

# 5th Semester

- [M5170 Matematické programování](#)
  - [Konvexní množiny](#)
  - [Oddělování konvexních množin](#)
  - [Konvexní funkce](#)
  - [Subgradient a subdiferenciál a Fenchelova transformace](#)
  - [Numerické metody v R](#)
  - [Numerické metody v  \$\mathbb{R}^n\$](#)
  - [Nutné a postačující podmínky optimality](#)
  - [Duální úloha](#)
  - [Analýza citlivosti](#)
- [M5120 Lineární statistické modely](#)
  - [2. cvičení](#)
  - [3. cvičení](#)
  - [4. cvičení](#)
  - [5. cvičení](#)
  - [7. cvičení](#)
  - [9. cvičení](#)
  - [10. cvičení](#)

# M5170 Matematické programování

# Konvexní množiny

```

 $\xdef\scal#1#2{\langle #1, #2 \rangle}$ 
 $\xdef\norm#1{\left\| \text{#1} \right\|}$ 
 $\xdef\dist{\rho}$ 
 $\xdef\and{\&}$ 
 $\xdef\brackets#1{\left\{ #1 \right\}}$ 
 $\xdef\parc#1#2{\frac {\partial #1}{\partial #2}}$ 
 $\xdef\mtr#1{\begin{pmatrix} #1 \end{pmatrix}}$ 
 $\xdef\bm#1{\boldsymbol{#1}}$ 
 $\xdef\mc#1{\mathcal{#1}}$ 
 $\xdef\vv#1{\mathbf{#1}}$ 
 $\xdef\vvp#1{\pmb{#1}}$ 
 $\xdef\ve{\varepsilon}$ 
 $\xdef\l{\lambda}$ 
 $\xdef\th{\vartheta}$ 
 $\xdef\alpha{\alpha}$ 
 $\xdef\tagged#1{(\text{#1})}$ 
 $\xdef\tagged*#1{\text{#1}}$ 
 $\xdef\tagEqHere#1#2{\href{#2\#eq-#1}{(\text{#1})}}$ 
 $\xdef\tagDeHere#1#2{\href{#2\#de-#1}{\text{#1}}}$ 
 $\xdef\tagEq#1{\href{\#eq-#1}{(\text{#1})}}$ 
 $\xdef\tagDe#1{\href{\#de-#1}{\text{#1}}}$ 
 $\xdef\T#1{\htmlId{eq-#1}{#1}}$ 
 $\xdef\D#1{\htmlId{de-#1}{\vv{#1}}}$ 
 $\xdef\conv#1{\mathrm{conv}\, , #1}$ 
 $\xdef\cone#1{\mathrm{cone}\, , #1}$ 
 $\xdef\aff#1{\mathrm{aff}\, , #1}$ 
 $\xdef\lin#1{\mathrm{Lin}\, , #1}$ 
 $\xdef\span#1{\mathrm{span}\, , #1}$ 
 $\xdef\O{\mathcal O}$ 
 $\xdef\ri#1{\mathrm{ri}\, , #1}$ 
 $\xdef\rd#1{\mathrm{r}\partial\, , #1}$ 
 $\xdef\interior#1{\mathrm{int}\, , #1}$ 
 $\xdef\proj{\Pi}$ 
 $\xdef\epi#1{\mathrm{epi}\, , #1}$ 
 $\xdef\grad#1{\mathrm{grad}\, , #1}$ 
 $\xdef\hess#1{\nabla^2\, , #1}$ 
 $\xdef\subdif#1{\partial #1}$ 
 $\xdef\co#1{\mathrm{co}\, , #1}$ 
 $\xdef\iter#1{\wedge^{[#1]}}$ 

```

## Definice $\mathcal{D}\{1.1\}$ (Konvexní množina)

Nechť  $X \subseteq \mathbb{R}^n$ . Množina  $X$  se nazývá **konvexní**, jestliže pro všechna  $x_1, x_2 \in X$  a pro každé  $\lambda \in [0,1]$  platí  $\lambda x_1 + (1 - \lambda) x_2 \in X$   $\tag{KM}$

„ Speciálně prázdnou množinu  $\emptyset$  považujeme za **konvexní**

## Operace nad konvexními množinami

Mějme  $X_i, i \in I$  konvexní množiny. Potom

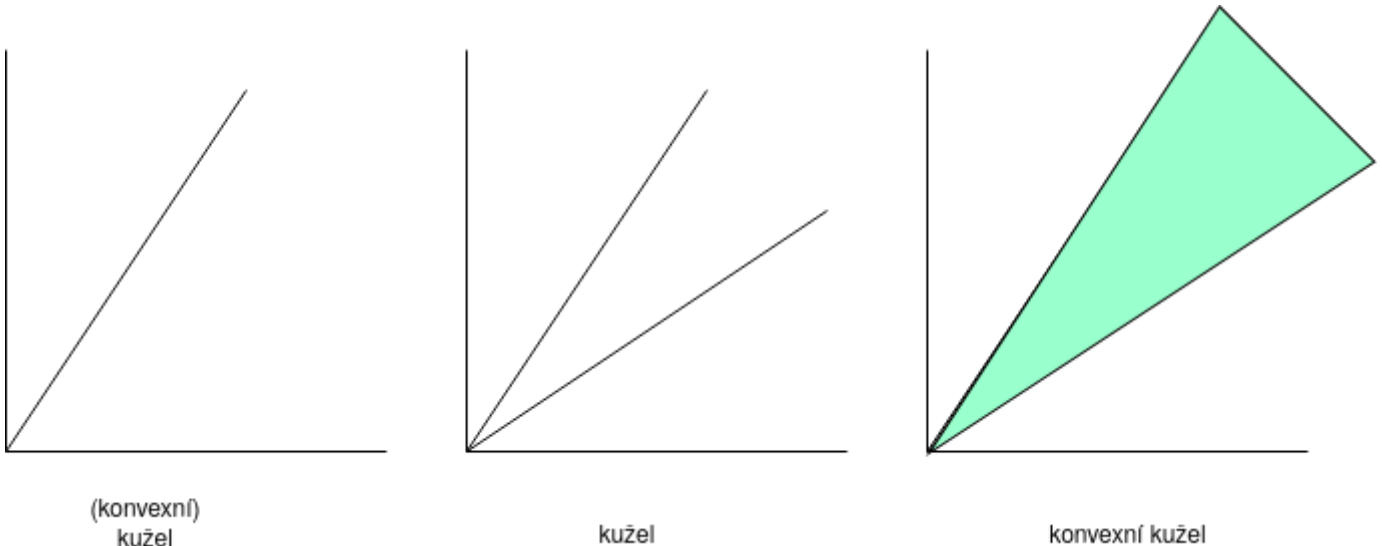
- jejich sjednocení  $\bigcup_{i \in I} X_i$  je konvexní množina
- jejich **součet**  $\lambda_1 X_1 + \dots + \lambda_m X_m = \{x \in \mathbb{R}^n \mid x = \sum_{i=1}^m \lambda_i x_i \text{ pro nějaká } x_i \in X_i\}$  je opět **konvexní**

## Vlastnosti konvexních množin

### Definice $\mathcal{D}\{2.1.3\}$ (Speciální množiny)

Množina  $X \subseteq \mathbb{R}^n$  se nazývá

- **kužel**, jestliže pro každé  $x \in X$  a pro každé  $\lambda \in [0, \infty)$  je také  $\lambda x \in X$
- **konvexní kužel**, jestliže je množina  $X$  konvexní a současně **kuzelem**
- **afinní**, jestliže pro každé  $x_1, x_2 \in X$  a pro každé  $\lambda \in \mathbb{R}$  platí  $\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2 \in X$



“ **Polyedr** je **mnohostěn** v  $\mathbb{R}^n$ . Dále **ohraňčený polyedr** nazveme **polytop**

Dále si rozeberme různé kombinace bodů

## Definice $\{2.1.4\}$ (Lineární kombinace)

Nechť  $x_1, \dots, x_m \in \mathbb{R}^n$ . Lineární kombinace  $\lambda_1 x_1 + \dots + \lambda_m x_m$  se nazývá

- **konvexní**, jestliže  $\lambda_1, \dots, \lambda_m \geq 0$  a  $\sum_{i=1}^m \lambda_i = 1$
- **nezáporná**, jestliže  $\lambda_1, \dots, \lambda_m \geq 0$
- **afinní**, jestliže  $\sum_{i=1}^m \lambda_i = 1$ .

Tedy jistě platí

- Množina obsahující všechny lineární kombinace libovolných dvou svých bodů (tj. s libovolnými dvěma body obsahuje i přímku procházející těmito body a počátek) je **vektorový (lineární) prostor**
- Množina obsahující všechny afinní kombinace libovolných dvou svých bodů (tj. s libovolnými dvěma body obsahuje i přímku procházející těmito body) je **afinní**
- Množina obsahující všechny nezáporné kombinace libovolných dvou svých bodů (tj. s libovolnými dvěma body obsahuje i celou výšeč určenou polopřímkami vycházejícími z počátku a procházejícími těmito body) je **konvexní kužel**

- Množina obsahující všechny konvexní kombinace dvou libovolných svých bodů (tj. s libovolnými dvěma body obsahuje i celou úsečku je spojující) je **konvexní**

## Definice $\S{2.1.6}$ (Obaly)

Nechť  $X \subseteq \mathbb{R}^n$

- průnik všech konvexních množin obsahujících množinu  $X$  se nazývá **konvexní obal** množiny  $X$  a značí se  $\text{conv } X$ .
- průnik všech konvexních *kuželů* obsahujících množinu  $X$  se nazývá **kónický obal** množiny  $X$  a značí se  $\text{cone } X$ .
- průnik všech *afinních* množin obsahujících množinu  $X$  se nazývá **afinní obal** množiny  $X$  a značí se  $\text{aff } X$ . Jeho *zaměření* se nazývá **lineární obal** množiny  $X$  a značí se  $\text{lin } X$ . **Dimenze** afinního obalu množiny  $X$  se značí  $\dim X$  a klademe  $\dim X := \dim \{\text{lin } X\}$ .

“ Všimněme si, že  $\text{span } X = \{ \sum_{i=1}^m \lambda_i x_i \mid x_i \in X, \lambda_i \in \mathbb{R} \}$ , ale  $\text{lin } X = \text{span} \{x_2 - x_1, x_3 - x_1, \dots, x_m - x_1\}$ . (pro  $X = \{x_1, \dots, x_m\}$ ) Viz obrázek z přednášky

“ Jinak řečeno, **konvexní obal** je nejmenší konvexní množina obsahující  $X$  ve smyslu množinové inkluze.  
**Kónický obal** je nejmenší *konvexní kužel* obsahující  $X$  atd..

Jako **simplex** definujeme **konvexní obal**  $n+1$  **afinně nezávislých** bodů  $v_1, \dots, v_{n+1} \in \mathbb{R}^m$ , kde  $m \geq n$ . Pod pojmem **afinně nezávislé** body rozumíme, že vektory  $v_2 - v_1, v_3 - v_1, \dots, v_{n+1} - v_1$  jsou **lineárně nezávislé**.

## Věta $\S{2.1.7}$

Nechť  $X \subseteq \mathbb{R}^n$ . Pak platí

- $\text{conv } X = \{x \mid x = \sum_{i=1}^m \lambda_i x_i, \text{ kde } m \in \mathbb{N} \text{ je libovolné}, x_1, \dots, x_m \in X, \lambda_1, \dots, \lambda_m \geq 0, \sum_{i=1}^m \lambda_i = 1\}$
- $\text{cone } X = \{x \mid x = \sum_{i=1}^m \lambda_i x_i, \text{ kde } m \in \mathbb{N} \text{ je libovolné}, x_1, \dots, x_m \in X, \lambda_1, \dots, \lambda_m \geq 0\}$
- $\text{aff } X = \{x \mid x = \sum_{i=1}^m \lambda_i x_i, \text{ kde } m \in \mathbb{N} \text{ je libovolné}, x_1, \dots, x_m \in X, \lambda_1, \dots, \lambda_m \in \mathbb{R}, \sum_{i=1}^m \lambda_i = 1\}$

Libovolný bod  $x$  v **konvexní kuželu** v  $\mathbb{R}^n$  lze vyjádřit pomocí **nezáporné kombinace**  $n$  bodů

## Věta D{2.1.9} (Caratheódoryho)

Nechť  $X \subseteq \mathbb{R}^n$ . Každý bod konvexního obalu  $\text{conv } X$  může být vyjádřen jako konvexní kombinace nejvýše  $n+1$  prvků množiny  $X$ , tj. pro  $x \in \text{conv } X$  existují  $x_1, \dots, x_{n+1} \in X$  a  $\lambda_1, \dots, \lambda_{n+1} \geq 0$  splňující  $\sum_{i=1}^{n+1} \lambda_i = 1$  taková, že  $x = \lambda_1 x_1 + \dots + \lambda_{n+1} x_{n+1}$

“ **POZOR: Univerzální konvexní báze** (stejná pro všechny  $x \in \text{conv } X$ ) konvexního obalu  $\text{conv } X$  **nemusí existovat!**

Lze ukázat, že pokud  $X \subseteq \mathbb{R}^n$  je **kompaktní** množina, pak  $\text{conv } X$  je **také kompaktní**.

“ To stejné **neplatí** o uzavřenosti.

## Zobecnění vnitřku množiny

### Definice D{2.1.11} (Relativně vnitřní bod)

Nechť  $X \subseteq \mathbb{R}^n$ . Bod  $x^* \in X$  se nazývá **relativně vnitřním** bodem množiny  $X$ , jestliže existuje okolí  $O(x^*)$  bodu  $x^*$  takové, že  $O(x^*) \cap \text{aff } X \subseteq X$ . Množinu všech *relativně vnitřních* bodů nazýváme **relativním vnitřkem** množiny  $X$  a značíme  $\text{ri } X$ .

Množina  $\text{rd } X := \overline{X} \setminus \text{ri } X$  se nazývá **relativní hranice** množiny  $X$ .

“ Jistě platí  $\text{interior } X \subseteq \text{ri } X$   
a také  $\text{ri } X \subseteq X \subseteq \overline{X} \subseteq \text{aff } X$

Platí  $\overline{\text{ri } X} = \overline{X}$ , tj. **relativní vnitřek** je dost velký na vygenerování **uzávěru**.

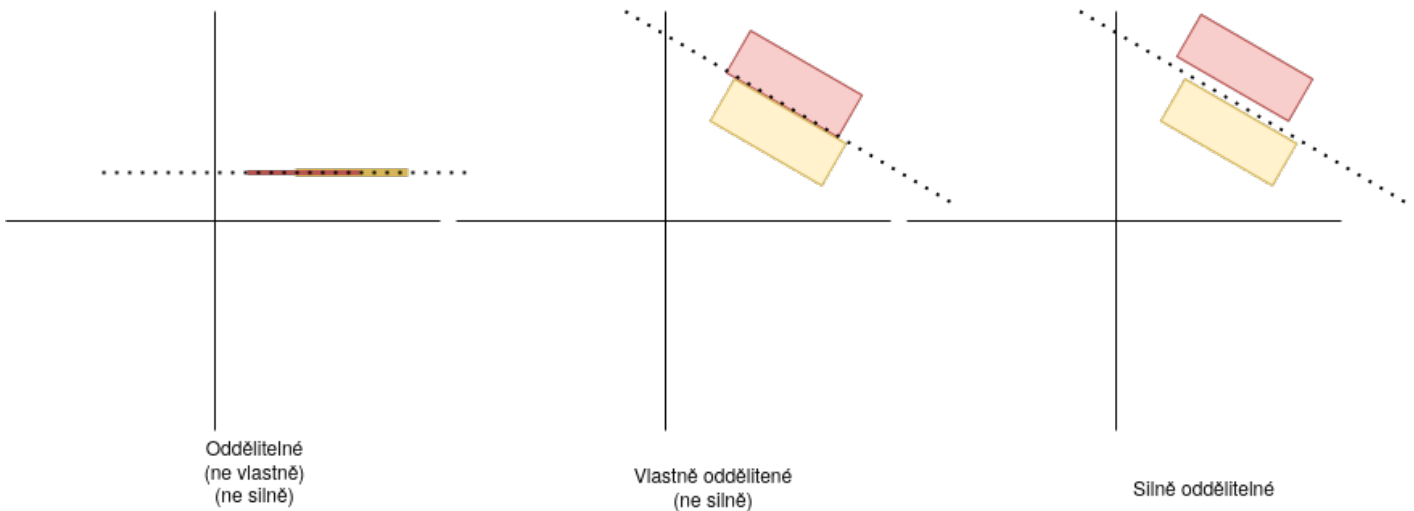
# Oddělitelnost množin

### Definice $\S 2.3.1$ (Oddělitelnost množin)

- **oddělitelné**, jestliže existuje  $p \in \mathbb{R}^n \setminus \text{brackets}\{\mathbb{V} 0\}$  takové, že  $\|\mathbf{x}_1\| \leq \|\mathbf{x}_2\|$  pro každé  $\mathbf{x}_1 \in X_1, \mathbf{x}_2 \in X_2$ .
- **vlastně oddělitelné**, jestliže jsou *oddělitelné* a zároveň existují body  $\mathbf{x}_1^* \in X_1, \mathbf{x}_2^* \in X_2$  takové, že  $\|\mathbf{x}_1^*\| > \|\mathbf{x}_2^*\|$
- **silně oddělitelné**, jestliže existuje  $p \in \mathbb{R}^n \setminus \text{brackets}\{\mathbb{V} 0\}$  takové, že  $\inf_{\mathbf{x}_1 \in X_1} \|\mathbf{x}_1\| > \sup_{\mathbf{x}_2 \in X_2} \|\mathbf{x}_2\|$ , je-li navíc  $\beta$

$\sup_{x_2 \in X_2} \text{scal } p \{x_2\}, \inf_{x_1 \in X_1} \text{scal } p \{x_1\}$ , nadrovina  $H_{p,\beta} := \{x \in \mathbb{R}^n \mid \text{scal } p x = \beta\}$  se nazývá **oddělující nadrovinou** množin  $X_1$  a  $X_2$ .

“ Ve vyjádření  $\{x \in \mathbb{R}^n \mid \text{scal } p x = \beta\}$  značí  $p$  normálový vektor nadroviny a  $\beta$  její posunutí



## Definice $D\{2.3.2\}$ (Projekce bodu)

Nechť  $X \subseteq \mathbb{R}^n$  je **neprázdná** množina a  $x \in \mathbb{R}^n$ . Bod  $x^* \in X$  nazveme **projekcí bodu  $x$  na množinu  $X$**  a označíme  $\text{proj}_X(x)$ , jestliže  $\| \text{proj}_X(x) - x \| \leq \| y - x \|$  pro každé  $y \in X$ .

## Věta $D\{2.3.4\}$

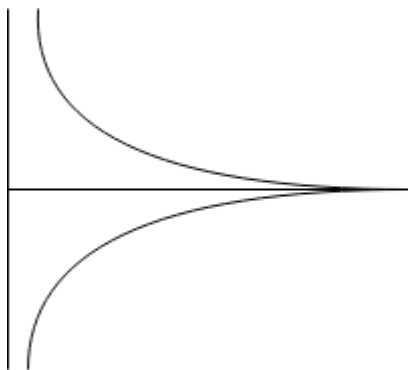
Neprázdné konvexní množiny  $X_1, X_2 \subseteq \mathbb{R}^n$  jsou **silně oddělitelné** právě tehdy, když mají nenulovou vzdálenost, tj.  $\text{dist}(X_1, X_2) := \inf_{x_1 \in X_1, x_2 \in X_2} \|x_1 - x_2\| > 0$ , což je *ekvivalentní* s podmínkou  $0 \notin \overline{X_1 - X_2}$ .

Pod **kompaktní** množinou myslíme množinu, která je **ohraničená** (má konečný průměr) a **uzavřená** (obsahuje svou hranici).

Pokud jsou množiny  $X_1, X_2 \subseteq \mathbb{R}^n$  **neprázdné**, **konvexní** a **disjunktní** a navíc BÚNO je  $X_1$  **uzavřená** a  $X_2$  **kompaktní**, tak jsou množiny **silně oddělitelné**.

Požadavek **kompaktnosti** množiny  $X_2$  vynechat nelze, viz protipříklad dvou hyperbol (obrázek je pouze ilustrativní)

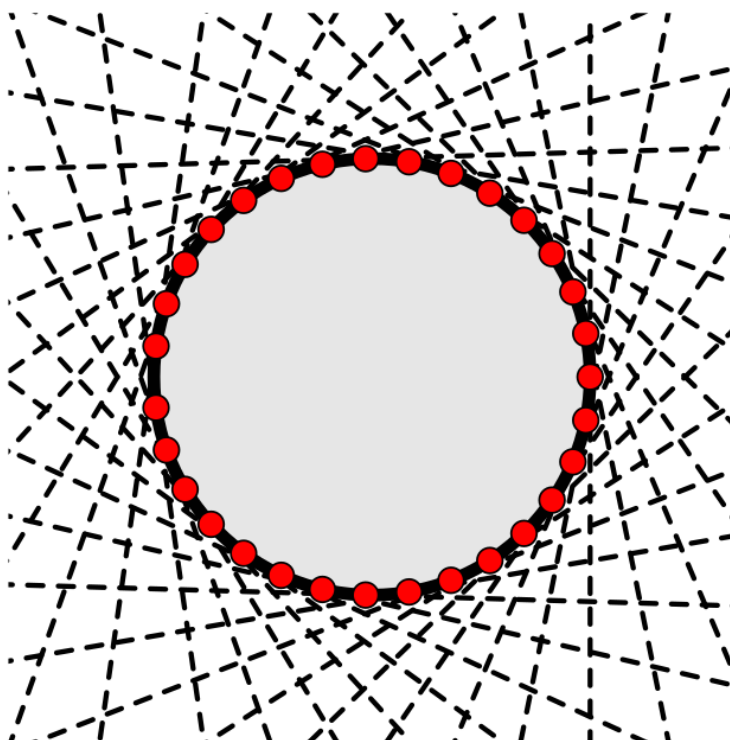
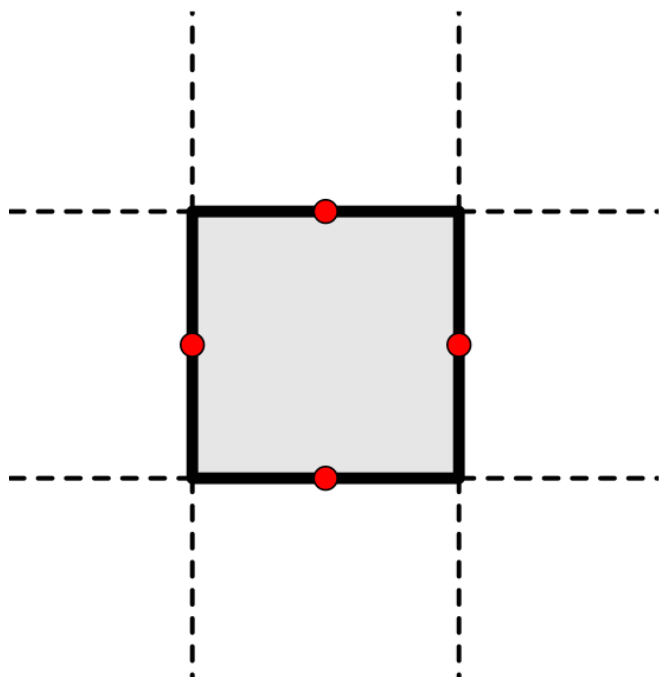




## Věta $\{2.3.5a\}$ (Geometrický popis konvexních množin)

Libovolná **uzavřená** konvexní množina  $X \subseteq \mathbb{R}^n$  je řešením (*nekonečné*) soustavy **neostrých** lineárních rovnic.

