinitní. Řešení ale najdeme snadno pomocí spektrálního rozkladu:

$$\min_{\mathbf{x}^T \mathbf{x}=1} \mathbf{x}^T \mathbf{Ax} = \min_{\mathbf{x}^T \mathbf{x}=1} \mathbf{x}^T \mathbf{V} \mathbf{\Lambda} \mathbf{V}^T \mathbf{x} = \min_{\mathbf{z}^T \mathbf{z}=1} \mathbf{z}^T \mathbf{\Lambda} \mathbf{z} = \lambda_{\min}(\mathbf{A}).$$

Ukážeme navíc, že platí silná dualita. Máme

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{x}^T \mathbf{Ax} + y(1 - \mathbf{x}^T \mathbf{x}) = \mathbf{x}^T (\mathbf{A} - y\mathbf{I}) \mathbf{x} + y.$$

Tedy

$$G(y) = \begin{cases} y & \text{když } \mathbf{A} - y\mathbf{I} \text{ je pozitivně semidefinitní,} \\ -\infty & \text{jinak.} \end{cases}$$

Ale matice $\mathbf{A} - y\mathbf{I}$ je pozitivně semidefinitní právě tehdy, když nejmenší vlastní číslo matice $\mathbf{A} - y\mathbf{I}$ je nezáporné, neboli (viz Cvičení 6.4) $\lambda_{\min}(\mathbf{A}) \geq y$. Duální úloha tedy je

$$\max\{ y \in \mathbb{R} \mid \lambda_{\min}(\mathbf{A}) \geq y \}.$$

Ta má očividně optimální řešení $y = \lambda_{\min}(\mathbf{A})$. \square