“ **Geometricky**: každá uzavřená konvexní množina  $X \subseteq \mathbb{R}^n$  je **průnikem uzavřených poloprostorů**, konkrétně **všech** uzavřených poloprostorů obsahujících  $X$ ”



## Opěrné nadroviny

### Definice $\{2.3.6\}$ (Opěrná nadrovina)

Nechť  $X \subseteq \mathbb{R}^n$  je *neprázdná* množina a nechť  $a \in \partial X := \overline{X} \setminus \text{interior } X$ . Nadrovina  $H_{\{p, \beta\}}$  se nazývá

- **opěrnou nadrovinou** množiny  $X$  v bodě  $a$ , jestliže  $\forall x \in X, \exists \alpha \in [0, 1] : x = \alpha a + (1 - \alpha) x$  pro každé  $x \in X$
- **vlastní opěrnou nadrovinou** množiny  $X$ , jestliže je **opěrnou nadrovinou** množiny  $X$  a zároveň existuje  $x^* \in X$  takové, že  $\exists \alpha \in (0, 1) : x^* = \alpha a + (1 - \alpha) x^*$

“ Jinak řečeno množina musí ležet pouze v **jednom** z poloprostorů určených opěrnou nadrovinou.

## Věta 2.3.7 (Existenci opěrné nadroviny)

Nechť  $X \subseteq \mathbb{R}^n$  je neprázdňá konvexní množina a nechť  $a \in \text{rd } X$ . Pak v bodě  $a$  existuje **vlastní** opěrná nadrovina množiny  $X$ .

“ Pro relativní vnitřek  $\text{ri } X$  množiny  $X$  a její vnitřek platí  $\text{interior } X \subseteq \text{ri } X$  a tedy jistě  $\overline{X} \setminus \text{ri } X = \text{rd } X \subseteq \text{partial } X = \overline{X} \setminus \text{interior } X$

# Podmínky oddělitelnosti

## Věta 2.3.7a (Oddělitelnost množin)

Nechť  $X_1, X_2 \subseteq \mathbb{R}^n$  jsou neprázdňé, konvexní a disjunktní množiny. Pak pro tyto množiny existuje oddělující nadrovina.

## Věta 2.3.8

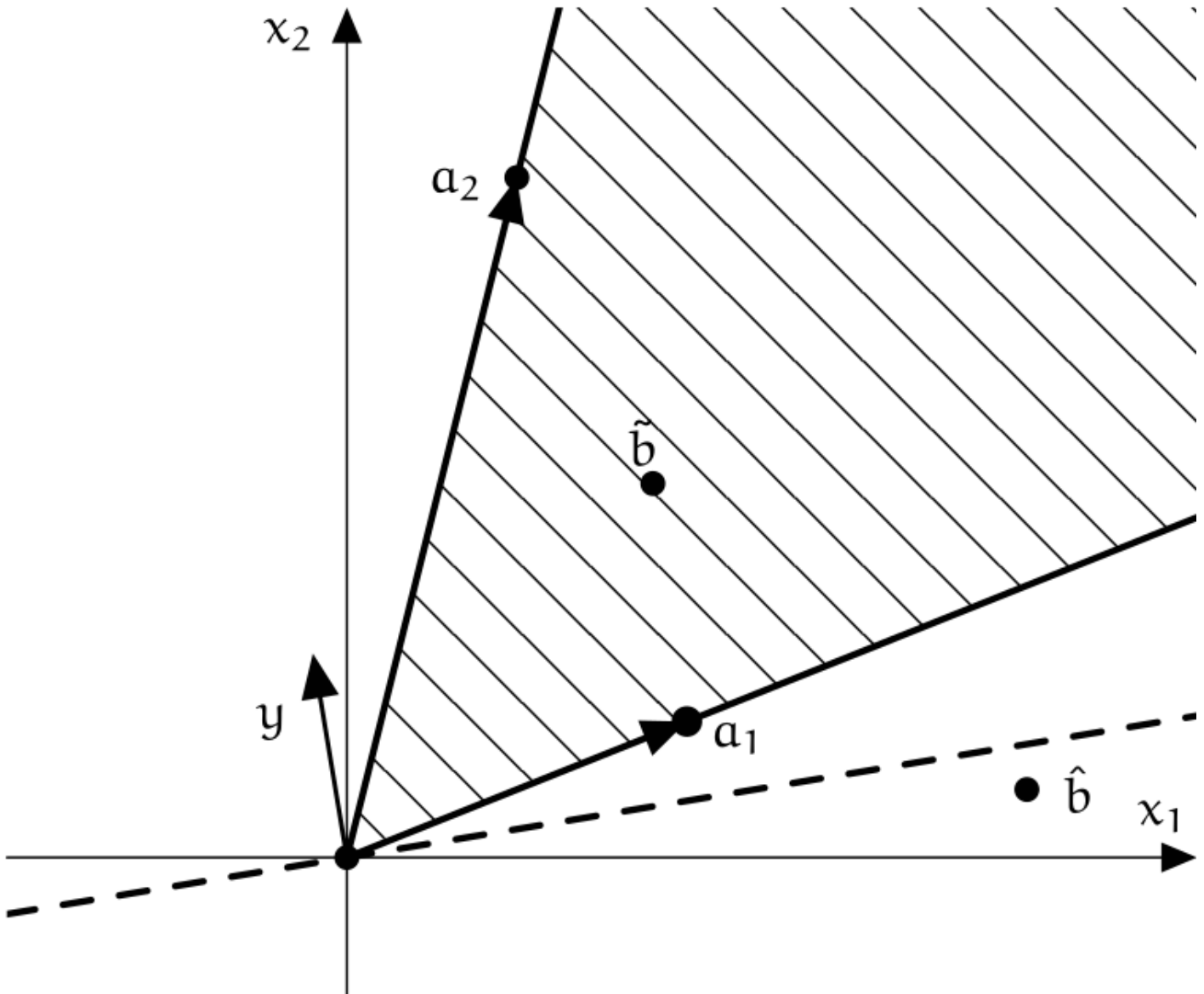
Neprázdňé konvexní množiny  $X_1, X_2 \subseteq \mathbb{R}^n$  jsou **vlastně** oddělitelné právě tehdy, když  $X_1 \cap X_2 = \emptyset$ .

## Věta 2.3.9 (Farkas & Minkowski)

Nechť  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  a  $b \in \mathbb{R}^m$ . Potom je **právě jeden** z následujících systémů rovnic a nerovnic řešitelný:  $Ax = b, x \geq 0$  (2.3.5)  $A^T y \geq 0, y \leq b$  (2.3.6)

Jinak řečeno soustava  $\text{tagEq}\{2.3.5\}$  má řešení právě tehdy, když pro všechna  $y \in \mathbb{R}^m$  platí  $A^T y \geq 0$  a zároveň  $\text{scal } y b \geq 0$

Ještě jinak můžeme větu formulovat tak, že buď  $b$  leží v *konvexním kuželu*  $\text{cone}\{a_i\}_{i=1}^n$  nebo jsou  $b$  a *konvexní kužel* **silně oddělitelné**.



Z této věty pak plynou tzv. **věty o alternativě**, které můžeme najít například v lineárním programování.

Tvrzení **Věty**  $\text{tagDe}\{2.3.9\}$  můžeme také napsat jako:

*Jestliže systém  $f_0(x) := \text{scal } \{a_0\} x < 0$ ,  $f_i(x) := \text{scal } \{a_i\} x \leq 0$ ,  $i \in \{1, \dots, m\}$  nemá pro daná  $a_0, \dots, a_m \in \mathbb{R}^n$  řešení na  $\mathbb{R}^n$ , pak existují čísla  $y_1, \dots, y_m \geq 0$  taková, že  $a_0 + \sum_{i=1}^m y_i a_i = 0$ , tj.  $f_0(x) + \sum_{i=1}^m y_i f_i(x) = 0$  pro každé  $x \in \mathbb{R}^n$ .*

Toto plyne z toho, že pokud v  $\text{tagDe}\{2.3.9\}$  položíme  $b = a_0$  a  $A = -(a_1, \dots, a_m)$  (a zaměníme-li  $x$  a  $y$ ), pak podle předpokladu **nemá** systém  $A^T x \geq 0$ ,  $\text{scal } x \{a_0\}$

$< 0$  řešení. A tedy dostáváme, že systém  $Ay = a_0, y \geq 0$  řešení **mít musí**.

---

## Věta 2.3.12 (Fan & Glicksburg & Hoffman)

Nechť množina  $X \subseteq \mathbb{R}^n$  je konvexní, funkce  $f_1, \dots, f_k: X \rightarrow \mathbb{R}$  jsou **konvexní** a funkce  $f_{k+1}, \dots, f_m$  **afinní**, tj. pro  $j \in \{k+1, \dots, m\}$  máme  $f_j = \sum_{i=1}^n a_{ji} x_i + \beta_j$  pro vhodná  $a_j \in \mathbb{R}^n$  a  $\beta_j \in \mathbb{R}$ . Jestliže systém nerovností a rovností 
$$\begin{cases} f_i(x) < 0, & i \in \{1, \dots, k\} \\ f_j(x) = 0, & j \in \{k+1, \dots, m\} \end{cases} \tag{T{2.3.8}}$$
 nemá řešení na  $X$ , pak existují takové konstanty  $y_1, \dots, y_k \geq 0$  a  $y_{k+1}, \dots, y_m \in \mathbb{R}$  že pro alespoň jedno  $l \in \{1, \dots, m\}$  je  $y_l \neq 0$  a pro všechna  $x \in X$  platí 
$$\sum_{i=1}^m y_i f_i(x) \geq 0 \tag{T{2.3.9}}$$

---

Následující věta udává podmínky, které zajišťují kladnost jistého význačného  $y_i$  (BÚNO  $y_i = 0$ ) ve vztahu 2.3.9. Po vydělení vztahu 2.3.9 tímto  $y_i$  dostaneme BÚNO  $y_i = 1$ .

## Věta 2.3.13 (Podmínky regularity)

Nechť množina  $X \subseteq \mathbb{R}^n$  je konvexní a funkce  $f_0, \dots, f_m: X \rightarrow \mathbb{R}$  jsou konvexní. Jestliže systém nerovností 
$$f_0(x) < 0, \tag{T{2.3.10}}$$
 
$$f_i(x) < 0, \quad i \in \{1, \dots, m\} \tag{T{2.3.11}}$$
 nemá řešení na  $X$  a podsystém 2.3.11 má řešení na  $X$ , pak existují  $y_1, \dots, y_m \geq 0$  taková, že pro všechna  $x \in X$  platí 
$$f_0(x) + \sum_{i=1}^m y_i f_i(x) \geq 0 \tag{T{2.3.12}}$$

# Konvexní funkce

```

 $\langle \cdot, \cdot \rangle$   $\|\cdot\|$   $\frac{\partial}{\partial x}$   $\begin{pmatrix} \cdot \\ \cdot \end{pmatrix}$   $\mathbf{\cdot}$   $\mathcal{O}$   $\mathbf{v}$   $\mathbf{v}^\top$   $\varepsilon$   $\lambda$   $\theta$   $\alpha$   $\text{\text{tagged}}$   $\text{\text{tagEq}}$   $\text{\text{tagDe}}$   $\text{\text{T}}$   $\text{\text{D}}$   $\text{\text{conv}}$   $\text{\text{cone}}$   $\text{\text{aff}}$   $\text{\text{lin}}$   $\text{\text{span}}$   $\text{\text{O}}$   $\text{\text{ri}}$   $\text{\text{rd}}$   $\text{\text{interior}}$   $\text{\text{proj}}$   $\text{\text{epi}}$   $\text{\text{grad}}$   $\nabla^2$ 

```

## Definice $\mathcal{D}\{2.2.1\}$ (Konvexní funkce)

Nechť  $X \subseteq \mathbb{R}^n$  je **konvexní** množina. Funkce  $f: X \rightarrow \mathbb{R}$  se nazývá

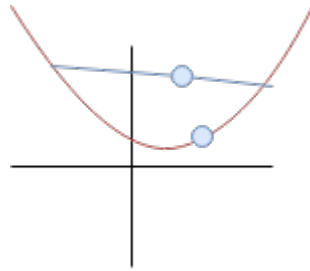
- konvexní** na  $X$ , jestliže pro všechna  $x_1, x_2 \in X$  a každé  $\lambda \in [0,1]$  platí  $f(\lambda x_1 + (1-\lambda)x_2) \leq \lambda f(x_1) + (1-\lambda)f(x_2)$   $\text{\text{tagT}}\{2.2.1\}$
- ostře konvexní** na  $X$ , jestliže nerovnost  $\text{\text{tagEq}}\{2.2.1\}$  je **ostrá** pro všechna  $x_1, x_2 \in X$ ,  $x_1 \neq x_2$  a každé  $\lambda \in (0,1)$ .
- silně konvexní** na  $X$  s **konstantou silné konvexnosti**  $\theta > 0$ , jestliže pro všechna  $x_1, x_2 \in X$  a každé  $\lambda \in [0,1]$  platí  $\underbrace{f(\lambda x_1 + (1-\lambda)x_2) \leq \lambda f(x_1) + (1-\lambda)f(x_2)}_{\text{\text{tagEq}}\{2.2.1\}} - \lambda(1-\lambda)\|x_1 - x_2\|^2 \leq \theta$   $\text{\text{tagT}}\{2.2.2\}$

“V praxi je **silná** konvexnost "silnější" než **ostrá** konvexnost a ta je silnější než "obyčejná" konvexnost

## Věta $\mathcal{D}\{2.2.2\}$ (Konvexnost nadgrafu)

Nechť  $X \subseteq \mathbb{R}^n$  je konvexní množina a nechť  $f: X \rightarrow \mathbb{R}$ . Funkce  $f$  je **konvexní** na  $X$  právě tehdy, když její **nadgraf (epigraf)**  $\text{\text{epi}} f := \{(x, \beta) \mid x \in X, \beta \geq f(x)\}$  je **konvexní** množina.

Pro **ostře** konvexní funkci musí "tyto dva body" vždy ležet nad sebou (myšleny jejich souřadnice na ose  $y$ ). Navíc pro **silnou** konvexnost mezi nimi musí vždy být alespoň daná mezera.



“ Tyto body **nemusí** ležet nad sebou (na svislé přímce). Navíc ještě

$f$  **konvexní**  $\iff -f$  **konkávní**

## Kombinace konvexních funkcí

### Věta $\{2.2.3\}$ (Nezáporná lineární kombinace konvexních funkcí)

Nechť  $X \subseteq \mathbb{R}^n$  je konvexní množina, funkce  $f_1, \dots, f_m: X \rightarrow \mathbb{R}$  jsou konvexní na  $X$  a  $\alpha_1, \dots, \alpha_m \geq 0$  jsou daná čísla. Potom  $F(x) = \alpha_1 f_1(x) + \dots + \alpha_m f_m(x)$  je **konvexní**.

### Věta $\{2.2.4\}$ (*Sublevel set*)

Nechť  $X \subseteq \mathbb{R}^n$  je konvexní množina a  $f: X \rightarrow \mathbb{R}$  je *konvexní* funkce na  $X$ . Pak pro libovolné  $K \in \mathbb{R}$  je odpovídající **dolní vrstevnicová množina** (**sublevel set**)  $V_K := \{x \in X \mid f(x) \leq K\}$  také **konvexní**.

“ Platí pouze tato implikace:  $f$  **konvexní**  $\implies$  *sublevel set* **konvexní**  
Například  $x^3$  má konvexní *sublevel set*, ale sama konvexní **není**.

Přesněji říkáme, že pokud má funkce  $f$  **konvexní sublevel set**, pak  $f$  je **kvazikonvexní**.

### Věta $\{2.2.5\}$ (Jensen)

Nechť  $X \subseteq \mathbb{R}^n$  je konvexní množina a funkce  $f: X \rightarrow \mathbb{R}$  je konvexní na  $X$ . Pak pro libovolné  $m \in \mathbb{N}$ ,  $x_1, \dots, x_m \in X$  a čísla  $\lambda_1, \dots, \lambda_m \geq 0$  splňující  $\sum_{i=1}^m \lambda_i = 1$  platí  $f\left(\sum_{i=1}^m \lambda_i x_i\right) \leq \sum_{i=1}^m \lambda_i f(x_i)$ .  
 $\{2.2.3\}$  Je-li navíc funkce  $f$  **ostře konvexní** a  $\lambda_1, \dots, \lambda_m \in (0,1)$ , pak rovnost v  $\{2.2.3\}$  nastane *právě tehdy*, když  $x_1 = \dots = x_m$ .

První část **Věty**  $\tagDe{2.2.5}$  lze jistě podle **Definice**  $\tagDe{2.2.1}$  nahradit ekvivalencí

“ Z Jensenovy nerovnosti  $\tagEq{2.2.3}$  lze odvodit například **AG nerovnost**  
$$\frac{x_1 + \dots + x_m}{m} \leq \sqrt[m]{x_1 \cdot \dots \cdot x_m}$$

## Lokalizace minima konvexní funkce

### Věta $\tagD{2.2.6}$

Nechť  $X \subseteq \mathbb{R}^n$  je konvexní množina a funkce  $f: X \rightarrow \mathbb{R}$  konvexní. Potom následující tvrzení jsou pravdivá

- Libovolné **lokální minimum** funkce  $f$  na  $X$  je současně **globálním minimem**.
- Množina bodů množiny  $X$ , v nichž funkce  $f$  nabývá svého **minima** na  $X$ , je **konvexní**. Je-li funkce dokonce **ostře konvexní**, pak je tato množina **nejvýše jednovprvková**.
- Je-li funkce  $f$  **diferencovatelná** na **otevřené** množině  $U \subseteq X$  a  $x^* \in U$  je jejím **stacionárním bodem**, tj.  $\nabla f(x^*) = 0$ , pak  $x^*$  je bodem **globálního minima** funkce  $f$  na množině  $X$ .

Z Věty  $\tagDe{2.2.6}$  mimo jiné plyne, že je-li  $f: X \rightarrow \mathbb{R}$  (*ostře*) konvexní a **spojitá** funkce na konvexní a **kompaktní** množině  $X \subseteq \mathbb{R}^n$ , pak  $f$  má na  $X$  (*právě jedno*) **globální minimum**.

### Věta $\tagD{2.2.7}$ (Základní věta konvexního programování)

Máme-li konvexní funkci  $f: X \rightarrow \mathbb{R}$  na polytopu  $X := \text{conv}\{x_1, \dots, x_m\} \subseteq \mathbb{R}^n$ , pak je maximum funkce  $f$  na  $X$  dosaženo v některém z bodů  $x_1, \dots, x_m$ .

**Obecněji:** je-li  $X$  konvexní a **kompaktní** množina, pak maximum nastává v **extrémním bodě** (tj. v takovém bodě, který **není netriviální** konvexní kombinací dvou bodů z  $X$ )

“ Z Věty  $\tagDe{2.2.7}$  plyne **základní věta lineárního programování**:  
Je-li funkce  $f$  **afinní** (taková funkce je konvexní i konkávní zároveň), pak **globální maximum** nastává v některém z bodů  $x_1, \dots, x_m$ , tj. v některém z "**vrcholů**" polytopu.

# Vlastnosti konvexních funkcí

## Věta 2.4.1 (Spojitost konvexní funkce)

Nechť  $X \subseteq \mathbb{R}^n$  je konvexní množina a funkce  $f: X \rightarrow \mathbb{R}$  je konvexní na  $X$ . Pak  $f$  je **spojitá** pro každé  $x \in \text{int } X$ .

Dále ještě známe několik podmínek zaručujících konvexnost funkce  $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ :

- má-li  $f$  vlastní derivaci v **otevřeném** intervalu  $I$ , pak  $f$  je (ostře) konvexní na  $I$  právě tehdy, když  $f'$  je **neklesající (rostoucí)** na  $I$ .
- má-li  $f$  vlastní derivaci v **otevřeném** intervalu  $I$ , pak  $f$  je (ostře) konvexní na  $I$  právě tehdy, když pro každé  $x, x^* \in I$  platí  $f(x) \geq f(x^*) + f'(x^*)(x - x^*)$ , tj. graf funkce  $f$  leží **nad tečnou** sestrojenou v **libovolném** bodě.
- má-li  $f$  vlastní **druhou** derivaci v **otevřeném** intervalu  $I$ , pak  $f$  je konvexní na  $I$  právě tehdy, když funkce  $f''(x) \geq 0$  (je-li  $f''(x) > 0$  na  $I$ , pak **ostře konvexní**).

Tyto tvrzení si nyní rozšíříme pro  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  pro **silnou** konvexnost s konstantnou  $\theta$  (volbou  $\theta = 0$  dostáváme **ostrou** konvexnost)

## Věta 2.4.2

Nechť  $X \subseteq \mathbb{R}^n$  je konvexní množina a funkce  $f$  diferencovatelná na otevřené množině  $\text{int } X$ . Pak  $f$  je **silně** konvexní na  $X$  s konstantou **silné** konvexnosti  $\theta \geq 0$  právě tehdy, když pro každé  $x, x^* \in X$  platí  $f(x) \geq f(x^*) + \langle \text{grad } f(x^*), x - x^* \rangle + \frac{\theta}{2} \|x - x^*\|^2$  (tag 2.4.1)

Ve výrazu  $\langle \text{grad } f(x^*), x - x^* \rangle$  hraje úlohu **tečné nadroviny** v bodě  $x^*$  s **normálovým vektorem**  $\text{grad } f(x^*)$  (tečným jak na nadrovinu, tak na funkci  $f$  v bodě  $x^*$ )

Ještě jinými slovy je z Věty 2.4.2 plyne, že nadrovina daná  $\langle \text{grad } f(x) - \text{grad } f(x^*), x - x^* \rangle \geq \theta \|x - x^*\|^2$  **opěrnou nadrovinou** pro  $f$

## Důsledek 2.4.5

Nechť  $X \subseteq \mathbb{R}^n$  je konvexní množina splňující  $\text{int } X \neq \emptyset$ . Nechť funkce  $f: X \rightarrow \mathbb{R}$  je **dvakrát** spojitě diferencovatelná na **otevřené** množině  $\text{int } X$  s maticí druhých derivací  $\text{Hess } f(x)$  (*Hessova matice*). Pak  $f$  je **silně** konvexní na  $X$  s konstantou silné konvexnosti  $\theta \geq 0$  právě tehdy, když pro každé  $x \in X$  a  $h \in \mathbb{R}^n$



platí  $\|\text{Hess } f(x)\|_h \geq 2 \|\text{Hess } f(x)\|_h^2$   $\tag{T{2.4.3}}$ , jinými slovy  $\text{Hess } f(x) \geq 2I$  pro všechna  $x \in X$ .

---

Z Důsledku  $\tag{2.4.5}$  plynou následující tři implikace

- $\text{Hess } f(x) \geq 0$  pro všechna  $x \in X$   $\implies f$  je konvexní na  $X$
- $\text{Hess } f(x) > 0$  pro všechna  $x \in X$   $\implies f$  je **ostře** konvexní na  $X$
- $\text{int } X \neq \emptyset$  a  $f$  je konvexní na  $X$   $\implies \text{Hess } f(x) \geq 0$  pro všechna  $x \in X$

# Subgradient a subdiferenciál a Fenchelova transformace

```

 $\xdef\scal#1#2{\langle #1, #2 \rangle}$ 
 $\xdef\norm#1{\left\| \right. #1 \left. \right\|}$ 
 $\xdef\dist{\rho}$ 
 $\xdef\and{\&}$ 
 $\xdef\brackets#1{\left\{ #1 \right\}}$ 
 $\xdef\parc#1#2{\frac {\partial #1}{\partial #2}}$ 
 $\xdef\mtr#1{\begin{pmatrix} #1 \end{pmatrix}}$ 
 $\xdef\bm#1{\boldsymbol{#1}}$ 
 $\xdef\mc#1{\mathcal{#1}}$ 
 $\xdef\vv#1{\mathbf{#1}}$ 
 $\xdef\vvp#1{\pmb{#1}}$ 
 $\xdef\ve{\varepsilon}$ 
 $\xdef\l{\lambda}$ 
 $\xdef\th{\vartheta}$ 
 $\xdef\alpha{\alpha}$ 
 $\xdef\tagged#1{(\text{#1})}$ 
 $\xdef\tagged*#1{\text{#1}}$ 
 $\xdef\tagEqHere#1#2{\href{#2\#eq-#1}{(\text{#1})}}$ 
 $\xdef\tagDeHere#1#2{\href{#2\#de-#1}{\text{#1}}}$ 
 $\xdef\tagEq#1{\href{\#eq-#1}{(\text{#1})}}$ 
 $\xdef\tagDe#1{\href{\#de-#1}{\text{#1}}}$ 
 $\xdef\T#1{\htmlld{eq-#1}{#1}}$ 
 $\xdef\D#1{\htmlld{de-#1}{\vv{#1}}}$ 
 $\xdef\conv#1{\mathrm{conv}\,, #1}$ 
 $\xdef\cone#1{\mathrm{cone}\,, #1}$ 
 $\xdef\aff#1{\mathrm{aff}\,, #1}$ 
 $\xdef\lin#1{\mathrm{Lin}\,, #1}$ 
 $\xdef\span#1{\mathrm{span}\,, #1}$ 
 $\xdef\O{\mathcal O}$ 
 $\xdef\ri#1{\mathrm{ri}\,, #1}$ 
 $\xdef\rd#1{\mathrm{r}\partial\,, #1}$ 
 $\xdef\interior#1{\mathrm{int}\,, #1}$ 
 $\xdef\proj{\Pi}$ 
 $\xdef\epi#1{\mathrm{epi}\,, #1}$ 
 $\xdef\grad#1{\mathrm{grad}\,, #1}$ 
 $\xdef\hess#1{\nabla^2\,, #1}$ 
 $\xdef\subdif#1{\partial #1}$ 
 $\xdef\co#1{\mathrm{co}\,, #1}$ 

```

## Subgradient a subdiferenciál

### Definice $\mathcal{D}\{2.5.1\}$ (Subgradient a subdiferenciál)

Nechť  $X \subseteq \mathbb{R}^n$  je konvexní množina. Vektor  $a \in \mathbb{R}^n$  se nazývá **subgradient** funkce  $f: X \rightarrow \mathbb{R}$  v bodě  $x^* \in X$ , jestliže  $f(x) - f(x^*) \geq \langle a, x - x^* \rangle$   $\forall x \in X$ . Množina všech **subgradientů** funkce  $f$  v bodě  $x^* \in X$  se nazývá **subdiferenciál** funkce  $f$  v bodě  $x^*$  a značí se  $\partial f(x^*)$ . Funkce  $f$  se nazývá **subdiferencovatelná** v bodě  $x^* \in X$ , jestliže  $\partial f(x^*) \neq \emptyset$ .

„Jistě platí podle Věty  $\mathcal{D}\{2.4.2\}$   $\forall f \in \mathcal{K}(X)$  i  $\nabla f(x^*) \in \partial f(x^*)$ “

Speciálně, je-li  $f: X \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  **konvexní** a  $x^* \in \text{ri } X$ , pak podle Věty  $\mathcal{D}\{2.4.7\}$   $\forall f \in \mathcal{K}(X)$  existují **jednostranné** derivace  $f'_-(x^*)$ ,  $f'_+(x^*)$ , přičemž platí  $f'_-(x^*) \leq f'_+(x^*)$ . V tomto případě pak máme  $\partial f(x^*) = [f'_-(x^*), f'_+(x^*)]$ .

$\rangle, f'_+(x^*)]$

## Věta 2.5.4

Nechť  $X \subseteq \mathbb{R}^n$  je konvexní množina a  $f: X \rightarrow \mathbb{R}$

- Je-li funkce  $f$  **konvexní** a  $x^* \in \text{ri } X$ , pak  $\text{subd} f(x^*)$  je **neprázdná, uzavřená a konvexní** množina
- Je-li  $\text{subd} f(x)$  **neprázdná** pro každé  $x \in X$ , pak  $f$  je **konvexní** na  $X$

# Fenchelova transformace

Fenchelova transformace je transformace, která k funkci  $f: X \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  přiřadí **konvexní** funkci  $f^*: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ . Této přidružené funkci  $f^*$  se v řeči *optimalizace/matematického programování* říká **duální úloha** (viz Definice 4.3.3).

## Definice 2.6.1 (Fenchelova transformace)

Nechť  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ . Funkce  $f^*(y) := \sup_{x \in \mathbb{R}^n} [\langle x, y \rangle - f(x)]$  se nazývá **Fenchelova transformace** funkce  $f$  (nebo také **(konvexně) konjugovanou funkcí** funkce  $f$ ).

„Jistě  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$  a proto definujeme ještě **efektivní definiční obor**  $D^*(f) = \{x \in D(f) \mid f(x) < \infty\}$

## Lemma 2.6.3

Nechť je dána funkce  $f: X \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  a  $f^*$  je její Fenchelova transformace. Pak následující tvrzení jsou pravdivá:

- Funkce  $f^*$  je konvexní na množině  $Y := \{y \in \mathbb{R}^n \mid f^*(y) < \infty\}$
- Pro každé  $x \in X$  a  $y \in \mathbb{R}^n$  platí tzv. *Fenchelova(-Youngova) nerovnost*  $f(x) + f^*(y) \geq \langle x, y \rangle$  přičemž **rovnost nastane** právě tehdy, když  $y \in \text{subd} f(x)$ .
- Je-li  $f(x) \leq g(x)$  na  $X$ , pak  $f^*(y) \leq g^*(y)$  pro všechna  $y \in \mathbb{R}^n$ .

## Věta 2.6.6 (Fenchel & Moreau)

Nechť  $X \subseteq \mathbb{R}^n$  je konvexní množina a funkce  $f: X \rightarrow \mathbb{R}$  **konvexní** na  $X$ . Pak v **každém bodě spojitosti** funkce  $f$  platí tzv. *Fenchelova rovnost*  $f^{**} = f$ .

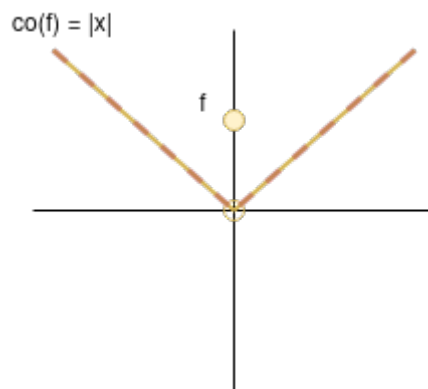
Jinak řečeno, **druhá** Fenchelova transformace ke **konvexní** funkci je s touto funkcí **totožná**, tj.  $f^{**} \equiv f$  pro  $f$  **konvexní**. Navíc jelikož  $f^*$  je vždy konvexní, tak dostáváme, že počítat **třetí** Fenchelovu transformaci  $f^{**}$  nemá smysl, protože bude totožná s první Fenchelovou transformací  $f^*$ .

## Definice 2.6.7 (Obálka funkce)

Nechť  $X \subseteq \mathbb{R}^n$  je konvexní množina a  $f: X \rightarrow \mathbb{R}$ . Potom funkce  $g(x) := \sup \{h(x) \mid h \text{ je konvexní a } h(x) \leq f(x) \text{ pro všechna } x \in X\}$  se nazývá **konvexní obálka (obal) funkce**  $f$  a značí se  $\text{co } f$ .

Jinak řečeno,  $\text{co } f$  je **největší** konvexní funkce, která je **majorizována** funkcí  $f$ .

Jistě platí  $D(\text{co } f) = \text{conv}(D(f))$ , z čehož plyne  $\text{conv}(\text{epi } f) \subseteq \text{epi}(\text{co } f)$



Zde  $\text{conv}(\text{epi } f) = \text{epi} \{|x|\} \setminus \{0\}$ , ale  $0 \in \text{epi}(\text{co } f)$

## Věta 2.6.9

Nechť  $X \subseteq \mathbb{R}^n$  je konvexní množina a  $f: X \rightarrow \mathbb{R}$ . Potom pro každé  $x \in X$  platí  $\text{co } f(x) = f^{**}(x)$

# Numerické metody v R

```

 $\xdef\scal#1#2{\langle #1, #2 \rangle}$ 
 $\xdef\norm#1{\left\| \text{#1} \right\|}$ 
 $\xdef\dist{\rho}$ 
 $\xdef\and{\&}$ 
 $\xdef\brackets#1{\left\{ #1 \right\}}$ 
 $\xdef\parc#1#2{\frac {\partial #1}{\partial #2}}$ 
 $\xdef\mtr#1{\begin{pmatrix} #1 \end{pmatrix}}$ 
 $\xdef\bm#1{\boldsymbol{#1}}$ 
 $\xdef\mc#1{\mathcal{#1}}$ 
 $\xdef\vv#1{\mathbf{#1}}$ 
 $\xdef\vp#1{\pmb{#1}}$ 
 $\xdef\ve{\varepsilon}$ 
 $\xdef\l{\lambda}$ 
 $\xdef\th{\vartheta}$ 
 $\xdef\alpha{\alpha}$ 
 $\xdef\tagged#1{\text{#1}}$ 
 $\xdef\tagged*#1{\text{#1}}$ 
 $\xdef\tagEqHere#1#2{\href{#2\#eq-#1}{\text{#1}}}$ 
 $\xdef\tagDeHere#1#2{\href{#2\#de-#1}{\text{#1}}}$ 
 $\xdef\tagEq#1{\href{\#eq-#1}{\text{#1}}}$ 
 $\xdef\tagDe#1{\href{\#de-#1}{\text{#1}}}$ 
 $\xdef\T#1{\htmlId{eq-#1}{#1}}$ 
 $\xdef\D#1{\htmlId{de-#1}{\vv{#1}}}$ 
 $\xdef\conv#1{\mathrm{conv}\, , #1}$ 
 $\xdef\cone#1{\mathrm{cone}\, , #1}$ 
 $\xdef\aff#1{\mathrm{aff}\, , #1}$ 
 $\xdef\lin#1{\mathrm{Lin}\, , #1}$ 
 $\xdef\span#1{\mathrm{span}\, , #1}$ 
 $\xdef\O{\mathcal O}$ 
 $\xdef\ri#1{\mathrm{ri}\, , #1}$ 
 $\xdef\rd#1{\mathrm{r}\partial\, , #1}$ 
 $\xdef\interior#1{\mathrm{int}\, , #1}$ 
 $\xdef\proj{\Pi}$ 
 $\xdef\epi#1{\mathrm{epi}\, , #1}$ 
 $\xdef\grad#1{\mathrm{grad}\, , #1}$ 
 $\xdef\hess#1{\nabla^2\, , #1}$ 
 $\xdef\subdif#1{\partial #1}$ 
 $\xdef\co#1{\mathrm{co}\, , #1}$ 

```

## Rychlost konvergence

### Definice $\mathcal{D}\{3.1\}$

Nechť jsou dány 2 posloupnosti  $\{e_k\}_{k=0}^{\infty}$  a  $\{h_k\}_{k=0}^{\infty}$  takové, že  $e_k \in [0, \infty)$ ,  $e_k \rightarrow 0$  a  $h_k \in [0, \infty)$ ,  $h_k \rightarrow 0$ . Řekneme, že posloupnost  $\{e_k\}$  konverguje **rychleji** (*pomaleji*) než  $\{h_k\}$ , pokud existuje index  $k \in \mathbb{N}_0$  takový, že  $e_k \leq (\geq) h_k$   $\forall k \in [\tilde{k}, \infty) \cap \mathbb{N}_0$ .

### Definice $\mathcal{D}\{3.2\}$ (Rychlost konvergence)

Nechť je dána posloupnost  $\{e_k\}_{k=0}^{\infty}$  splňující  $e_k \in [0, \infty)$  a  $e_k \rightarrow 0$ . Řekneme, že posloupnost  $\{e_k\}$  konverguje

- **alespoň lineárně s rychlostí**  $\beta \in (0,1)$ , pokud konverguje **rychleji** než **geometrická** posloupnost se členy tvaru  $q \cdot \beta^k$ , kde  $q > 0$  a  $\beta \in (\beta, 1)$ .
  - Čím **větší**  $\beta$ , tím **pomaleji** jde tato geometrická posloupnost k nule - tj. konverguje rychleji než geometrická posloupnost s  $\beta$  větší než  $\beta$ .
- **nejvýše lineárně s rychlostí**  $\beta \in (0,1)$ , pokud konverguje **pomaleji** než **geometrická** posloupnost se členy tvaru  $q \cdot \beta^k$ , kde  $q > 0$  a  $\beta \in (\beta, 1)$ .

$(0, \beta)$ .

- **lineárně s rychlostí**  $\beta \in (0,1)$ , pokud konverguje **nejvýše** a současně **alespoň** lineárně s rychlostí  $\beta$ .
- **superlineárně (sublineárně)**, pokud konverguje **rychleji** (*pomaleji*) než libovolná geometrická posloupnost se členy tvaru  $q \beta^k$ , kde  $q > 0$  a  $\beta \in (0,1)$ .

## Definice $\mathcal{D}\{3.4\}$

Nechť je dána posloupnost  $\{e_k\}_{k=0}^{\infty}$  splňující  $e_k \in [0, \infty)$  a  $e_k \rightarrow 0$ , přičemž  $\{e_k\}$  konverguje **superlineárně**. Řekneme, že posloupnost  $\{e_k\}$  konverguje

- **alespoň superlineárně s řádem**  $p > 1$ , pokud konverguje **rychleji** než všechny posloupnosti se členy tvaru  $q \beta^{\lfloor p^k \rfloor}$ , kde  $q > 0$  a  $\beta \in (0,1)$  a  $\lfloor p^k \rfloor \in (1, p)$ 
  - čím **větší**  $\lfloor p^k \rfloor$ , tím **rychleji** posloupnost  $q \beta^{\lfloor p^k \rfloor}$  konverguje - tj.  $\{e_k\}$  konverguje rychleji než všechny posloupnosti s **menším**  $p$
- **nejvýše superlineárně s řádem**  $p > 1$ , pokud konverguje **pomaleji** než všechny posloupnosti se členy tvaru  $q \beta^{\lfloor p^k \rfloor}$ , kde  $q > 0$  a  $\beta \in (0,1)$  a  $\lfloor p^k \rfloor \in (p, \infty)$
- **superlineárně s řádem**  $p > 1$ , pokud konverguje **nejvýše** a současně **alespoň** superlineárně s řádem  $p$ .
- **superlineárně s řádem**  $p = 1$ , pokud konverguje **pomaleji** než všechny posloupnosti se členy tvaru  $q \beta^{\lfloor p^k \rfloor}$ , kde  $q > 0$  a  $\beta \in (0,1)$  a  $\lfloor p^k \rfloor \in (1, \infty)$

# Metody

## Definice $\mathcal{D}\{3.1.1\}$ (Unimodální funkce)

Nechť je dán interval  $I \subset \mathbb{R}$  a funkce  $f: I \rightarrow \mathbb{R}$ . Řekneme, že  $f$  je **unimodální** na  $I$ , jestliže existuje  $x^* \in I$  takové, že

- $f(x_1) > f(x_2)$  pro libovolná  $x_1, x_2 \in I$  splňující  $x^* > x_1 > x_2$
- $f(x_1) < f(x_2)$  pro libovolná  $x_1, x_2 \in I$  splňující  $x^* < x_1 < x_2$

Jinými slovy, **unimodální** funkce je **klesající** na  $(-\infty, x^*) \cap I$  (tj. *nalevo* od  $x^*$ ) a **rostoucí** na  $I \cap (x^*, \infty)$  (tj. *napravo* od  $x^*$ ).

Unimodalita **neimplikuje** konvexnost (*ani se spojitostí*), pouze **kvazikonvexnost**

Naopak, *konvexní* funkce **nemusí** nutně být *unimodální* (ale **ostrá konvexnost**  $\implies$  **unimodalita**)

“ Konvexní funkce nemusí být např. jen rostoucí, ale i **neklesající**

V této části budeme řešit úlohu  $f(x) \rightarrow \min, \text{ } x \in I := [a, b]$   $\tag{T{3.1.1}}$

## Lemma $D{3.1.2}$

Nechť  $f: I \rightarrow \mathbb{R}$  je **unimodální** na  $I$  a  $x_1, x_2 \in I$  jsou takové, že  $x_1 < x_2$ .

- Je-li  $f(x_1) \leq f(x_2)$ , pak  $x^* \leq x_2$
- Je-li  $f(x_1) \geq f(x_2)$ , pak  $x^* \geq x_1$

### Upozornění:

Dále uvažujme **POUZE UNIMODÁLNÍ** funkce.

Navíc nechť  $N$  značí **povolený počet vyčíslení** a **přesnost** těchto metod je dáno jako  $\bar{x} - x^* |$ , kde  $x^*$  je **přesné** řešení úlohy  $\tag{Eq{3.1.1}}$  a  $\bar{x}$  jeho nalezená aproximace.

# Metoda prostého dělení

“ Tato metoda **není** efektivní a je to *de facto* hrubá síla

Podle parity  $N$  určíme dělicí body intervalu  $I$ .

$N$ liché	$N$ sudé
$x_i := a + \{b - a \over N + 1\} i, \text{ } i=1, \dots, N = 2k - 1$	$x_{2i} := a + \{b - a \over k + 1\} i \text{ } \text{and } x_{2i-1} := x_{2i} - \delta, \text{ } i = 1, \dots, k := N/2,$

kde  $\delta$  je *vhodné malé číslo*.

Poté vyčíslíme  $f(x_1), \dots, f(x_N)$  (což v případě  $N$  **sudého** a  $\delta \in \{0, \{b-a \over k+1\}\}$  znamená **pouze**  $k$  vyčíslení) a nechť v  $x_j$  nastává nejmenší hodnota, tj.  $f(x_j) = \min_{1 \leq i \leq N} f(x_i)$  Pak z **Lemma**  $D{3.1.2}$  plyne, že  $x^* \in [x_{j-1}, x_{j+1}]$  a tento interval nazveme **interval lokalizace minima (ILM)** a za aproximaci  $x^*$  vezmeme *střed* ILM, tj.  $\bar{x} := \{x_{j-1} + x_{j+1} \over 2\}$

Pro **délku**  $|I_N|$  intervalu lokalizace minima platí  $|I_N| := \max_{1 \leq i \leq N} (x_{i+1} - x_{i-1}) = \begin{cases} 2 \cdot \frac{b-a}{N+1}, & N = 2k-1 \\ \frac{b-a}{N/2} + \delta, & N = 2k \end{cases}$

“ Pro  $N$  **sudé** je **poslední** interval delší, proto dostáváme takový tvar  $|I_N|$

“ Přesnost této metody je dána **polovinou ILM**, tj.  $\frac{|I_N|}{2}$

Rychlost konvergence této metody je **sublineární**, navíc je tento algoritmus **pasivní**, tj. volba  $x_{m+1}$  **nezáleží** na  $x_1, \dots, x_m$  (závisí pouze na  $N$ , či na  $N$  a  $\delta$ ).

“ Při rovnosti funkčních hodnot **preferujeme konec** (teoreticky by to mělo být jedno)

## Metoda půlení intervalu

Nechť nyní  $N = 2k$ . Položme  $a_0 = a$ ,  $b_0 = b$  a  $x_i^- := \frac{a_{i-1} + b_{i-1}}{2} - \delta$  a  $x_i^+ := \frac{a_{i-1} + b_{i-1}}{2} + \delta$ , kde  $\delta > 0$  je dostatečně malé a  $i = 1, \dots, k$ . Vyčíslíme funkci v  $x_i^-$ ,  $x_i^+$ , tj. dostaneme  $f(x_i^-)$ ,  $f(x_i^+)$ . Pak

- jestliže  $f(x_i^-) < f(x_i^+)$ , pak podle **Lemma** 3.1.2 je **ILM**  $[a_{i-1}, x_i^+]$   $\implies a_i = a_{i-1}, b_i = x_i^+$
- jestliže  $f(x_i^-) > f(x_i^+)$ , pak podle **Lemma** 3.1.2 je **ILM**  $[x_i^-, b_{i-1}]$   $\implies a_i = x_i^-, b_i = b_{i-1}$

Takto můžeme tento proces opakovat ( $k$ -krát, jelikož máme  $N = 2k$  povolených vyčíslení), kdy za  $a, b$  volíme krajní body **ILM** pro každý krok. Zřejmě, jako aproximaci  $x^*$  v  $k$ -tém kroku bereme **střed ILM** pro  $k$ -tý krok.

Délka **ILM** je v tomto případě  $|I_k| = \frac{b-a}{2^k} + \frac{(2^k - 1)\delta}{2^{k-1}}$ , přičemž  $\delta \in [0, \frac{b-a}{2}]$  a navíc pro  $k \rightarrow \infty$  je  $|I_k| \rightarrow 2\delta$ .

“ Z tohoto vyplývá, že čím menší  $\delta$ , tím je metoda přesnější. Nicméně ve skutečnosti se můžeme dostat k zaokrouhlovacím chybám, které dokonce mohou způsobit, že špatně určíme velikosti  $f(x_i^-)$ ,  $f(x_i^+)$  (tím pádem bychom řekli, že  $x^*$  je v opačném intervalu, než je ve skutečnosti)



Tato metoda konverguje **lineárně** s rychlostí  $1/2$ .

“ Při rovnosti funkčních hodnot **zapomínáme konec** (teoreticky by to mělo být jedno)

## Metoda zlatého řezu

Myšlenka metody zlatého řezu "vylepšuje" metodu půlení intervalu tak, že každá další iterace umožňuje pouze **jedno** další vyčíslení.

“ Zde  $\tau$  je řešení rovnice  $\tau^2 - \tau - 1 = 0$ , tj.  $\frac{1}{\tau} \approx 0.618$

Mějme funkci  $f$ , interval  $[a, b]$ , přesnost  $\epsilon$  nebo počet vyčíslení  $N \geq 2$ :

- (Inicializace) Položíme  $a_0 := a$ ,  $b_0 := b$  a  $k := 1$ . Vypočteme  $\mu_1 := a_0 + \frac{b_0 - a_0}{\tau^2}$  a  $\lambda_1 := a_0 + \frac{b_0 - a_0}{\tau}$
- Je-li  $k = N$ , pokračujeme částí 5., jinak následuje krok 3.
- Vyčíslíme  $f(\lambda_k)$  a  $f(\mu_k)$ . Jestliže  $f(\lambda_k) \geq f(\mu_k)$ :
  - Položíme  $a_k := \lambda_k$ ,  $b_k := b_{k-1}$ ,  $\lambda_{k+1} := \mu_k$  a  $\mu_{k+1} := f(\lambda_{k+1}) := f(\mu_k)$ ,  $\mu_{k+1} := a_k + \frac{b_k - a_k}{\tau}$  a pokračujeme na krok 4.
  - Položíme  $a_k := a_{k-1}$ ,  $b_k := \mu_k$ ,  $\lambda_{k+1} := \lambda_k$  a  $\mu_{k+1} := f(\mu_{k+1}) := f(\lambda_k)$ ,  $\lambda_{k+1} := a_k + \frac{b_k - a_k}{\tau^2}$  a pokračujeme na krok 4.
- Položíme  $k := k+1$  a pokračujeme krokem 2.
- Stanovíme poslední  $ILM$  jako  $[a_{k-1}, b_{k-1}]$  a vypočteme  $\bar{x} := \frac{a_{k-1} + b_{k-1}}{2}$ . **KONEC**

Tato metoda konverguje **lineárně** s rychlostí  $\frac{1}{\tau} \approx 0.618$

“ Toto **neznámá**, že by **na stejný počet vyčíslení** byla tato metoda horší než [metoda půlení intervalu](#)

Průběh MZŘ s výchozím intervalem  $I = [a_0, b_0]$  s délkou  $\ell_0 := b_0 - a_0$ .

i (i + 1 vyčíslení)	vzdálenost od $a_{i-1}$ ( $b_{i-1}$ )		délka ILM
	$\lambda_i$ ( $\mu_i$ )	$\mu_i$ ( $\lambda_i$ )	
1	$\ell_0/\tau^2$	$\ell_0/\tau$	$\ell_0/\tau$
2	$\ell_0/\tau^3$	$\ell_0/\tau^2$	$\ell_0/\tau^2$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
N – 1	$\ell_0/\tau^N$	$\ell_0/\tau^{N-1}$	$\ell_0/\tau^{N-1}$

## Fibonacciho metoda

V této poslední metodě uvažujme, že zkrácení  $\delta$  může být **jiné** v každé kroku metody.

“ Necht  $F_n$  je  $n$ -té Fibonacciho číslo

Máme povoleno  $N$  vyčíslení, takže  $M = N - 1$  a  $\lambda_i = a_{i-1} + \{F_{N-i-1} \over F_{N-i+1}\} l_{i-1} = b_{i-1} - \{F_{N-1} \over F_{N-1+i}\} l_{i-1}$   $\mu_i = a_{i-1} + \{F_{N-1} \over F_{N-1+i}\} l_{i-1} = b_{i-1} - \{F_{N-i-1} \over F_{N-i+1}\} l_{i-1}$

Průběh FM s výchozím intervalem  $I = [a_0, b_0]$  s délkou  $\ell_0 := b_0 - a_0$ .

i (i + 1 vyčíslení)	vzdálenost od a <sub>i-1</sub> (b <sub>i-1</sub> )		délka ILM
	$\lambda_i$ ( $\mu_i$ )	$\mu_i$ ( $\lambda_i$ )	
1	$\frac{F_{N-2}}{F_N} \ell_0$	$\frac{F_{N-1}}{F_N} \ell_0$	$\frac{F_{N-1}}{F_N} \ell_0$
2	$\frac{F_{N-3}}{F_N} \ell_0$	$\frac{F_{N-2}}{F_N} \ell_0$	$\frac{F_{N-2}}{F_N} \ell_0$
⋮	⋮	⋮	⋮
i	$\frac{F_{N-i-1}}{F_N} \ell_0$	$\frac{F_{N-i}}{F_N} \ell_0$	$\frac{F_{N-i}}{F_N} \ell_0$
⋮	⋮	⋮	⋮
N - 2	$\frac{1}{F_N} \ell_0$	$\frac{2}{F_N} \ell_0$	$\frac{2}{F_N} \ell_0$
N - 1 & $\delta > 0$	$\frac{1}{F_N} \ell_0$	$\frac{1}{F_N} \ell_0 + \delta$	$\frac{1}{F_N} \ell_0$ nebo $\frac{1}{F_N} \ell_0 + \delta$
N - 1 & $\delta < 0$	$\frac{1}{F_N} \ell_0 + \delta$	$\frac{1}{F_N} \ell_0$	$\frac{1}{F_N} \ell_0$ nebo $\frac{1}{F_N} \ell_0 +  \delta $

Tato metoda konverguje **lineárně** s rychlostí  $\frac{1}{\tau} \approx 0.618$ , tj. *stejně* jako [metoda zlatého řezu](#)

“ Fibonacciho metoda je (*mírně*) přesnější, než *metoda zlatého řezu* (která lze vnímat jako *limitní varianta* Fibonacciho metody). Nicméně u Fibonacciho metody je při změně  $N$  potřeba **všechny body přepočítat**, což u metody zlatého řezu **není**.

# Numerické metody v $\mathbb{R}^n$

```

 $\langle \cdot, \cdot \rangle$  \xdef\scal#1#2{\langle #1, #2 \rangle} \xdef\norm#1{\left\| \text{#1} \right\|}
\dist{\rho} \xdef\and{\&} \xdef\brackets#1{\left\{ #1 \right\}} \xdef\parc#1#2{\frac {\partial
#1}{\partial #2}} \xdef\mtr#1{\begin{pmatrix} #1 \end{pmatrix}}
\bm#1{\boldsymbol{#1}} \xdef\mc#1{\mathcal{#1}}
\vv#1{\mathbf{#1}} \xdef\vp#1{\pmb{#1}} \xdef\ve{\varepsilon} \xdef\l{\lambda}
\th{\vartheta} \xdef\alpha{\alpha} \xdef\vf{\varphi} \xdef\Tagged#1{\text{#1}}
\tagged*#1{\text{#1}} \tagEqHere#1#2{\href{#2\#eq-#1}{\text{#1}}}
\tagDeHere#1#2{\href{#2\#de-#1}{\text{#1}}} \tagEq#1{\href{\#eq-
#1}{\text{#1}}} \tagDe#1{\href{\#de-#1}{\text{#1}}} \xdef\T#1{\htmlId{eq-
#1}{#1}} \xdef\D#1{\htmlId{de-#1}{\vv{#1}}} \xdef\conv#1{\mathrm{conv}}, #1}
\cone#1{\mathrm{cone}}, #1} \xdef\aff#1{\mathrm{aff}}, #1} \xdef\lin#1{\mathrm{Lin}},
#1} \xdef\span#1{\mathrm{span}}, #1} \xdef\O{\mathcal O} \xdef\ri#1{\mathrm{ri}}, #1}
\rd#1{\mathrm{r}\partial}, #1} \xdef\interior#1{\mathrm{int}}, #1} \xdef\proj{\Pi}
\epi#1{\mathrm{epi}}, #1} \xdef\grad#1{\mathrm{grad}}, #1}
\gradT#1{\mathrm{grad}^T #1} \xdef\gradx#1{\mathrm{grad}_x #1}
\xdef\hess#1{\nabla^2, #1} \xdef\hessx#1{\nabla^2_x #1} \xdef\jacobx#1{D_x #1}
\xdef\jacob#1{D #1} \xdef\subdif#1{\partial #1} \xdef\co#1{\mathrm{co}}, #1}
\xdef\iter#1{\text{#1}} \xdef\str{\text{*}} \xdef\spv{\mc V} \xdef\civ{\mc U}
\xdef\knvxProg{\tagEqHere{4.1}{./nutne-a-postacujici-podminky-optimality}} \, \, \text{and} \,
\tagEqHere{4.2}{nutne-a-postacujici-podminky-optimality}}

```

Budeme se věnovat úlohám (přesněji numerickým metodám jejich řešení) typu  $f(x) \rightarrow \min$ ,  $x \in \mathbb{R}^n$ , kde  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  je (jednou/dvakrát/třikrát) **spojitě diferencovatelná** funkce. Obecně jsou metody numerické optimalizace založeny na **minimalizační posloupnosti**  $x^k$  definované jako  $x^{k+1} = x^k + a_k h_k$ , kde  $a_k \in \mathbb{R}$  se nazývá **délka  $k$ -tého kroku** a vektor  $h_k \in \mathbb{R}^n$  je **směr  $k$ -tého vektoru**.

“ Budeme uvažovat tzv. **přesnou minimalizaci**, kdy dílčí minimalizace řešíme přesně (nikoliv numerickými metodami)

“ Všechny následující metody jsou **spádové**

# Metoda největšího spádu

U této metody volíme  $h_k = -\text{grad } f(x^{[k]})$ , přičemž délku kroku volíme **přesným řešením** úlohy  $f(x^{[k+1]}) = f(x^{[k]} - \alpha_k \text{grad } f(x^{[k]})) = \min_{\alpha \geq 0} f(x^{[k]} - \alpha \cdot \text{grad } f(x^{[k]}))$ . Dále bude platit, že vektory určené body  $x^{[k+1]}$ ,  $x^{[k]}$  a  $x^{[k+2]}$ ,  $x^{[k+1]}$  jsou na sebe **ortogonální**. Z tohoto dostáváme, že pro daný směr hledáme **nejblížší** vrstevnici, která bude **tečná** k tomuto vektoru.

Tato metoda je **prvního řádu** (stačí nám pouze gradient).

“V některých případech dochází k tzv. "cik-cak" efektu (klikatění), kdy se minimalizující posloupnost dostává k optimu velmi pomalu. Toto se děje například u **Rosenbrockovy (banánové) funkce** (jedna z *testovacích funkcí*)

## Kvadratické funkce

Nechť  $f$  je kvadratická funkce tvaru  $f(x) = \frac{1}{2} \text{scal} \{Qx\} x - x^T b$ , kde  $Q = Q^T > 0$  je **symetrická**  $n \times n$  matice a  $b \in \mathbb{R}^n$ . Taková funkce  $f$  je **ostře** (i *silně*) konvexní. Z pozitivní definitnosti  $Q$  dostáváme, že vlastní čísla matice  $Q$  jsou **kladné** a můžeme je uspořádat následovně  $0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ . Díky tomu můžeme úlohu  $\text{Eq}\{3.2.1\}$  vyřešit "přímo" jako  $x^* = Q^{-1} b$ , nicméně počítání inverze může být **velice náročné** (výpočetně).

V tomto případě je gradient  $g$  funkce  $f$  dán jako  $g(x) := \text{grad } f(x) = Qx - b$ , tedy v jednotlivých iteracích dostáváme  $g_k := Qx^{[k]} - b$  a  $\alpha_k$  můžeme určit jako  $\alpha_k = \frac{g_k^T g_k}{g_k^T Q g_k} \in [1/\lambda_n, 1/\lambda_1]$

Nyní se zaměříme na konvergenci metody, kterou můžeme zkoumat pomocí  $E(x) := f(x) - f(x^*) = \frac{1}{2} (x - x^*)^T Q (x - x^*)$

## Lemma $\text{D}\{3.2.1\}$ (Konvergence metody největšího spádu)

Platí  $E(x^{[k+1]}) = \left(1 - \frac{(g_k^T g_k)^2}{(g_k^T Q g_k)(g_k^T Q^{-1} g_k)}\right) E(x^{[k]})$

Z Lemmatu  $\text{De}\{3.1.2\}$  okamžitě plyne, že pokud pro nějaké  $k \in \mathbb{N}$  nastane  $1 = \frac{(g_k^T g_k)^2}{(g_k^T Q g_k)(g_k^T Q^{-1} g_k)}$ ,  $\text{tag}\{3.2.1-a\}$  tak v  $k+1$  metoda největšího spádu nalezne řešení **přesně**. V opačném případě je metoda **nekonečně-kroková**.

Rovnost  $\text{tag}\{3.2.1-a\}$  nastane v případě, že  $g_k$  je **vlastním vektorem** matice  $Q$ , jinak řečeno gradient musí mířit **do středu** elipsy (*elipsoidu*).

V případě, že  $\|x_1 - x_n\|$  je konvergence **superlineární**. Naopak pokud  $\|x_1 - x_n\| \neq \|x_{n-1} - x_n\|$ , tak může být konvergence **velice pomalá**. Ve skutečnosti ještě rychlost konvergence závisí na počátečním  $x^{[0]}$

## Nekvadratické funkce

V případě nekvadratické funkce je metoda největšího spádu schopna nalézt **pouze stacionární body**.

### Lemma 3.2.2iii) (Lokální konvergence)

Nechť  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  je **spojitě diferencovatelná**. Jestliže bod  $x^{[0]} \in \mathbb{R}^n$  je takový, že množina  $\{x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) \leq f(x^{[0]})\}$  je **ohraničená**, pak posloupnost  $\{x^{[k]}\}$  generovaná metodou největšího spádu konverguje k bodu  $x^*$ , kde  $\nabla f(x^*) = 0$ .

Pokud konverguje  $\{x^{[k]}\}$  k bodu  $x^*$  a funkce  $f$  je **dvakrát** spojitě diferencovatelná **na okolí**  $x^*$  a platí  $\alpha \leq \lambda_{\min}(\nabla^2 f(x^*)) \leq A$ , kde  $\alpha, A > 0$  (tedy  $f$  je v okolí  $x^*$  **silně konvexní**), pak metoda konverguje (**alespoň**) s rychlostí  $\left(\frac{A - \alpha}{A + \alpha}\right)^2$

“ Tedy i pro nekvadratické funkce hraje velkou roli podmíněnost matice  $\nabla^2 f(x^*)$

“ Metoda největšího spádu se nejčastěji využívá v jiných metodách jako pomocné, když ony metody samotné v tu chvíli neposkytují dostatečné zlepšení

Celkem můžeme *metodu největšího spádu* shrnout:

- **globální** konvergence (pro nekvadratické metody za dalších předpokladů)
- **pomalá** konvergence
  - mnohdy numericky ani nekonverguje
- je základem pro další (lepší) metody

## Newtonova metoda

Hlavní myšlenkou Newtonovy metody je, že v  $(k+1)$ -kroku, kde  $k \in \mathbb{N}_0$ , funkci  $f$  aproximujeme **Taylorovým polynomem druhého řádu** se středem v bodě  $x^{[k]}$  a jako  $x^{[k+1]}$  volíme bod, ve kterém tento polynom nabývá svého minima.

Jinak řečeno místo **tečné nadroviny** k funkci konstruuujeme **tečnou  $n$ -rozměrnou parabolou**

Tedy místo funkce  $f$  uvažujeme v  $k$ -tém kroku  $T_k(x) := f(x^{[k]}) + \nabla f(x^{[k]})^T (x - x^{[k]}) + \frac{1}{2} (x - x^{[k]})^T \nabla^2 f(x^{[k]}) (x - x^{[k]}) \approx f(x)$

Jelikož hledáme řešení  $T_k(x) \rightarrow \min$ , tak výraz výše první zderivujeme, z čehož dostaneme  $\nabla T_k(x) = \nabla f(x^{[k]}) + \nabla^2 f(x^{[k]}) (x - x^{[k]})$ , což v případě **regulární** matice  $\nabla^2 f(x^{[k]})$  vede na  $x^{[k+1]} = x^{[k]} - (\nabla^2 f(x^{[k]}))^{-1} \nabla f(x^{[k]})$

“ Pro  $\nabla^2 f(x) > 0$  je funkce **konvexní** a nalezneme **minimum**

Nicméně je důležité podotknout, že výpočet  $(\nabla^2 f(x^{[k]}))^{-1}$  je **velmi výpočetně náročný**. Avšak v případě **kvadratické funkce** Newtonova metoda nalezne řešení **v jednom kroku**, tedy její rychlost konvergence je **superlineární** s řádem  $\infty$ .

Regularita matice  $\nabla^2 f(x^{[k]})$  je velmi důležitá pro konvergenci, viz následující věta.

## Věta $D\{3.2.5\}$

Nechť  $f \in C^3$  v okolí bodu  $x^* \in \mathbb{R}^n$ , který je **nedegenerovaným minimem**, tj.  $\nabla f(x^*) = 0$  a  $\nabla^2 f(x^*) > 0$ . Potom pro  $x^{[0]} \in \mathbb{R}^n$  dostatečně blízko  $x^*$  konverguje  $\{x^{[k]}\}$  generovaná Newtonovou metodou k bodu  $x^*$  **superlineárně** s řádem (alespoň)  $p = 2$  (tj. *kvadraticky*).

“ Zde určit, co znamená "dostatečně blízko  $x^*$ " je obtížné

Celkem můžeme *Newtonovu metodu* shrnout jako:

- **velmi rychlá** konvergence
- nutnost **dostatečně blízké počáteční aproximace**
- velmi velká výpočetní náročnost při velkém  $n$  (počtu dimenzí)

## Metoda sdružených gradientů

Uvažujme situaci v úloze  $\text{tagEq}\{3.2.1\}$ , kdy máme funkci  $f(x) = \frac{1}{2} x^T Q x - b^T x$   $\text{tag}\{T\{MSG\}\}$ , kde  $Q = Q^T \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ,  $Q > 0$  je symetrická matice a  $b \in \mathbb{R}^n$ .

Pak nalezení úlohy  $\text{tagEq}\{3.2.1\}$  a  $\text{tagEq}\{MSG\}$  je ekvivalentní s řešením úlohy  $Qx = b$   $\text{tag}\{T\{MSGa\}\}$ , kterou umíme řešit například Gaussovou eliminací.

Metoda sdružených gradientů je v případě  $Q > 0$  přímou metodou, která dojde k řešení  $\text{tagEq}\{\text{MSGa}\}$  po  $n$  krocích. Nicméně tento fakt lze brát také jako, že je to iterační metoda s velmi rychlou konvergencí v případě pozitivně definitní matice.

## Definice $\text{D}\{3.2.7\}$ ( $Q$ -sdružené vektory)

Nechť  $Q = Q^T \in \mathbb{R}^{n \times n}$  je **pozitivně definitní**. Vektory  $h_1, h_2 \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$  se nazývají  **$Q$ -sdružené** (nebo také  **$Q$ -ortogonální**), jestliže  $\text{scal}\{Qh_1\} \{h_2\} = h_1^T Q h_2 = 0$ . Systém vektorů  $\{h_0, \dots, h_{m-1}\} \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$  pro  $m \in \{2, \dots, n\}$  se nazývá  **$Q$ -sdružený**, jestliže  $\text{scal}\{Q h_i\} \{h_j\} = 0$   $\text{pro } i \neq j$ .

## Věta $\text{D}\{3.2.8\}$

Nechť systém vektorů  $\{h_0, \dots, h_{m-1}\} \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$  s  $m \in \{2, \dots, n\}$  je  **$Q$ -sdružený**. Potom jsou tyto vektory **lineárně nezávislé**.

## Věta $\text{D}\{3.2.9\}$

Nechť  $m \in \{2, \dots, n\}$  a mějme systém  **$Q$ -sdružených** vektorů  $\{h_0, \dots, h_{m-1}\} \in \mathbb{R}^n$ . Nechť  $x_{\text{iter } 0}$  je **dáno** a body  $x_{\text{iter } 1}, \dots, x_{\text{iter } m}$  jsou dány jako  $x_{\text{iter } k+1} = x_{\text{iter } k} + \alpha_k h_k = x_{\text{iter } 0} + \sum_{i=0}^k \alpha_i h_i$ ,  $\text{quad } k \in \{0, \dots, m-1\}$ ,  $\text{tag}\{\text{T}\{3.2.8\}\}$  kde  $\alpha_k$  jsou volena tak, že  $f(x_{\text{iter } k} + \alpha_k h_k) = \min_{\alpha \in \mathbb{R}} f(x_{\text{iter } k} + \alpha h_k)$  pro  $k \in \{0, \dots, m-1\}$  (tj. jsou volena **přesnou minimalizací**). Pak pro kvadratickou funkci  $f$  definovanou v  $\text{tagEq}\{\text{MSG}\}$  platí  $f(x_{\text{iter } m}) = \min_{x \in X_m} f(x)$ , kde  $X_m := \text{lin}\{h_0, \dots, h_{m-1}\}$  (viz **Definice**  $\text{tagDeHere}\{2.1.6\}$  ./konvexni-mnoziny) - lineární obal). Zejména pro  $m = n$  dostáváme  $f(x_{\text{iter } n}) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$ , tj.  $x_{\text{iter } n}$  je řešením úlohy  $\text{tagEq}\{3.2.1\}$   $\wedge$   $\text{tagEq}\{\text{MSG}\}$ .

“ Nalezení  **$Q$ -sdružených** vektorů lze provést zobecněným **Gram-Schmidtovým ortogonalizačním procesem** (ten je uveden v Lin. Alg. ve speciálním tvaru pro  $Q = I$ ).

Explicitně můžeme odvodit délku  $\alpha_k$ -tého kroku jako  $\alpha_k = - \frac{h_k^T \text{grad } f(x_{\text{iter } k})}{h_k^T Q h_k}$   $\text{tag}\{\text{T}\{3.2.9\}\}$

Celkem můžeme metodu popsat následovně  $h_0 := -\text{grad } f(x_{\text{iter } 0})$ ,  $\text{quad } h_k := -\text{grad } f(x_{\text{iter } k}) + \beta_{k-1} h_{k-1}$   $\text{tag}\{3.2.10\}$   $\beta_{k-1} := \frac{h_{k-1}^T \text{grad } f(x_{\text{iter } k})}{h_{k-1}^T Q h_{k-1}}$   $\text{tag}\{3.2.11\}$ , přičemž body minimalizující posloupnosti jsou počítány podle **Věty**  $\text{tagDe}\{3.2.9\}$ .

“ Tento výpočet lze "zjednodušit", viz  $\text{Tagged}\{3.2.12\}$  v přednášce.



Hlavní výhodou **metody sdružených gradientů** je její **snadná implementace**, naopak nevýhodou citlivost na podmíněnost matice  $Q$ . Také se daří říct, že metoda sdružených gradientů **konverguje nejrychleji** z metod založených pouze na *maticovém násobení*.

Pro nekvadratické funkce používáme stejný algoritmus jako doted' až na volbu  $\beta_k$ , ale metodu restartujeme po  $n$  krocích

## Věta D{3.2.13} (Rychlost konvergence)

Nechť  $f \in C^3$  na  $\mathbb{R}^n$ ,  $x_{\text{iter } 0} \in \mathbb{R}^n$  a  $x^*$  je **nedegenerované lokální minimum**, tj.  $\text{grad } f(x^*) = 0$  a  $\text{hess } f(x^*) > 0$ . Nechť  $x_{\text{iter } k}$  je výsledek **metody sdružených gradientů** s cyklem délky  $n$  a výchozím bodem  $x_{\text{iter } \{k-1\}}$  a nechť  $x_{\text{iter } k} \rightarrow x^*$  pro  $k \rightarrow \infty$ . Potom **minimalizující posloupnost**  $\{x_{\text{iter } k}\}$  konverguje **superlineárně** s řádem **alespoň**  $p = 2$ .

“ MSG souvisí s metodami *Krylovových podprostorů*.

# Obecný úvod

- $m$  - počet omezení

- $k$  - počet nerovností (tzn.  $g_1, \dots, g_k$  jsou **nerovnosti**, zbytek rovnosti)

Omezení zakomponovaná v  $P$  se nazývají **přímá**, naopak omezení ve formě  $g_i$  se nazývají **funkcionální**. Dále definujeme

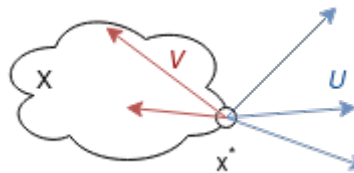
- **množinu přípustných vektorů**

$$\text{spv}(x^*, X) := \{h \in \mathbb{R}^n \mid \exists \lambda, \lambda_0 > 0 : x^* + th \in X \text{ pro } t \in (0, \lambda_0)\}$$

- je to **kužel**

- **množinu spádových vektorů (kužel zlepšujících vektorů)**

$$\text{civ}(x^*, f) := \{h \in \mathbb{R}^n \mid \exists \lambda, \lambda_0 > 0 : x^* + th \in D(f); \text{ a } f(x^* + th) < f(x^*) \text{ pro } t \in (0, \lambda_0)\}$$



## Lemma 4.1.1

Nechť  $X \subseteq \mathbb{R}^n$  a  $f: X \rightarrow \mathbb{R}$  jsou dány. Je-li bod  $x^* \in X$  lokálním řešením úlohy 4.1, potom  $\text{spv}(x^*, X) \cap \text{civ}(x^*, f) = \emptyset$

## Definice 4.1.2 (Stacionární bod)

Nechť množina  $X \subseteq \mathbb{R}^n$  je **konvexní** a funkce  $f: X \rightarrow \mathbb{R}$  je **diferencovatelná** na (nějaké otevřené množině obsahující)  $X$ . Řekneme, že bod  $x^* \in X$  je **stacionárním bodem** úlohy 4.1 (nebo také **stacionárním bodem funkce**  $f$  na množině  $X$ ), jestliže  $\nabla f(x^*)^T (x - x^*) \geq 0$  pro každé  $x \in X$ .

“ Výraz v 4.1.2 je **směrová derivace**  $x^*$  do libovolného bodu v  $X$  - v těchto směrech musí být  $f$  **neklesající**

Pro  $X = \mathbb{R}^n$  je podmínka 4.1.2 splněna **pouze** v případě  $\nabla f(x^*) = 0$

Dále ukažme, že **stacionární bod** ve smyslu Definice 4.1.2 má vlastnosti, které od něj očekáváme.

## Věta 4.1.3 (Vlastnosti stacionárního bodu)

Nechť  $f: X \rightarrow \mathbb{R}$  je **diferencovatelná** na (nějaké otevřené množině obsahující **konvexní** množinu)  $X \subseteq \mathbb{R}^n$ .

1. Je-li  $x^* \in X$  **lokálním extrémem** funkce  $f$  na  $X$  (tj. *lokálním* řešením úlohy  $\tag{4.1}$ ), pak  $x^*$  je **stacionárním bodem** funkce  $f$  na  $X$
2. Naopak, je-li  $f$  (*ostře*) **konvexní** na  $X$  a  $x^* \in X$  je **stacionárním bodem**  $f$  na  $X$ , pak  $x^*$  je (*jediným*) řešením úlohy  $\tag{4.1}$ , tj. (*jediným*) **globálním minimem**  $f$  na  $X$ .

Pokud avšak  $f$  **není konvexní**, potřebujeme o rozhodnutí "extrémnosti" stacionárního bodu další nástroje

## Nutná podmínka pro $\tag{4.1}$

Je-li  $x^* \in X$  **lokálním minimem** funkce  $f: X \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $f \in C^2$ , na **konvexní** množině  $X \subseteq \mathbb{R}^n$ , pak  $(x - x^*)^T \nabla f(x^*) (x - x^*) \geq 0$  pro všechna  $x \in X$  taková, že  $\nabla f(x^*) (x - x^*) = 0$ , tj. pro vektory  $(x - x^*) \in \ker \nabla f(x^*)$

## Postačující podmínka pro $\tag{4.1}$

Bod  $x^*$  je **lokálním minimem** funkce  $f: X \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $f \in C^2$ , na **konvexní** množině  $X \subseteq \mathbb{R}^n$ , jestliže  $\nabla f(x^*) (x - x^*) \geq 0$ ,  $\forall x \in X$ , (tj. je to **stacionární bod** ve smyslu Definice  $\tag{4.1.2}$ ), množina  $X$  je **polyedr** a platí  $(x - x^*)^T \nabla f(x^*) (x - x^*) > 0$  pro všechna  $x \in X$  taková, že  $x \neq x^*$  a  $(x - x^*) \in \ker \nabla f(x^*)$

“ Je-li  $X$  **polyedr**, pak je  $\text{spv}(x^*, X)$  **uzavřená**

# Nutné a postačující podmínky optimality

Uvažujme přidruženou **Lagrangeovu funkci**  $L: \mathbb{R} \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$  k úloze  $\tag{4.1}$   $\wedge$   $\tag{4.2}$  definovanou jako  $L(x, y_0, y) := y_0 f(x) + \sum_{i=1}^m y_i g_i(x)$ ,  $\tag{4.1.2}$   $\nabla$  přičemž v případě  $y_0 = 1$  bude  $L(x, 1, y) := L(x, y)$ . Navíc čísla  $y_0, \dots, y_m$  nazýváme **Lagrangeovými multiplikátory**.

“ Omezení nazveme **aktivní**, pokud se realizuje jako **rovnost**

Dále ještě zavedme následující  $Q := \{y = (y_1, \dots, y_m)^T \mid y_1, \dots, y_k \geq 0\}$  a dvě další množiny:

- **Množinu aktivních omezení** v bodě  $x \in X$   
 $I(x) := \{i \in \{1, \dots, k\} \mid g_i(x) = 0\}$ ,  $\forall x \in X$

- **Množinu indexů** všech funkcí, které se v bodě  $x$  realizují jako rovnost  $S(x) := \bigcup_{k=1, \dots, m} \{x \in X \mid$

## Věta D{4.2.1} (Lagrangeův princip)

Nechť množina  $P \subseteq \mathbb{R}^n$  je **konvexní**, funkce  $f, g_1, \dots, g_k : P \rightarrow \mathbb{R}$  jsou **diferencovatelné** v bodě  $x^* \in X$  a  $g_{k+1}, \dots, g_m$  jsou **spojitě diferencovatelné** na nějakém okolí bodu  $x^*$ . Je-li bod  $x^* \in X$  **lokálním řešením** úlohy  $\tag{Eq{4.1}} \quad \text{; } \tag{Eq{4.2}}$ , pak existují **Lagrangeovy multiplikátory**  $y_0 > 0$  a  $y \in Q$  takové, že **ne všechna**  $y_0, \dots, y_m$  jsou **nulová** a platí  $\text{scal} \{ \text{grad}_x L(x, y_0, y) \} \{x - x^*\} \geq 0 \quad \forall x \in P \tag{T{4.2.3}}$   $y_i g_i(x) = 0, \quad i = 1, \dots, m \tag{T{4.2.4}}$

Podmínka  $\tag{Eq{4.2.3}}$  znamená, že  $x$  musí být **stacionárním bodem** funkce  $L(x, y_0, y)$  (*podmínka stacionarity*). Dále podmínka  $\tag{Eq{4.2.4}}$  se nazývá **podmínka komplementarity** a požadavek  $y_1, \dots, y_k > 0$  jako **podmínka duality**.

“ Jistě  $y_0, y_1, \dots, y_k \geq 0, y_{k+1}, \dots, y_m \in \mathbb{R} \iff y_0 > 0 \text{ a } y \in Q$

Jelikož situace s  $y_0 = 0$  je problematická, existují podmínky na zaručení  $y_0 \neq 0$ , což je ekvivalentní s  $y_0 = 1$ . Tyto podmínky se nazývají **podmínky kvalifikovaného omezení**:

- **Regulárnost bodu**  $x$ , tj. bod  $x$  je **regulární**, pokud jsou  $\text{grad } g_i(x)$  pro  $i \in S(x)$  **lineárně nezávislé** (tj. *gradienty aktivních omezení jsou LNŽ*)
- **afinní omezení** - funkce  $g_1, \dots, g_m$  jsou **afinní**
- **Slaterova podmínka** -  $g_1, \dots, g_k$  jsou **konvexní**,  $g_{k+1}, \dots, g_m$  jsou **afinní**, **konstantní** vektory  $\text{grad } g_i$  jsou **lineárně nezávislé** pro  $i \in \{k+1, \dots, m\}$  a existuje  $\bar{x} \in P$  takové, že  $g_i(\bar{x}) < 0$  pro  $i \in \{1, \dots, k\}$  a  $g_j(\bar{x}) = 0$  pro  $j \in \{k+1, \dots, m\}$

## Důsledek D{4.2.2}

Nechť  $P \subseteq \mathbb{R}^n$  je **konvexní** množina, funkce  $f, g_1, \dots, g_m$  jsou **diferencovatelné** na (nějaké otevřené množině obsahující)  $P$  a pro  $x \in X$  existují multiplikátory  $y \in Q$  takové, že platí  $\tag{Eq{4.2.3}}$  &  $\tag{Eq{4.2.4}}$  s  $y_0 = 1$ . Nechť je dále splněn (*alespoň*) jeden z následujících předpokladů:

1. funkce  $L(x, y)$  je **konvexní** na množině  $P$
2. úloha  $\tag{Eq{4.1}}$  &  $\tag{Eq{4.2}}$  je úlohou **konvexního programování**, tj. na **konvexní** množině  $P$  jsou funkce  $f, g_1, \dots, g_k$  **konvexní** a  $g_{k+1}, \dots, g_m$  **afinní**

Pak bod  $x$  je **globálním řešením** úlohy  $\tag{Eq{4.1}}$  &  $\tag{Eq{4.2}}$ .

## Věta 4.2.3 (Karushova-Kuhnova-Tuckerova v diferenciálním tvaru)

Nechť  $P \subseteq \mathbb{R}^n$  je **konvexní** množina, funkce  $f, g_1, \dots, g_k$  **konvexní** a **diferencovatelné** na (nějaké otevřené množině obsahující)  $P$ , funkce  $g_{k+1}, \dots, g_m$  **afinní** na  $P$  a nechť platí (alespoň) jedna z následujících podmínek:

1. **(LNZ)** množina  $P$  je **otevřená**, vektory  $\nabla g_i(x)$ ,  $i \in S(x)$  jsou **lineárně nezávislé** pro každé  $x \in X$ .
2. **(Slaterova)** funkcionální omezení jsou pouze tvaru **nerovností**, tj.  $k = m$ , a **existuje** bod  $\bar{x} \in P$  takový, že  $g_i(\bar{x}) < 0$  pro  $i \in \{1, \dots, k\}$
3. **(lineární)** množina  $P$  je **polyedr** a funkce  $g_1, \dots, g_k$  jsou **afinní**

Pak  $x^*$  je řešením úlohy 4.1 & 4.2 právě tehdy, když existuje  $y^* \in Q$  takové, že platí 4.2.3 & 4.2.4 s  $y_0^* = 1$ .

## Věta 4.2.4

Nechť funkce  $f, g_1, \dots, g_m$  jsou **dvakrát spojitě** diferencovatelné v bodě  $x^*$  a  $x^* \in \text{interior } P$  je takový, že **existují** multiplikátory  $y^* \in Q$  splňující 4.2.3 & 4.2.4 s  $y_0^* = 1$  a současně  $y_i^* > 0$  pro  $i \in I(x^*)$  (tzv. **podmínka ostré komplementarity**), tj.  $\nabla_x L(x^*, y^*) = 0$ ,  $g_i(x^*) \leq 0$  pro  $i \in \{1, \dots, k\}$ ,  $g_i(x^*) = 0$  pro  $i \in \{k+1, \dots, m\}$ ,  $y_i^* > 0$  pro  $i \in I(x^*)$ ,  $y_i^* = 0$  pro  $i \in \{1, \dots, k\} \setminus I(x^*)$ ,  $y_i^* \in \mathbb{R}$  pro  $i \in \{k+1, \dots, m\}$ . Jestliže  $\text{hess}_x L(x^*, y^*) > 0$  na  $\ker(\nabla_x^T g_i(x^*))_{i \in S(x^*)}$ , tj.  $h^T \text{hess}_x L(x^*, y^*) h > 0$  pro všechna  $h \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$  taková, že  $\text{scal} \{ \nabla g_i(x^*) \} h = 0$  pro  $i \in S(x^*)$ , pak bod  $x^*$  je **ostré lokální minimum** funkce  $f$  na množině  $X$ .

# Duální úloha

```

 $\left\langle \cdot, \cdot \right\rangle$   $\|\cdot\|$   $\frac{\partial}{\partial \cdot}$   $\begin{pmatrix} \cdot \\ \cdot \end{pmatrix}$   $\mathbf{\cdot}$   $\mathcal{M}$   $\mathbf{v}$   $\mathbf{v}^\top$   $\varepsilon$   $\lambda$   $\theta$   $\alpha$   $\varphi$   $\text{\tagged{#1}}$   $\text{\tagged*{#1}}$   $\text{\tagEqHere{#2}{#eq-#1}}{\text{\tag{#1}}}$   $\text{\tagDeHere{#2}{#de-#1}}{\text{\tag{#1}}}$   $\text{\tagEq{#1}}{\text{\tag{#1}}}$   $\text{\tagDe{#1}}{\text{\tag{#1}}}$   $\text{\tagT{#1}}{\text{\tag{#1}}}$   $\text{\tagD{#1}}{\text{\tag{#1}}}$   $\text{\tagconv{#1}}$   $\text{\tagcone{#1}}$   $\text{\tagaff{#1}}$   $\text{\taglin{#1}}$   $\text{\tagspan{#1}}$   $\text{\tagO{#1}}$   $\text{\tagri{#1}}$   $\text{\tagrd{#1}}$   $\text{\taginterior{#1}}$   $\text{\tagproj{#1}}$   $\text{\tagepi{#1}}$   $\text{\taggrad{#1}}$   $\text{\taggradT{#1}}$   $\text{\taggradx{#1}}$   $\text{\taghess{#1}}$   $\text{\taghessx{#1}}$   $\text{\tagsubdif{#1}}$   $\text{\tagco{#1}}$   $\text{\tagiter{#1}}$   $\text{\tagstr{#1}}$   $\text{\tagspv{#1}}$   $\text{\tagciv{#1}}$   $\text{\tagknvxProg{#1}}$   $\text{\tagEqHere{4.1}}$   $\text{\tagEqHere{4.2}}$ 

```

## Definice $\text{\tagD{4.3.1}}$ (Kuhnovy-Tuckerovy vektory)

Vektor  $y \in Q$  (prvních  $k$  složek je nezáporných) se nazývá **Kuhnovým-Tuckerovým** vektorem (**K-T** vektorem) úlohy  $\text{\tagknvxProg}$ , jestliže  $f(x) + \sum_{i=1}^m y_i g_i(x) = L(x, y) \leq 0$  pro všechna  $x \in P$ , kde  $f(x) := \inf_{x \in X} f(x)$  je hodnota úlohy  $\text{\tagknvxProg}$ .

“ **K-T** vektor pro danou úlohu **nemusí** existovat

## Věta $\text{\tagD{4.3.2}}$

Nechť úloha  $\text{\tagknvxProg}$  je úlohou **konvexního programování**, tj. množina  $P \subseteq \mathbb{R}^n$  je **konvexní**, funkce  $f, g_1, \dots, g_k$  **konvexní** a  $g_{k+1}, \dots, g_m$  jsou **afinní**, a nechť dále platí (alespoň) jedna z podmínek **regularity**:

1. **(Slaterova)**  $k = m$  a existuje  $\bar{x} \in P$  takové, že  $g_i(\bar{x}) < 0$  pro  $i = 1, \dots, m$

2. **(lineární)** množina  $P$  je **polyedr**, funkce  $f, g_1, \dots, g_k$  jsou **afinní** a  $X \neq \emptyset$ .

Pak **existuje K-T** vektor úlohy  $\text{knvxProg}$ .

“ Zde se podmínka 2. liší od podmínky 3. ve **Větě 4.2.3** - vyžaduje ještě **neprázdnot** přípustné množiny

Úloha konvexního programování splňující nějakou z podmínek z Věty 4.3.2 se nazývá **regulární**.

## Definice 4.3.3 (Duální úloha)

Nechť  $y \in Q$ . Definujme funkci  $\varphi(y) := \inf_{x \in P} L(x, y) = \inf_{x \in P} (f(x) + \sum_{i=1}^m y_i g_i(x))$  a množinu (tzv. **efektivní definiční obor**)  $Y := \{y \in Q \mid \varphi(y) > -\infty\}$ . Pak úloha  $\varphi(y) \rightarrow \max, y \in Y$  se nazývá **duální úlohou** k úloze  $\text{knvxProg}$ . Číslo  $\varphi^* := \sup_{y \in Y} \varphi(y)$  se nazývá **hodnotou duální úlohy**.

Úloha 4.3.1 je úlohou **konkávního** programování, tj. množina  $Y$  je **konvexní** a funkce  $\varphi$  je **konkávní** na  $Y$ .

## Věta 4.3.5 (Slabá věta o dualitě)

Pro každé  $x \in X$  a každé  $y \in Q$  platí  $f(x) \geq \varphi(y)$ . Zejména, pokud  $X \neq \emptyset$  a  $Y \neq \emptyset$ , pak  $\varphi^* \leq f^*$ .

“ V případě  $X = \emptyset$  a/nebo  $Y = \emptyset$  je nerovnost splněna *triviálně*, neboť  $\inf \emptyset = \infty$  a  $\sup \emptyset = -\infty$ .

Věta 4.3.5 říká, že pro **duální rozdíl**  $g(x, y)$  s  $x \in X \neq \emptyset$  a  $y \in Y \neq \emptyset$  bude platit  $g(x, y) := f(x) - \varphi(y) \geq 0$ . Navíc číslo  $g(x^*, y^*) := f^* - \varphi^*$  udává tzv. **optimální duální rozdíl** (*optimal duality gap*). Dá se také říct, že pro libovolné  $y \in Q$  je hodnota  $\varphi(y)$  **dolní hranicí minima účelové** funkce úlohy  $\text{knvxProg}$ .

## Certifikát optimality

Jsou-li  $x^* \in X$  a  $y^* \in Q$  taková, že platí  $f(x^*) = \varphi(y^*)$ , pak  $x^*$  a  $y^*$  jsou **optimálními řešeními** svých příslušných úloh.



Duální rozdíl je úzce spjat s **existencí K-T vektorů**. Jestliže je duální rozdíl **nenulový**, tj.  $f^* > v^*$ , pak **množina K-T vektorů musí být prázdná**.

“ Jinak řečeno, **existence K-T** vektorů zaručuje  $f^* = v^*$

**Věta 4.3.6 (Silná věta o dualitě)**

Nechť úloha  $\text{knvxProg}$  je **regulární úlohou** konvexního programování (viz. Věta 4.3.2). Pokud  $f^* > -\infty$ , pak platí tzv. **vztah duality**  $f^* = v^*$ , tj.  $\inf_{x \in P} \sup_{y \in Q} L(x,y) = \sup_{y \in Q} \inf_{x \in P} L(x,y)$ , přičemž množina řešení duální úlohy 4.3.1 je **neprázdná a shodná** s množinou všech **K-T vektorů** úlohy  $\text{knvxProg}$ .

Z Věty 4.3.6 vyplývá, že pokud  $\text{knvxProg}$  je **regulární úlohou konvexního programování** (viz Věta 4.3.2) a

- 1. jestliže  $Y \neq \emptyset$ , pak **duální úloha je řešitelná** a  $f^* > -\infty$
- 2. jestliže  $Y = \emptyset$ , pak  $f^* = -\infty$

Celkem z Vět 4.3.5, 4.3.6 a z bezprostředně výše uvedeného důsledku vyplývá, že v případě **regulární úlohy konvexního programování** mohou nastat **pouze 2** možnosti

Duální Ú. \ Primární Ú.	Nepřípustná ( $f^* = -\infty$ )	Přípustná a Omezená	Neomezená ( $f^* = -\infty$ )
Neomezená ( $v^* = \infty$ )	NE (Ano bez <b>regularity</b> )	NE	NE
Přípustná a Omezená	NE (Možná bez <b>regularity</b> )	<b>ANO</b>	NE
Nepřípustná ( $v^* = -\infty$ )	NE (Ano bez <b>regularity</b> )	NE	<b>ANO</b>

“ Z **regularity** plyne, že  $X \neq \emptyset$

**Věta 4.3.8 (Kuhnova-Tuckerova v nediferenciálním tvaru)**

Nechť úloha  $\text{knvxProg}$  je **regulární úlohou konvexního programování** (viz Věta 4.3.2). Pak  $x^* \in X$  je řešením této úlohy právě tehdy, když platí (*alespoň*) jedna z podmínek:

- 1. existuje  $y^* \in Q$  takové, že  $f(x^*) = v(y^*)$

2. existuje  $y \in Q$  takové, že

$$L(x, y) = \min_{x \in P} L(x, y), \quad g_i(x) = 0,$$

$\forall i \in \{1, \dots, m\}$ . Navíc množina takovýchto vektorů  $y \in Q$  **splývá** s množinou **řešení duální** úlohy (a podle Věty 4.3.6 tedy i s množinou **K-T vektorů** úlohy  $(\text{knvxProg})$ ).

“ Jsou-li navíc funkce  $f, g_1, \dots, g_m$  **diferencovatelné** v bodě  $x$ , pak podmínka 4.3.2 je **ekvivalentní** s podmínkou 4.2.3 {./nutne-a-postacujici-podminky-optimality} **pro**  $y_0 = 1$ , zatímco 4.3.3 **odpovídá** 4.2.4 {./nutne-a-postacujici-podminky-optimality}.

Tedy Věta 4.3.8 je skutečně **zobecnění KKT Věty** 4.2.3 {./nutne-a-postacujici-podminky-optimality} pro případ **nediferencovatelných** funkcí

Také se dá říct, že koncept **K-T vektorů** je **zobecněním Lagrangeových multiplikátorů** s **kvalifikovanými omezeními** (kvůli  $y_0 = 1$ ) - **K-T vektory splývají s multiplikátory** za podmínek Věty 4.2.3 {./nutne-a-postacujici-podminky-optimality}

## Definice 4.3.9 (Sedlový bod)

Bod  $(x, y) \in P \times Q$  se nazývá **sedlovým bodem** Lagrangeovy funkce  $L(x, y)$  úlohy  $(\text{knvxProg})$  na  $P \times Q$ , jestliže  $L(x, y) \leq L(x, y^*) \leq L(x^*, y)$   $\forall x \in P, y \in Q$ , tj. platí  $L(x, y) = \max_{y \in Q} L(x, y) = \min_{x \in P} L(x, y)$

## Věta 4.3.10 (Kuhnova-Tuckerova pro sedlový bod)

Nechť úloha  $(\text{knvxProg})$  je **regulární úlohou** konvexní programování (viz Věta 4.3.2). Pak bod  $x \in P$  je **řešením** úlohy  $(\text{knvxProg})$  právě tehdy, když **existuje**  $y \in Q$  takové, že  $(x, y)$  je **sedlovým bodem** Lagrangeovy funkce  $L(x, y)$  úlohy  $(\text{knvxProg})$  na  $P \times Q$ .

# Analýza citlivosti

```

 $\langle \cdot, \cdot \rangle$   $\|\cdot\|$   $\frac{\partial}{\partial}$   $\begin{pmatrix} \cdot \\ \cdot \end{pmatrix}$   $\mathbf{\cdot}$   $\mathcal{\cdot}$   $\mathbf{v}$   $\mathbf{v}^p$   $\mathbf{v}^\epsilon$   $\lambda$   $\theta$   $\alpha$   $\varphi$   $\text{\tagged{#1}}$   $\text{\tagged{#1}}$   $\text{\tagEqHere{#2}{#eq-#1}}{\text{\tagged{#1}}}$   $\text{\tagDeHere{#2}{#de-#1}}{\text{\tagged{#1}}}$   $\text{\tagEq{#1}}{\text{\tagged{#1}}}$   $\text{\tagDe{#1}}{\text{\tagged{#1}}}$   $\text{\tagT{#1}}{\text{\tagged{#1}}}$   $\text{\tagD{#1}}{\text{\tagged{#1}}}$   $\text{\tagconv{#1}}$   $\text{\tagcone{#1}}$   $\text{\tagaff{#1}}$   $\text{\taglin{#1}}$   $\text{\tagspan{#1}}$   $\text{\tagO{#1}}$   $\text{\tagri{#1}}$   $\text{\tagrd{#1}}$   $\text{\taginterior{#1}}$   $\text{\tagproj{#1}}$   $\text{\tagepi{#1}}$   $\text{\taggrad{#1}}$   $\text{\taggradT{#1}}$   $\text{\taggradx{#1}}$   $\text{\taghess{#1}}$   $\text{\taghessx{#1}}$   $\text{\tagjacobx{#1}}$   $\text{\tagjacob{#1}}$   $\text{\tagsubdif{#1}}$   $\text{\tagco{#1}}$   $\text{\tagiter{#1}}$   $\text{\tagstr{#1}}$   $\text{\tagspv{#1}}$   $\text{\tagciv{#1}}$   $\text{\tagknvxProg{#1}}$   $\text{\tagEqHere{4.1}}$   $\text{\tagEqHere{4.2}}$ 

```

Nyní se budeme věnovat řešení úlohy matematické programování v **závislosti na parametru**.

První se podíváme na úlohu matematické programování **s omezeními pouze ve tvaru rovností**, ale s obecnou závislostí na parametrech.

A v druhém (a posledním) případě se podíváme na úlohu **s omezeními ve tvaru nerovností**, ale s parametry **pouze** v podobě **absolutních členů** ve funkcích zadávajících tyto omezení.

“ Zde je dobré podotknout, že druhý případ je mírně užitečnější a navíc si uvědomme, že **1 rovnost lze napsat jako 2 nerovnosti**

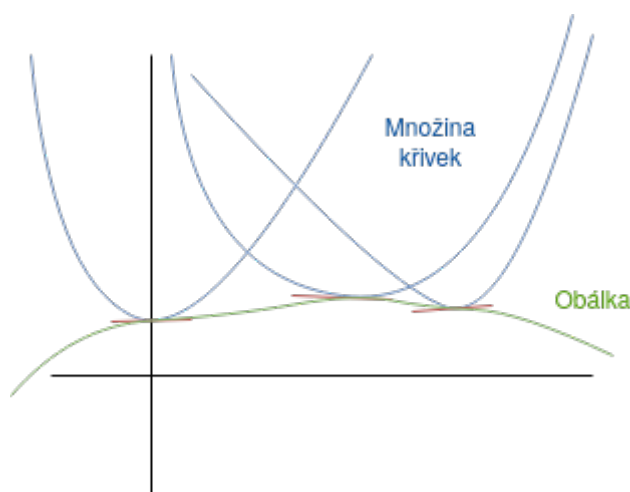
## Úlohy s rovnostmi

**Věta**  $\text{\tagD{4.4.1}}$  (O obálce)

Mějme úlohu  $f(x,r) \rightarrow \min, \text{qquad} g_1(x,r) = 0, \dots, g_m(x,r) = 0 \tag{AC.1}$  kde  $x \in \mathbb{R}^n, r \in \mathbb{R}^k, f, g_1, \dots, g_m \in C^1$ . Pripusťme, že pro **každou hodnotu parametru**  $r$  má úloha  $\tag{AC.1}$  **jediné řešení**, které označíme  $x^*(r)$ . Potom **hodnota úlohy**  $\tag{AC.1}$  je  $f^*(r) = f(x^*(r), r)$ . Je-li  $x^*(r)$  **diferencovatelná** vzhledem k  $r$  a **Jacobiho matice**  $G(x^*(r), r) \in \mathbb{R}^{m \times n}$  má **plnou hodnost**  $m$ , pak platí  $\frac{\partial f^*(r)}{\partial r_i} = \frac{\partial f}{\partial r_i}(x^*(r), r) + \sum_{j=1}^m y_j(r) \frac{\partial g_j}{\partial r_i}(x^*(r), r)$

“ Obálka je křivka, která se **množiny křivek dotýká** (tj. se dotýká každé křivky) a má společnou tečnu s danou křivkou

Jinak řečeno je **tečná** k množině **křivek**



Požadavky Věty  $\tag{4.4.1}$  jsou relativně silné, proto uveďme její "slabší verzi".

## Věta $\tag{4.4.2}$

Nechť  $f, g_1, \dots, g_m \in C^2$  a  $x^*$  je **lokálním řešením** úlohy  $f(x) \rightarrow \min, \text{qquad} g_1(x) = 0, \dots, g_m(x) = 0$  s odpovídajícími Lagrangeovými multiplikátory  $y^*$ . Nechť dále tato dvojice splňuje **postačující podmínku druhého řádu**, tj.  $\text{hess}_x L(x^*, y^*) > 0$  na  $\ker \text{Jacobi } G(x^*)$ , přičemž současně  $x^*$  je **regulárním bodem**, tj.  $\text{Jacobi } G(x^*) \in \mathbb{R}^{m \times n}$  má **plnou hodnost**  $m$ . Uvažme úlohu *parametrického programování*  $f(x) \rightarrow \min, \text{qquad} G(x) = u \tag{AC.2}$ , kde  $u \in \mathbb{R}^m$ . Pak **existuje otevřená koule**  $S$  se **středem v počátku** ( $u = 0$ ) taková, že pro každé  $u \in S$  existuje **lokální řešení**  $x^*(u) \in \mathbb{R}^n$  úlohy  $\tag{AC.2}$  a odpovídající  $y^*(u) \in \mathbb{R}^m$ . Navíc  $x^*(\cdot)$  a  $y^*(\cdot)$  jsou **spojitě diferencovatelné** funkce na  $S$  a platí  $x^*(0) = x^*, y^*(0) = y^*$  a pro každé  $u \in S$  máme  $\text{grad } f^*(u) = -y^*(u)$ , kde  $f^*(u)$  značí **optimální hodnotu úlohy**  $\tag{AC.2}$  vzhledem k  $u$ , tj. klademe  $f^*(u) := f(x^*(u))$ .

Jednoduše řečeno se optimální hodnota mění **podle Lagrangeových multiplikátorů** pro danou hodnotu  $u$

## Úlohy s nerovnostmi

Uvažujme úlohu závislou na  $m$ -tici parametrů  $b = (b_1, \dots, b_m)^T \in \mathbb{R}^m$ , tj.  $f(x) \rightarrow \min, \quad x \in X(b) := \{x \in P \mid g_i(x) \leq b_i, \quad i \in \{1, \dots, m\}\}$   $\tag{T{4.4.2}}$   $A$  dále zavedme značení  $G(x) := (g_1(x), \dots, g_m(x))^T, \quad X(b) := \{x \in P \mid G(x) \leq b\}$   $B := \{b \in \mathbb{R}^m \mid X(b) \neq \emptyset\}, \quad F(b) := \inf_{x \in X(b)} f(x), \quad b \in B$  množinu **K-T vektorů** úlohy  $\tag{4.4.2}$  označme  $Y(b) := \{y \in \mathbb{R}^m \mid y \geq 0, \quad F(b) \leq f(x) + \sum_{i=1}^m y_i (G_i(x) - b_i) \quad \forall x \in P\}$  a **subdiferenciál** funkce  $F(b)$  (viz Definice  $\tag{2.5.1}$  [./subgradient-a-subdiferencial-a-fenchelova-transformace](#)) označme  $\text{subdif } F(b) := \{a \in \mathbb{R}^m \mid F(b') - F(b) \leq \sum_{i=1}^m a_i (b'_i - b_i) \quad \forall b' \in B\}$

### Věta $\tag{4.4.3}$

Nechť množina  $P \subseteq \mathbb{R}^n$  je **konvexní**, funkce  $f, g_1, \dots, g_m$  jsou **konvexní** na  $P$  a platí  $0 \in B, F(0) > -\infty$  a  $Y(0) \neq \emptyset$ . Potom

- množina  $B$  je **konvexní**
- funkce  $F(b)$  je **konečná, konvexní a nerostoucí** na  $B$
- platí  $\text{subdif } F(b) = -Y(b)$  pro **všechna**  $b \in B$

“ Z předpokladů Věty  $\tag{4.4.3}$  plyne, že

- úloha  $\tag{4.4.2}$  je **přípustná** pro  $b = 0$
- úloha  $\tag{4.4.2}$  **má řešení** pro  $b = 0$
- množina **K-T vektorů** úlohy  $\tag{4.4.2}$  je **neprázdná** (toto **není** splněno automaticky, viz Věta  $\tag{4.3.2}$  [./dualni-uloha](#))

Navíc je-li  $F$  dokonce **diferencovatelná** v  $b$ , pak  $\text{subdif } F(b)$  je **jednoprvková** množina, která obsahuje **pouze**  $-\text{grad } F(b)$  a tedy tento vektor musí být roven  $(-1) \cdot$  **jediný K-T vektor** této úlohy. (Toto je analogie Věty *O obálce*  $\tag{4.4.1}$ )

“ Podle Věty  $\tag{4.3.6}$  [./dualni-uloha](#) jsme popsali **K-T vektory** úlohy  $\text{knvxProg}$  pomocí řešení **duální úlohy**  $\tag{4.3.1}$  [./dualni-uloha](#). Část 3. této věty jim navíc dává ještě charakteristiku **subgradientu**

## hodnoty úlohy parametrického programování §4.4.2.

“ V případě **regulární** úlohy *konvexního programování* dostáváme zkombinováním těchto dvou výsledků §4.4.3  $F(b) = -\inf_{y \in Y(b)} \sum_{i=1}^m g_i(y)$ , kde  $Y(b)$  je množina řešení **duální úlohy** (viz Věta §4.3.6 §4.3.6).

Pomocí Věty §4.4.3 jsme schopni dostat zajímavé výsledky o původní úloze *matematického programování*, tj. §4.4.2 s  $b = 0$ .

## Důsledek §4.4.4

Nechť množina  $P \subseteq \mathbb{R}^n$  je **konvexní**, funkce  $f, g_1, \dots, g_m$  jsou **konvexní** na  $P$ , platí  $F(0) > -\infty$  a **existuje**  $\bar{x} \in P$  takové, že  $G(\bar{x}) < 0$  (viz **Slaterova podmínka** ve Větě §4.3.2 §4.3.2). Potom  $0 \in B$  a

1. funkce  $F(\cdot)$  je **spojitá** v bodě  $b = 0$
2. pro libovolné  $h \in \mathbb{R}^m$  **existuje jednostranná směrová** derivace  $F'_h(0) = \max_{y \in Y(0)} \sum_{i=1}^m g_i(y) h_i$
3. funkce  $F$  je **diferencovatelná** v bodě  $b = 0$  právě tehdy, když  $Y(0)$  je **jednoprvková** množina, tj.  $Y(0) = \{y\}$ . Navíc platí  $\nabla F(0) = -y$ .

“ Z části 3. okamžitě plyne, že pokud **existuje více K-T vektorů**  $\iff$  funkce  $F$  **není diferencovatelná**

# Fenchelova transformace a duální úloha

Lze ukázat, že pro  $F(b)$  **hodnotu primární úlohy** je  $F(y) = -\inf_{x \in \mathbb{R}^n} \sum_{i=1}^m g_i(x) + b^T x$  a tedy duální úlohu §4.3.1 §4.3.1 je možné psát jako  $\max_{y \geq 0} -F(y)$

# M5120 Lineární statistické modely

## 2. cvičení

$\backslash\mathrm{cal}\{#1\}$   $\backslash\mathrm{scal}\{#1\}$   $\backslash\mathrm{angle}\{#1, #2\}$   $\backslash\mathrm{N}\{\}$   $\backslash\mathrm{R}\{\}$   $\backslash\mathrm{Q}\{\}$   $\backslash\mathrm{Z}\{\}$   $\backslash\mathrm{D}\{\}$   
 $\backslash\mathrm{bm}\{#1\}$   $\backslash\mathrm{vv}\{#1\}$   $\backslash\mathrm{vvp}\{#1\}$   
 $\backslash\mathrm{floor}\{#1\}$   $\backslash\mathrm{ceil}\{#1\}$   $\backslash\mathrm{grad}\{#1\}$  ,  $\backslash\mathrm{ve}\{\}$

## Lineární model

Obecně má tvar  $Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i,1} + \dots + \beta_k x_{i,k} + \varepsilon_i$ , kde  $i = 1, \dots, n$ .  $Y_i$  je naše "cílová proměnná" (regresand). Proměnné  $x_{i,1}, \dots, x_{i,k}$  jsou kovariáty (regresor, prediktor) a jsou pevně dané. Dále máme regresní koeficienty  $\beta_0, \dots, \beta_k$  a  $\varepsilon_i$  je náhodná proměnná chyby.

Také platí  $\varepsilon_i \sim^{iid} (0, \sigma^2)$   $E(\varepsilon_i) = 0$   $\mathrm{var}(\varepsilon_i) = \sigma^2$   $\mathrm{cov}(\varepsilon_i) = 0$

Celkem máme 
$$\begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_{1,1} & \dots & x_{1,k} \\ 1 & x_{2,1} & \dots & x_{2,k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n,1} & \dots & x_{n,k} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_k \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}$$

$$\text{\tag{LSM}} \quad A \text{ vektorově } \mathbf{Y} = \underbrace{\mathbf{X}}_{\text{matice plánu}} \cdot \mathbf{\beta} + \mathbf{\varepsilon}$$

Tedy pro 2. cvičení

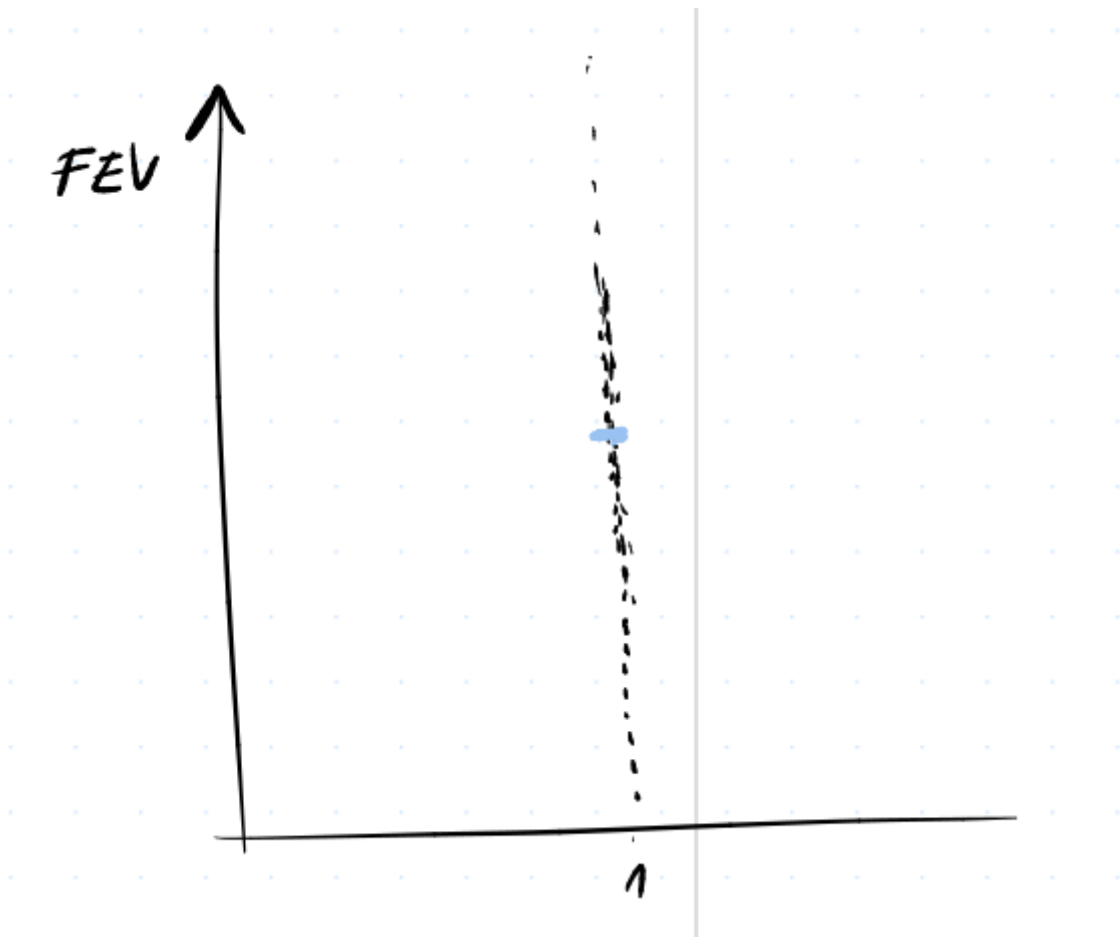
## 02 / a)

$$FEV_i = \beta_0 + \varepsilon_i$$

Můžeme si představit jako funkci  $y = \beta_0$

A matice plánu bude  $\begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \end{pmatrix}$  Tedy kapacita plic je podle tohoto modelu konstantní a vizuálně znázorněné jako



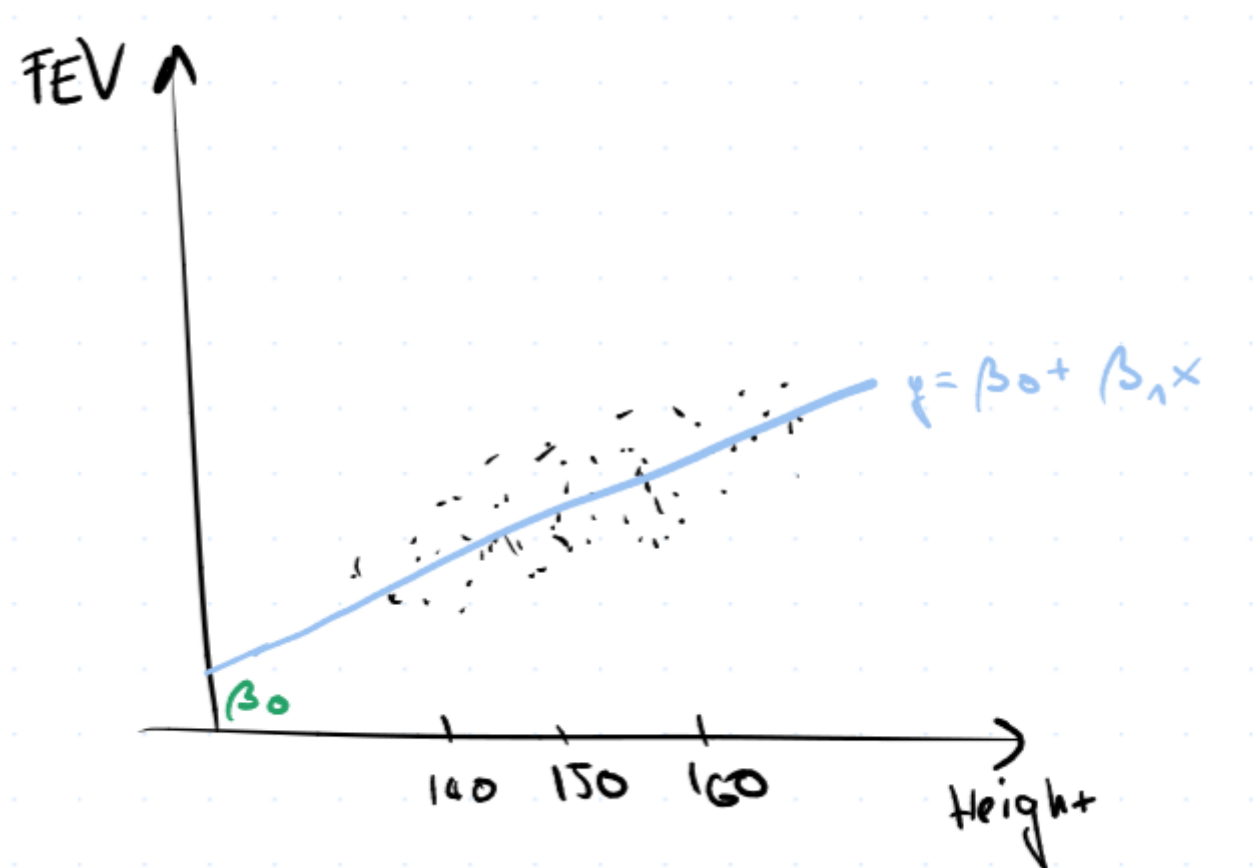


02 / c)

$$FEV_i = \beta_0 + \beta_1 \cdot \text{Height}_i + \epsilon_i$$

Kapacitu plic modelujeme pomocí výšky. Tedy v tomto případě chceme funkci  $y = \beta_0 + \beta_1 x$ .

A graficky



A matice plánu tentokrát bude  $\begin{pmatrix} 1 & \text{Height}_1 & 1 & \text{Height}_2 & \vdots & 1 & \text{Height}_n \end{pmatrix}$ , což dosazujeme do (LSM).

Tedy máme model hledáme  $y = \beta_0 + \beta_1 x$  a zde

- $\beta_0$  ... střední hodnota predikce při nulových hodnotách ostatních prediktorů
- $\beta_1$  ... nárůst střední hodnoty predikce při nárůstu výšky (prediktor  $\text{Height}$ ) o 1 cm

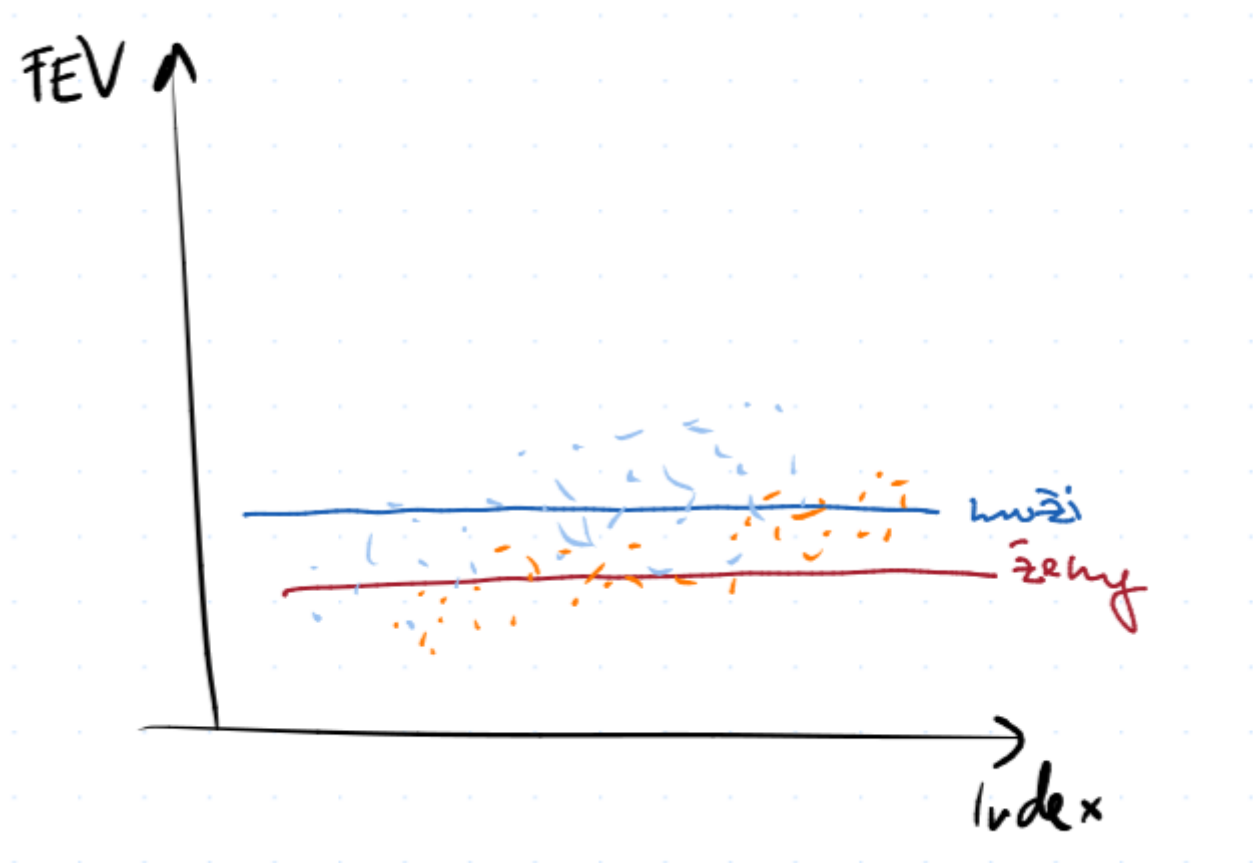
## 02 / b)

$$FEV_i = \beta_0 + \beta_1 \cdot \text{Sex}_i + \epsilon_i$$

a  $\beta_1$  zde reprezentuje rozdíl predikce mezi muži a ženami s maticí plánu  $\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & \vdots & 1 & 1 \end{pmatrix}$ ,

kde 1 reprezentuje muže.

A graficky



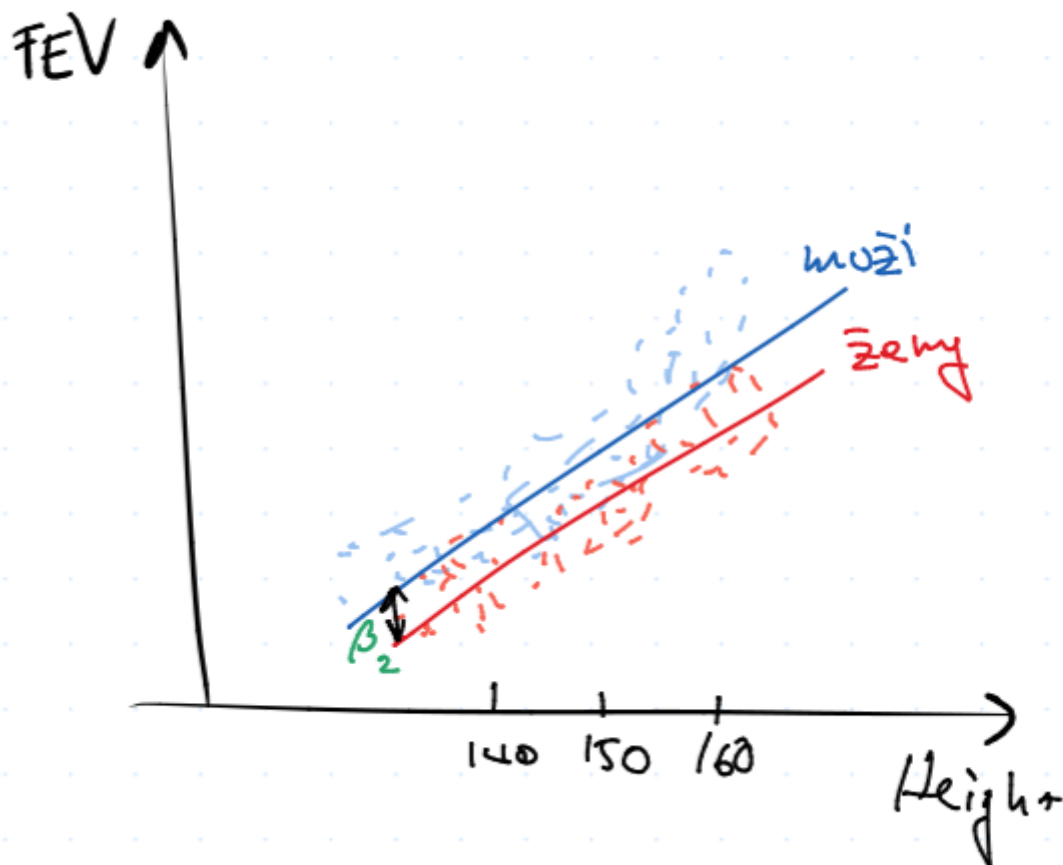
02/ d)

$FEV_i = \beta_0 + \beta_1 \cdot \text{Height}_i + \beta_2 \cdot \text{Height}_i^2 + \epsilon_i$  V tomto případě je  $\beta_1, \beta_2$  jsou složité na interpretaci

A matice plánu by v tomto případě byla 
$$\begin{pmatrix} 1 & \text{Height}_1 & \text{Height}_1^2 \\ 1 & \text{Height}_2 & \text{Height}_2^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & \text{Height}_n & \text{Height}_n^2 \end{pmatrix},$$

02 / e)

$FEV_i = \beta_0 + \beta_1 \cdot \text{Height}_i + \beta_2 \cdot \text{Sex}_i + \epsilon_i$  s maticí plánu 
$$\begin{pmatrix} 1 & \text{Height}_1 & 0 \\ 1 & \text{Height}_2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & \text{Height}_n & 1 \end{pmatrix},$$
 přičemž ve 3. sloupci jsou 1 značí muže.



A hledáme přímku  $y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 \text{ I } \set{\text{Sex} = \text{"male"}}$

s významem koeficientů

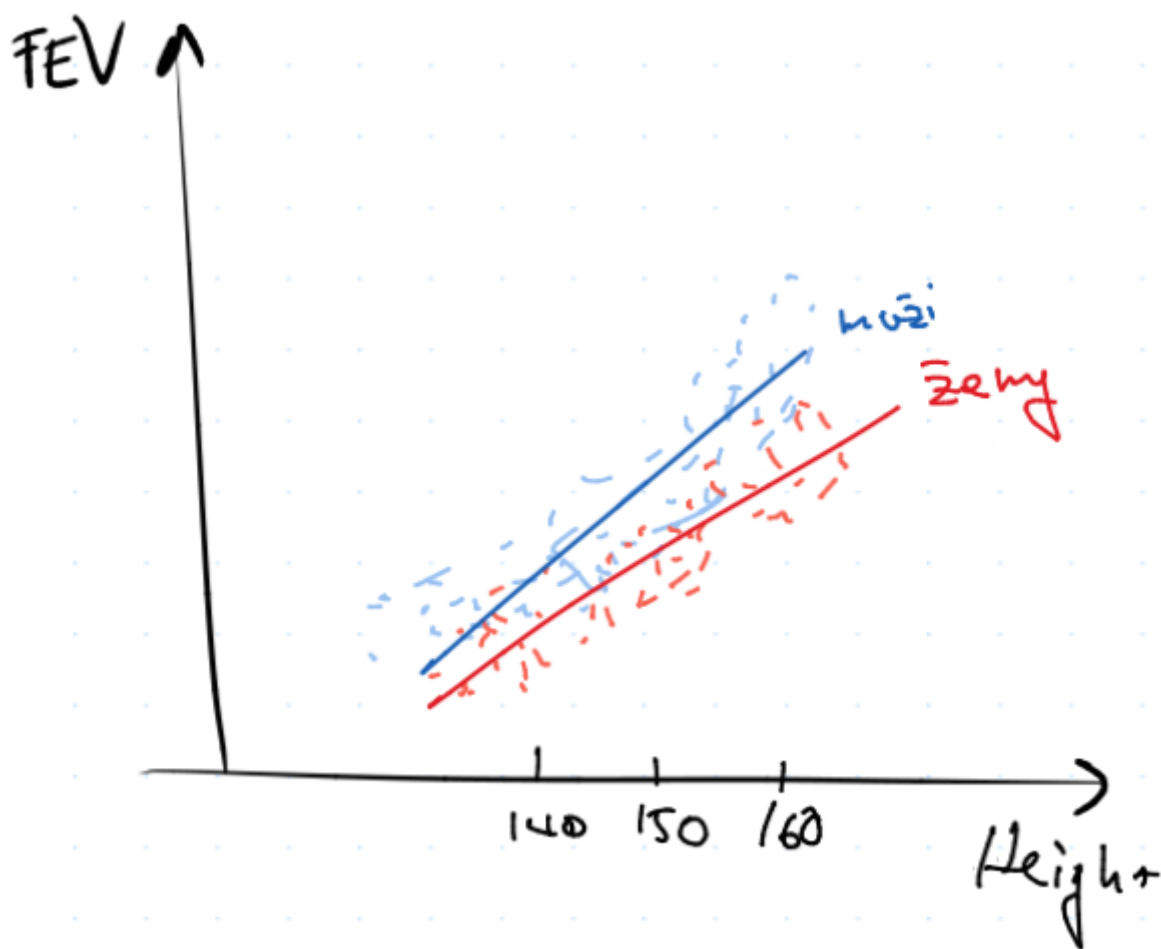
- $\beta_0$  ... střední hodnota predikce při nulových hodnotách ostatních prediktorů (nulová výška a ženské pohlaví)
- $\beta_1$  ... změna střední hodnoty predikce při nárůstu výšky (prediktor  $\text{Height}$ ) o 1 cm pro ženy
- $\beta_2$  ... rozdíl střední hodnoty predikce mezi muži a ženami

## 02 / g)

$FEV_i = \beta_0 + \beta_1 \cdot \text{Height}_i + \beta_2 \text{Sex}_i + \beta_3 (\text{Sex}_i \times \text{Height}_i) + \epsilon_i$ , kde členu  $\text{Sex}_i \times \text{Height}_i$  **interakce** a matice plánu bude  $\begin{pmatrix} 1 & \text{Height}_1 & 0 & 0 \\ 1 & \text{Height}_2 & 1 & \text{Height}_2 \\ 1 & \text{Height}_3 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & \text{Height}_n & 1 & \text{Height}_n \end{pmatrix}$ , přičemž ve 3. sloupci jsou 1 značí muže.

A hledáme přímku  $y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 \text{ I } \set{\text{Sex} = \text{"male"}} + \beta_3 x \text{ I } \set{\text{Sex} = \text{"male"}}$ , tj.

- žena ...  $y = \beta_0 + \beta_1 x$
- muž ...  $y = (\beta_0 + \beta_2) + (\beta_1 + \beta_3)x$



Zde  $\beta_3$  značí rozdíl střední hodnoty predikce mezi muži a ženami při nárůstu výšky o 1 cm

“ rozdíl rychlosti růstu  $\text{FEV}$  mezi muži a ženami

## Interpretation

- “keeping the values of all the other covariates fixed, a unit increase in  $x_i$  is associated with a  $\hat{\beta}_i$  increase in  $E Y$ ”
  - ▶ suitably adapted for categorical predictors and potentially interactions, and depends on the choice of the identifiability conditions
  - ▶ polynomials need a more complex interpretation
- is it meaningful to imagine that a covariate changes while all the other remain fixed?

## 3. cvičení

$\$ \xdef\mcal{\mathcal} \xdef\scal{\langle \rangle} \xdef\N{\mathbb N}$   
 $\xdef\R{\mathbb R} \xdef\Q{\mathbb Q} \xdef\Z{\mathbb Z} \xdef\D{\mathbb D}$   
 $\xdef\bm{\boldsymbol} \xdef\vv{\mathbf} \xdef\vp{\pmb}$   
 $\xdef\floor{\lfloor \rfloor} \xdef\ceil{\lceil \rceil} \xdef\grad{\mathrm{grad}}$   
 $\xdef\ve{\varepsilon}$

### Příklad 1

Máme symetrickou, pozitivně definitní matici  $m \times m$  značenou  $\Sigma$ .

a)

Poz. def  $\iff$  všechna vlastní čísla jsou kladná  $\implies \det(\lambda_1 \dots \lambda_m) > 0$   
 $\implies$  inverze bude existovat  $\implies h(\Sigma) = m$

b)

Matice  $\Sigma$  je *samoadjungovaný operátor* Inverzi sestrojíme pomocí spektrálního rozkladu.  $\Sigma = U \Lambda U^T$ , kde  $U$  je tvořená vlastními vektory a je ortogonální ( $U \cdot U^T = I$ ) a  $\Lambda$  je diagonální matice vlastních čísel.

Pak inverze je  $\Sigma^{-1} = U \Lambda^{-1} U^T$

A jako ověření  $\Sigma \Sigma^{-1} = U \Lambda U^T U \Lambda^{-1} U^T = I$

c)

Ze spektrálního rozkladu je jisté matice  $\Sigma^{-1}$  pozitivně definitní. Nechť  $\forall x \neq 0$  libovolné, pak  $\forall x^T \Sigma^{-1} x = \forall x^T U \Lambda^{-1} U^T x = \forall x^T U$

$\Lambda^{-\frac{1}{2}} \Lambda^{-\frac{1}{2}} U^T \mathbf{x}$ , kde  $\Lambda^{-\frac{1}{2}}$  je matice s převrácenými hodnotami odmocnin vlastních čísel matice  $\Sigma$  na diagonále a tedy  $\underbrace{\mathbf{x}^T U \Lambda^{-\frac{1}{2}}}_{\mathbf{y}} \underbrace{\Lambda^{-\frac{1}{2}} U^T \mathbf{x}}_{\mathbf{y}^T} = \|\mathbf{y}\|^2 > 0$

d)

Mějme množinu  $S_c$  takovou, že  $S_c = \{\mathbf{x}; (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \Sigma^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) = c\}$ , kde  $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^m$  a  $c \in \mathbb{R}$ .

Pro  $c < 0$  je  $S_c \equiv \emptyset$ .

Dále pro  $c = 0$  je řešením pouze  $S_c = \{\boldsymbol{\mu}\}$ .

Nakonec pro  $c > 0$  je  $\underbrace{(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T U}_{\mathbf{y}} \Lambda^{-1} U^T (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) = \mathbf{y}^T \Lambda^{-1} \mathbf{y}$ . A pro  $m = 2$  tedy  $\begin{pmatrix} y_1 & y_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\lambda_1} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\lambda_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = c$ , což je **rovnice elipsy** se středem  $(\mu_1, \mu_2)$  a směry os jsou právě vlastní vektory  $\Sigma$ . Nakonec délky poloos budou  $\sqrt{c \lambda_i}$



Analogicky pro  $m > 2$  dostaneme **elipsoid**.

## Příklad 4

Matice  $\Sigma$  je poz. **semidef** matice symetrická matice  $m \times m$ .

a)

$h(\Sigma) = r$ , kde  $0 < r \leq m$ .

Nahradíme  $U$  za matici  $U_1 = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 & \mathbf{u}_2 & \dots & \mathbf{u}_r \end{pmatrix}$  a také  $\Lambda_1 = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_r)$

b)



Sestrojíme matici  $\tilde{\Sigma}$  takovou, že  $\tilde{\Sigma} \tilde{\Sigma}^T = \Sigma$  jako  $\tilde{\Sigma} = U_1 \Lambda_1^{-\frac{1}{2}}$ , když je  $h(\Sigma) = r$  a pro  $h(\Sigma) = m$  jako  $\tilde{\Sigma} = U \Lambda^{-\frac{1}{2}}$ .

d)

“ Zde značím pseudoinverzi matice  $A$  jako  $A^\dagger$

$\tilde{\Sigma}^\dagger = \Lambda_1^{-\frac{1}{2}} U_1^T$  a pro tuto matici bychom ukázali všechny 4 vlastnosti pseudoinverze, tj.

- $A A^\dagger A = A$
- $A^\dagger A A^\dagger = A^\dagger$
- $(A^\dagger A)^T = A^\dagger A$
- $(A A^\dagger)^T = A A^\dagger$

# 4. cvičení

$\$ \backslash \mathrm{mcal} \# 1 \{ \backslash \mathrm{mathcal} \{ \# 1 \} \}$   $\backslash \mathrm{def} \backslash \mathrm{scal} \# 1 \# 2 \{ \backslash \mathrm{angle} \# 1, \# 2 \}$   $\backslash \mathrm{def} \backslash \mathrm{N} \{ \backslash \mathrm{mathbb} \mathrm{N} \}$   
 $\backslash \mathrm{def} \backslash \mathrm{R} \{ \backslash \mathrm{mathbb} \mathrm{R} \}$   $\backslash \mathrm{def} \backslash \mathrm{Q} \{ \backslash \mathrm{mathbb} \{ \mathrm{Q} \} \}$   $\backslash \mathrm{def} \backslash \mathrm{Z} \{ \backslash \mathrm{mathbb} \{ \mathrm{Z} \} \}$   $\backslash \mathrm{def} \backslash \mathrm{D} \{ \backslash \mathrm{mathbb} \{ \mathrm{D} \} \}$   
 $\backslash \mathrm{def} \backslash \mathrm{bm} \# 1 \{ \backslash \mathrm{boldsymbol} \{ \# 1 \} \}$   $\backslash \mathrm{def} \backslash \mathrm{vv} \# 1 \{ \backslash \mathrm{mathbf} \{ \# 1 \} \}$   $\backslash \mathrm{def} \backslash \mathrm{vvp} \# 1 \{ \backslash \mathrm{pmb} \{ \# 1 \} \}$   
 $\backslash \mathrm{def} \backslash \mathrm{floor} \# 1 \{ \backslash \mathrm{floor} \# 1 \}$   $\backslash \mathrm{def} \backslash \mathrm{ceil} \# 1 \{ \backslash \mathrm{ceil} \# 1 \}$   $\backslash \mathrm{def} \backslash \mathrm{grad} \# 1 \{ \mathrm{grad} \}$   $\backslash \mathrm{def} \backslash \mathrm{ve} \{ \backslash \mathrm{varepsilon} \}$   $\backslash \mathrm{def} \backslash \mathrm{im} \# 1 \{ \mathrm{im} \}$   $\backslash \mathrm{def} \backslash \mathrm{tr} \# 1 \{ \mathrm{tr} \}$   
 $\backslash \mathrm{def} \backslash \mathrm{norm} \# 1 \{ \left| \right| \# 1 \}$   $\backslash \mathrm{def} \backslash \mathrm{scal} \# 1 \# 2 \{ \backslash \mathrm{angle} \# 1, \# 2 \}$

## 1. příklad

Máme symetrickou idempotentní matice  $P$  velikosti  $n \times n$ , což je matice **ortogonální projekce**.

a)

Jelikož je  $P$  symetrická, tak existuje spektrální rozklad tvaru  $P = U \Lambda U^T$

“ matice  $U$  je ortogonální a plné hodnosti

a jelikož je idempotentní  $P = PP$  Potom  $U \Lambda U^T = P = PP = U \Lambda \underbrace{U^T U}_I \Lambda U^T = U \Lambda^2 U^T$  A celkem dostáváme  $\Lambda^2 = \Lambda$ . Navíc jelikož je  $\Lambda$  diagonální, tak pro všechna vlastní čísla  $\lambda$  matice  $\Lambda$  platí  $\lambda^2 = \lambda \implies \lambda = 0 \vee \lambda = 1$

“ Idempotentní matice  $P$  je invertibilní právě tehdy, když  $P = I$

b)

Jelikož  $P = U\Lambda U^T$ , pak  $U$  je plně hodnostní (je ortogonální), pak  $\text{h}(P) = \text{h}(U\Lambda U^T) = \text{h}(\Lambda) = |\{\lambda_i, \lambda_i = 1\}|$

c)

Z části **b)** máme  $\text{h}(P) = \sum \lambda_i = \text{tr } \Lambda = \text{tr } \{\Lambda U U^T\}$   
A jelikož pro stopu součinu matic platí  $\text{tr } \{ABC\} = \text{tr } \{CAB\}$  (invariantnost vůči cyklickým operacím), pak  $\text{h}(P) = \text{tr } \{U\Lambda U^T\} = \text{tr } P$

d)

Je-li vektor  $y \in \text{im } P$ , pak  $Py = y$ . Pokud  $y \in \text{im } P$ , pak  $\exists z$ , že  $y = Pz$

Definice obrazu  $\text{im } P$ :  $\text{im } P = \{y \in \mathbb{R}^n \mid \exists z \in \mathbb{R}^n : y = Pz\}$

Pak  $Py = P(Pz) = (P^2)z = Pz = y$

e)

Chceme ukázat, že projekce do menšího podprostoru je zároveň projekce do onoho většího prostoru

Nechť  $z \in \mathbb{R}^n$  je libovolné, projekce  $z$  do menšího prostoru je prvek většího prostoru.  $\tilde{P}z \in \text{im } \tilde{P} \leq \text{im } P$ . Pak podle **d)** platí  $P(\tilde{P}z) = \tilde{P}z$ .  
 $P(\tilde{P}z) - \tilde{P}z = 0 \in (\tilde{P} - P)z = 0$ , nicméně vektor  $z$  byl libovolný. To tedy znamená, že zobrazení  $\tilde{P} - P$  pošle všechny  $z \in \mathbb{R}^n$  na nulový vektor, tj.  $\ker(\tilde{P} - P) = \mathbb{R}^n$ . Z lineární algebry víme, že  $\dim \ker(A) + \dim \text{im } A = n$  pro  $A$  tvaru  $n \times n$ . A tedy  $\dim \{\tilde{P} - P\} = 0 \implies \tilde{P} - P = 0$ .  
Neboť  $P, \tilde{P}$  jsou ortogonální projekce, tak jsou symetrické.

Celkem  $\|P\tilde{P} = \tilde{P}^T P^T = (\tilde{P} P)^T = \tilde{P}^T = \tilde{P} = P\tilde{P}$

f)

Nechť  $x \in \mathbb{R}^n$  pevné. Mějme  $Pz \in \text{im } P$ . Vezměme libovolné  $y \in \text{im } P$  a spočítáme  $\|y - x\|^2$ . Pak  $\|y - x\|^2 = \|Pz - x + y - Pz\|^2 = \|(Pz - x) + (y - Pz)\|^2 = \langle (Pz - x) + (y - Pz), (Pz - x) + (y - Pz) \rangle$

Pro skalární součin platí  $\langle u, v \rangle = \langle v, u \rangle$ ,  $\langle u + v, w \rangle = \langle u, w \rangle + \langle v, w \rangle$ ,  $\langle au, v \rangle = a \langle u, v \rangle$ , ;  $a \in \mathbb{R}$

Pak dostáváme  $\|Pz - x\|^2 + 2 \langle Pz - x, y - Pz \rangle + \|y - Pz\|^2$

A zajímá nás hlavně  $\langle Pz - x, y - Pz \rangle$ , tedy

$$\langle Pz - x, y - Pz \rangle = (y - Pz)^T (Pz - x) = y^T (Pz - x) - (Pz)^T (Pz - x) = y^T Pz - y^T x - (Pz)^T Pz + (Pz)^T x = y^T Pz - y^T x - \underbrace{(Pz)^T Pz}_{\langle Pz, Pz \rangle} + \underbrace{(Pz)^T x}_{\langle Pz, x \rangle} = y^T Pz - y^T x - \|Pz\|^2 + \langle Pz, x \rangle$$

Jelikož  $y \in \text{im } P$ , tak jistě  $\exists z \in \mathbb{R}^n$  takové, že  $y = Pz$ . Z toho plyne

$$y^T Pz - y^T x - \|Pz\|^2 + \langle Pz, x \rangle = (Pz)^T Pz - (Pz)^T x - \|Pz\|^2 + \langle Pz, x \rangle = \underbrace{(Pz)^T Pz}_{\langle Pz, Pz \rangle} - \underbrace{(Pz)^T x}_{\langle Pz, x \rangle} - \|Pz\|^2 + \langle Pz, x \rangle = 0$$

Celkem  $\|y - x\|^2$  závisí pouze na  $\|y - Pz\|^2$  a  $\|Pz - x\|^2 + \underbrace{2 \langle Pz - x, y - Pz \rangle}_{=0} + \|y - Pz\|^2 \geq \|Pz - x\|^2$  a rovnost nastane pouze v případě  $Pz = y$ .

## Zadání v R

Vykreslit si grafy hustot a distribučních funkcí pro

- $N(0,1)$  a spočítat  $P(X \leq 2)$
- Studentovo  $t(df = 5)$  a spočítat  $P(X \leq 2)$
- $\chi^2(df = 10)$  a spočítat  $P(X \leq 20)$
- Fisherovo  $F(5, 10)$  a spočítat  $P(X \leq 2)$

a vypočtete 95% kvantil a zaznačte do grafu



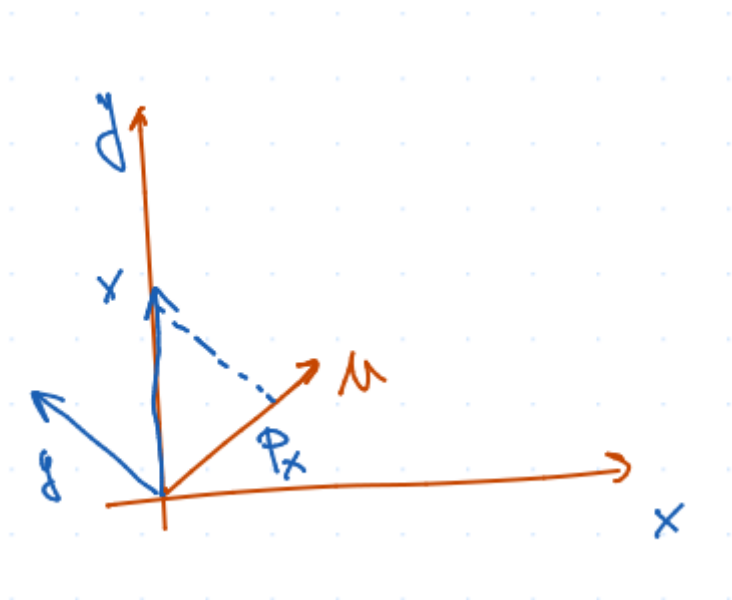
# 5. cvičení

$\backslash\mathrm{mcal}\{#1\}\backslash\mathrm{scal}\{#1\}\backslash\mathrm{angle}\{#1, #2\}\backslash\mathrm{N}\{\mathbb{N}\}$   
 $\backslash\mathrm{R}\{\mathbb{R}\}\backslash\mathrm{Q}\{\mathbb{Q}\}\backslash\mathrm{Z}\{\mathbb{Z}\}\backslash\mathrm{D}\{\mathbb{D}\}$   
 $\backslash\mathrm{bm}\{#1\}\backslash\mathrm{v}\{#1\}\backslash\mathrm{vp}\{#1\}$   
 $\backslash\mathrm{floor}\{#1\}\backslash\mathrm{ceil}\{#1\}\backslash\mathrm{grad}\{#1\}\backslash\mathrm{grad}\{#1\}$   
 $\backslash\mathrm{ve}\{\mathrm{varepsilon}\}\backslash\mathrm{im}\{#1\}\backslash\mathrm{tr}\{#1\}$   
 $\backslash\mathrm{norm}\{#1\}\backslash\mathrm{scal}\{#1\}\backslash\mathrm{angle}\{#1, #2\}$   
 $\backslash\mathrm{ex}\{#1\}\backslash\mathrm{ex}\{#1\}, \left( #1\right)\backslash\mathrm{ex}\{#1\}, \mathrm{v}\{#1\}$

## 4. cvičení / 2. příklad

### a) i b)

Mějme vektor  $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n$  (takový, že  $\|\mathbf{u}\| = 1$ ), pak matice  $P = \frac{\mathbf{u} \mathbf{u}^T}{\|\mathbf{u}\|^2}$  je ortogonální projekce na  $\mathrm{im}\{\mathbf{u}\}$ .



Pro ortogonální projekci platí

1.  $P^2 = P$  - idempotence projekce
2.  $P$  je symetrická (z ortogonality)

Pak  $P = \frac{\langle \mathbf{v}, \mathbf{u} \rangle}{\|\mathbf{u}\|^2}$  a tedy  $PP = \frac{\langle \mathbf{v}, \mathbf{u} \rangle}{\|\mathbf{u}\|^2} \frac{\langle \mathbf{v}, \mathbf{u} \rangle}{\|\mathbf{u}\|^2}$

Z definice skalárního součinu  $\langle \mathbf{v}, \mathbf{u} \rangle = \|\mathbf{u}\|^2$  a proto  $PP = \frac{\langle \mathbf{v}, \mathbf{u} \rangle}{\|\mathbf{u}\|^2} = P$ , což zvláště platí pro  $\|\mathbf{u}\| = 1$ . Pro nějaké  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$  máme  $P \mathbf{x} = \frac{\langle \mathbf{v}, \mathbf{u} \rangle \langle \mathbf{v}, \mathbf{x} \rangle}{\|\mathbf{u}\|^2} = \frac{\langle \mathbf{v}, \mathbf{u} \rangle \langle \mathbf{v}, \mathbf{x} \rangle}{\|\mathbf{u}\|^2} = \underbrace{\frac{\langle \mathbf{v}, \mathbf{u} \rangle \langle \mathbf{v}, \mathbf{x} \rangle}{\|\mathbf{u}\|^2}}_{\in \mathbb{R}} \mathbf{u} \in \text{im } U$

c)

Mějme  $\{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_p\}$  ortonormální vektory, pak matice  $P = U U^T$ , kde  $U = (\mathbf{u}_1 \mid \mathbf{u}_2 \mid \dots \mid \mathbf{u}_p)$ , je ortogonální projekce na  $\text{im } U$ .

Ukažme  $P \cdot P = U \underbrace{U^T U}_I U^T = U U^T$  a  $P \mathbf{x} = U U^T \mathbf{x} = U \begin{pmatrix} \langle \mathbf{u}_1, \mathbf{x} \rangle \\ \langle \mathbf{u}_2, \mathbf{x} \rangle \\ \vdots \\ \langle \mathbf{u}_p, \mathbf{x} \rangle \end{pmatrix} = \underbrace{\mathbf{u}_1 \langle \mathbf{u}_1, \mathbf{x} \rangle}_{\in \mathbb{R}} + \dots + \underbrace{\mathbf{u}_p \langle \mathbf{u}_p, \mathbf{x} \rangle}_{\in \mathbb{R}} \in \text{im } U$ , což je lineární kombinace vektorů  $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_p$  a jistě tedy  $P \mathbf{x} \in \text{im } U$ .

d) i e)

Máme lineárně nezávislé vektory  $\{\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n\}$ , pak  $P = A(A^T A)^{-1} A^T$  je ortogonální projekce.

Jednou možností by bylo použít spektrální rozklad  $A = U \Sigma V$ , čehož bychom dostali  $P = U U^T$ , což jsme ukázali v bodě c).

Druhá možnost je  $PP = A(A^T A)^{-1} \underbrace{A^T A(A^T A)^{-1}}_I A^T = P$ , což stejně fungovalo i pro pseudoinverzi. Dále  $A \mathbf{x} = \mathbf{y} \in \text{im } A$ , pak  $P \mathbf{y} = (A(A^T A)^{-1} A^T) \mathbf{y} = A \underbrace{(A^T A)^{-1} A^T A}_I \mathbf{x} = A \mathbf{x} = \mathbf{y}$

„Zde jsme jen ukázali něco o  $\mathbf{y} \in \text{im } A$ , nikoliv o obecném  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p$ “

## 5. cvičení / 1. příklad

Nechť  $\mathbf{X} = \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_n \end{pmatrix}$  a  $DX = \text{Var } \mathbf{X} = \text{Cov}(\mathbf{X}, \mathbf{X})$  platí  $\text{Cov}(\mathbf{X}, \mathbf{X}) = \begin{pmatrix} \text{Cov}(X_1, X_1) & \text{Cov}(X_1, X_2) & \dots & \text{Cov}(X_1, X_n) \\ \text{Cov}(X_2, X_1) & \text{Cov}(X_2, X_2) & \dots & \text{Cov}(X_2, X_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \text{Cov}(X_n, X_1) & \text{Cov}(X_n, X_2) & \dots & \text{Cov}(X_n, X_n) \end{pmatrix}$

a)

Ukažme  $\mathbf{A} \mathbf{X} + \mathbf{b} = \mathbf{A} \mathbf{X} + \mathbf{b}$ , což je analogické k jednorozměrnému případu.

Pro  $i$ -tý prvek platí  $\sum_{k=1}^n a_{i,k} X_k + b_i = \sum_{k=1}^n X_k + b_i$ , což je, co jsme potřebovali.

b)

Ukažme  $\text{Var}(\mathbf{A} \mathbf{X} + \mathbf{b}) = \mathbf{A} \text{Var } \mathbf{X} \mathbf{A}^T$  což je opět analogie k  $D(aX + b) = a^2 D X$ .

Využijeme vlastnost kovariance. Tedy pro  $(i,j)$ -tý prvek matice  $\mathbf{A} \mathbf{X} + \mathbf{b}$  platí  $\text{Cov} \left( \sum_{k=1}^n a_{i,k} X_k + b_i, \sum_{l=1}^n a_{j,l} X_l + b_j \right) = \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n a_{i,k} a_{j,l} \text{Cov}(X_k, X_l) = \sum_{l=1}^n \left( \sum_{k=1}^n a_{i,k} \text{Cov}(X_k, X_l) \right) a_{j,l}$

c)

Máme ukázat  $\mathbf{X}^T \mathbf{X} = \mathbf{X}^T \mathbf{X} + \text{tr}(\text{Var}(\mathbf{X}))$ , což je ekvivalentní s  $X_1^2 + X_2^2 + \dots + X_n^2 = X_1^2 + \dots + X_n^2 + DX_1 + \dots + DX_n$

Obecně platí  $\text{Var}(\mathbf{X}) = \mathbf{X} \mathbf{X}^T - \mathbf{X} \mathbf{X}^T$  a tedy  $\mathbf{X}^T \mathbf{X} = \mathbf{X}^T \mathbf{X} + \text{tr}(\mathbf{X} \mathbf{X}^T) = \text{tr}(\mathbf{X} \mathbf{X}^T) = \text{tr}(\text{Var}(\mathbf{X}) + \mathbf{X} \mathbf{X}^T) = \text{tr}(\text{Var}(\mathbf{X})) + \text{tr}(\mathbf{X} \mathbf{X}^T) = \mathbf{X}^T \mathbf{X} + \text{tr}(\text{Var}(\mathbf{X}))$



# 7. cvičení

$\backslash\mathrm{cal}\{#1\}$   $\backslash\mathrm{scal}\{#1\}$   $\backslash\mathrm{angle}\{#1, #2\}$   $\backslash\mathrm{N}\{\}$   $\backslash\mathrm{R}\{\}$   $\backslash\mathrm{Q}\{\}$   $\backslash\mathrm{Z}\{\}$   $\backslash\mathrm{D}\{\}$   
 $\backslash\mathrm{bm}\{#1\}$   $\backslash\mathrm{vv}\{#1\}$   $\backslash\mathrm{vvp}\{#1\}$   
 $\backslash\mathrm{floor}\{#1\}$   $\backslash\mathrm{ceil}\{#1\}$   $\backslash\mathrm{grad}\{#1\}$   $\backslash\mathrm{ve}\{\}$   $\backslash\mathrm{im}\{#1\}$   $\backslash\mathrm{tr}\{#1\}$   
 $\backslash\mathrm{norm}\{#1\}$   $\backslash\mathrm{scal}\{#1\}$   $\backslash\mathrm{ex}\{#1\}$   $\backslash\mathrm{exv}\{#1\}$

Nechť  $\mathbf{Y}$  jsou data,  $\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{X} \hat{\boldsymbol{\beta}}$ ,  $\mathbf{E} \hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{E} \mathbf{Y}$  je odhad  $\mathbf{Y}$  a  $\mathbf{e}$  je odhad  $\mathbf{ve}$ .

A máme **celkovou sumu čtverců**  $TSS = \sum_{i=1}^n (Y_i - \overline{Y})^2$  také **vysvětlovanou sumu čtverců**  $ESS = \sum_{i=1}^n (\hat{Y}_i - \overline{Y})^2$  a neposlední řadě **reziduální sumu čtverců**  $RSS = \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2$

A platí  $TSS = RSS + ESS$

a necht'  $R^2$  je **koeficient determinace**  $R^2 = \frac{ESS}{TSS} \in (0, 1]$  a **adjustovaný koeficient determinace**  $R^2_{adj} = 1 - \frac{\frac{RSS}{n-p}}{\frac{TSS}{n-1}}$

Dále  $\hat{\sigma}^2 = \frac{RSS}{n-p}$  a  $\mathrm{var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \hat{\sigma}^2 (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$  Přičemž  $\mathrm{var}(\hat{\boldsymbol{\beta}})$  dostaneme pomocí `vcov(<model>)`

# 9. cvičení

**a)** IS pro  $\beta_i$ :  $T_i = \frac{\hat{\beta}_i}{\sqrt{\hat{\sigma}^2 (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}_{i,i}}} \sim t(n-p)$

Pak  $P\left(T_i \in \left[t_{\frac{\alpha}{2}(n-p)}, t_{1-\frac{\alpha}{2}(n-p)}\right]\right) = 1 - \alpha$   
 $t_{\frac{\alpha}{2}(n-p)} \leq T_i \leq t_{1-\frac{\alpha}{2}(n-p)}$   
 $\frac{\hat{\beta}_i - \hat{\beta}_i}{\sqrt{\hat{\sigma}^2 (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}_{i,i}}} \leq t_{1-\frac{\alpha}{2}(n-p)}$   
 Z čehož dostaneme  $\hat{\beta}_i \in \left(\hat{\beta}_i \pm t_{1-\frac{\alpha}{2}(n-p)} \sqrt{\hat{\sigma}^2 (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}_{i,i}}\right)$

**b)**  $T = \frac{\mathbf{a}^T \hat{\beta}}{\sqrt{\hat{\sigma}^2 \mathbf{a}^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{a}}} \sim t(n-p)$

$\left(\mathbf{a}^T \hat{\beta} \pm t_{1-\frac{\alpha}{2}(n-p)} \sqrt{\hat{\sigma}^2 \mathbf{a}^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{a}}\right)$

A regresní přímka pro dívky bude mít tvar  $y = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x$  Pro chlapce:  $y = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_2 + (\hat{\beta}_1 + \hat{\beta}_3) x$  IS pro  $\hat{\beta}_1 + \hat{\beta}_3$ , tedy  $\mathbf{a} = (0, 1, 0, 1)$

**d)** Při počítání predikčního intervalu zohledňujeme chybu u "nového pozorování". Tedy odhad rozptylu je  $\hat{\sigma}^2 \mathbf{x}^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x} + \hat{\sigma}^2$   
 $\implies T = \frac{\mathbf{x}^T \hat{\beta}}{\sqrt{\hat{\sigma}^2 (1 + \mathbf{x}^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x})}} \sim t(n-p)$

```
# Confidence interval
predict(..., interval = "confidence")

# Or
predict(..., interval = "prediction")
```

# 10. cvičení

$\backslash\mathrm{cal}\{#1\}$   $\backslash\mathrm{scal}\{#1\}$   $\backslash\mathrm{angle}\{#1, #2\}$   $\backslash\mathrm{N}\{\mathbb{N}\}$   
 $\backslash\mathrm{R}\{\mathbb{R}\}$   $\backslash\mathrm{Q}\{\mathbb{Q}\}$   $\backslash\mathrm{Z}\{\mathbb{Z}\}$   $\backslash\mathrm{D}\{\mathbb{D}\}$   
 $\backslash\mathrm{bm}\{#1\}$   $\backslash\mathrm{vv}\{#1\}$   $\backslash\mathrm{vvp}\{#1\}$   
 $\backslash\mathrm{floor}\{#1\}$   $\backslash\mathrm{ceil}\{#1\}$   $\backslash\mathrm{grad}\{#1\}$   $\backslash\mathrm{ve}\{\mathrm{varepsilon}\}$   $\backslash\mathrm{im}\{#1\}$   $\backslash\mathrm{tr}\{#1\}$   
 $\backslash\mathrm{norm}\{#1\}$   $\backslash\mathrm{scal}\{#1\}$   $\backslash\mathrm{ex}\{#1\}$   $\backslash\mathrm{exv}\{#1\}$   
 $\backslash\mathrm{mtrx}\{#1\}$

**Scheffeho věta**  $P\left(\left[\sum_{i=1}^m \mathbf{b}^T (\hat{\beta} - \beta) \right]^2 \leq m F_{1-\alpha}(m, n-p)\right) \geq 1 - \alpha$   $\forall \mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ , je-li matice  $A$  typu  $m \times p$  plně hodnosti.

Příklad  $Y_i = \beta_0 + \beta_1 \text{Height}_i + \beta_2 \text{Sex}_i + \beta_3 \text{Height}_i + \beta_4 \text{Sex}_i + \epsilon_i$ ,  $\epsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$  a chceme zkonstruovat 95% PS pro chlapce a dívky

**1)** Napíšeme tvar reg. křivky

- d:  $y = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x$
- ch:  $y = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_2 + (\hat{\beta}_1 + \hat{\beta}_3)x$

**2)** Zvolíme vhodný tvar  $\mathbf{b}$  a  $A$ :

- d:  $\mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ x \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^2$ , pak  $\overbrace{\begin{bmatrix} 1 & x \end{bmatrix}}^A \begin{bmatrix} \hat{\beta}_1 \\ \hat{\beta}_2 \\ \hat{\beta}_3 \\ \hat{\beta}_4 \end{bmatrix}$
- ch:  $\mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ x \end{bmatrix}$ , pak  $\overbrace{\begin{bmatrix} 1 & x \end{bmatrix}}^A \begin{bmatrix} \hat{\beta}_1 \\ \hat{\beta}_2 \\ \hat{\beta}_3 \\ \hat{\beta}_4 \end{bmatrix}$

Nejprve počítejme pro dívky, Označme  $\mathbf{b}^T A = \mathbf{x}^T = (1, x, 0, 0)$  **3)** Odvodíme tvar pásu spolehlivosti (PS)  $P\left(\left[\sum_{i=1}^n \mathbf{x}^T (\hat{\beta} - \beta) \right]^2 \leq 2 F_{1-\alpha}(2, n-4) \sigma^2 \sum_{i=1}^n \mathbf{x}^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}\right) = 1 - \alpha$  kde  $y$  je náhodná proměnná. Upravujeme

$P\left(\left|\sum_{i=1}^n \mathbf{x}^T (\hat{\beta} - \beta)\right| \leq \sqrt{2 F_{1-\alpha}(2, n-4) \sigma^2 \sum_{i=1}^n \mathbf{x}^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}}\right) = 1 - \alpha$

- pro  $\sum_{i=1}^n \mathbf{x}^T (\hat{\beta} - \beta) > 0$  dostáváme **dolní hranici**  $P\left(y \geq \sum_{i=1}^n \mathbf{x}^T (\hat{\beta} - \sqrt{2 F_{1-\alpha}(2, n-4) \sigma^2 \sum_{i=1}^n \mathbf{x}^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}})\right) = 1 - \alpha$

- nebo pro  $\mathbf{x}^T \hat{\beta} - y < 0$  dostáváme **horní hranici**  $P\left(y \leq \mathbf{x}^T \hat{\beta} + \sqrt{2 F_{1-\alpha}(2, n-4)} \sigma^2 \mathbf{x}^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}\right) = 1 - \alpha$