

Maticová algebra

Symetrická matice: *A*^{*T*} = *A*
Antisymetrická matice: *A*^{*T*} = −*A*
Pseudo inverze *A*⁺ = (*A*^{*T*} *A*)^{−1}
Sklární součin pro matice **A**,**B** ∈ ℝ^{*m*×*n*}
⟨**A**,**B**⟩ = ∑_{*i*=1}^{*m*} ∑_{*j*=1}^{*n*} *a*_{*ij*}*b*_{*ij*}.
Ortogonalní matice je čtvercová a všechny vektory jsou navzájem kolmé.

Ortonormální matice splňuje podmínky ortogonální a její vektory mají normu 1

Normy

||

v
¯

||

2

=

∑

i
=
1

n

v

i

2

||

v
¯

||

1

=

∑

i
=
1

n

|

v

i

|

||

v
¯

||

∞

=
max

i

|

v

i

|

||

v
¯

||

p

=
(

∑

i
=
1

n

|

v

i

|

p

)

1

p

Frobeniova norma

||

A
¯

||

=

∑

i
=
1

m

∑

j
=
1

n

a

i
j

2

,

A
¯
∈

R

m
×
n

||

A
¯

||

=

√
⟨

A
¯
,

A
¯
⟩
=

√
tr
(

A
¯

A
¯

)
=

√
tr
(

A
¯

A
¯

)
T

=

√

λ

1

+
⋯
+

λ

m

,

kde

λ

1

≥
⋯
≥

λ

m

≥
0

 jsou vlastní čísla PSD matice **A****A**[⊤].

Vzorečky inverzí

(*AB*)^{−1} = *B*^{−1} *A*^{−1}
(*αA*)^{−1} = *α*^{−1} *A*^{−1}
(*A*^{*T*})^{−1} = (*A*^{−1})^{*T*}
čtv. matice má inverzi iff regulární

Vzorečky determinantu a stopy

det(*AB*) = *det*(*A*) * *det*(*B*)
det(*A*^{−1}) = (*det*(*A*))^{−1}
det(*A*^{*T*}) = *det*(*A*)
det(*AB*) = *det*(*BA*)
tr(**A** + **B**) = tr(**A**) + tr(**B**)
tr(*α***A**) = *α*tr(**A**)
tr(*A*^{*T*}) = tr(**A**)
tr(**AB**) = tr(**BA**)
tr(**A**) = *λ*₁ + ⋯ + *λ*_{*n*}, kde **A** je symetrická

Vzorečky prostorů

(*rng*(*A*))[⊥] = *null*(*A*^{*T*})
rng(*AB*) ⊆ *rng*(*A*)
null(*AB*) ⊇ *null*(*B*)
rank(*AB*) ≤ min{*rank*(*A*),*rank*(*B*)}

Taylorův polynom

*T*_{*x*}^{*k*}(*y*) = ∑_{*i*=0}^{*k*}

1

i
!

f

(
i
)

(
x
)
(
y
−
x

)

i

,

*T*_{*x*}⁰(*y*) = *f*(*x*),
*T*_{*x*}¹(*y*) = *f*(*x*) + *f*^{*′*}(*x*)(*y* − *x*),
*T*_{*x*}²(*y*) = *f*(*x*) + *f*^{*′*}(*x*)(*y* − *x*) +

1

2

f
″

(
x
)
(
y
−
x

)

2

.

QR rozklad

A = *QR*
Q - ortogonální matice, *R* - horní trojúhelníková

Použití při řešení lineárních rovnic

Ax = *b*, rozložíme *A* = *QR* a vynásobíme soustavou zleva *Q*^{*T*} což dá:

Rx = *Q*^{*T*} *b*

Nehomogenní lineární soustavy Ax = b

- nemá řešení ⇔ *b* ∉ *rng*(*A*)

- jediné řešení ⇔ *b* ∈ *rng*(*A*) a *A* má LN sloupce

- nekonečně řešení ⇔ *b* ∈ *rng*(*A*) a *A* má LZ sloupce

Afinní prostory a zobrazení

af. kombinace: *α*₁ * *x*₁ + ... + *α*_{*n*} * *x*_{*n*}
množina *A* je af. podprostor ⇔ je množina řešení nějaké soustavy *Ax* = *b*

af. nezáv.: Body *x*₁, ..., *x*_{*k*} ∈ *Rn* jsou afinně nezávislé, jestliže žádný není afinní kombinací ostatních.

Ortogonalita

cos
(
ρ
)
=

x

T

y

||

x
¯

||

||

y
¯

||

Matice *U* ∈ ℝ^{*m*×*n*} má ortonormální sloupce ⇔ *m* ≥ *n*, *U*^{*T*} *U* = *I*, isometrie

Ortogonalní projektory

Nechť *X* tvoří sloupce matice *A*, která má LN sloupce a *X* = *rng*(*A*) pak projektor je roven *P* = *AA*⁺ = *A*(*A*^{*T*})^{−1} *A*^{*T*}
Pokud *P* je projektor na *X* pak (*I* − *P*) je projektor na *x*[⊥]
Pro projektor *P* platí že *P*² = *P* = *P*^{*T*}
rng(*P*) = *X*, *null*(*P*) = *X*[⊥]
Pokud má matice jeden řádek *P* =

a

a

T

a

Vzdálenost bodu od roviny

Vzdálenost bodu *b* od prostoru *X* je ||(*I* − *P*)*b*||

Pokud *b* je bod, *X*, *a*^{*T*} *x* = *c*, kde *c* ∈ ℝ vzdálenost bodu je:

a

T

b
−
c

||

a
¯

||

Gramova-Schmitodtova ortonormalizace

neortonormální vektory *a* = *a*₁, ..., *a*_{*n*}, se dají převést na ortonormální vektory *v* = *v*₁, ..., *v*_{*n*}, tak že *span*{*a*} = *span*{*v*}

*v*₁ = *a*₁
*v*₂ = *a*₂ − (*q*₁^{*T*} *a*₂) *q*₁
*v*₃ = *a*₃ − (*q*₁^{*T*} *a*₃) *q*₁ − (*q*₂^{*T*} *a*₃) *q*₂
atd... potom:

v

i

=

a

i

v

i

|

v

i

|

MNČ

Lze zapsat jako Min_{*x* ∈ ℝ^{*n*}} ||*Ax* − *b*||² nebo Min_{*y* ∈ *rng*(*A*)} ||*y* − *b*||²

Algebraicky lze zapsat jako *A*^{*T*} *Ax* = *A*^{*T*} *b*

- A* - matice koeficientů

- b* - vektor výsledků

- x* - vektor parametrů

pozorování je matice (a,b), kde a, jde do *A* a *b* jde do vektoru *b* (aka jde o něco jako funkci *b* = *f*(*a*))

A má LN sloupce

- má jedno řešení

- A* má LN sloupce ⇔ *x* = (*A*^{*T*} *A*)^{−1} *A*^{*T*} *b*

Řešení QR rozkladem

A = *QR*
Rx = *Q*^{*T*} *b*

A má LZ sloupce

- má více řešení

- Najdeme jedno partikulární a přidáme k němu prostor *null*(*A*^{*T*} *A*) = *null*(*A*)

Vlastní čísla

Av = *λ* * *v*, *v* ≠ *o*, ⇔ (*A* − *λ* * *I*) = *o*, *v* ≠ *o*, *A* ∈ ℝ^{*n*×*m*} kde *λ* je vlastní číslo, *v* je vlastní vektor, poté *det*(*A* − *λ* *I*) = 0

Vlastnosti determinantu

λ je vlastní číslo matice**A** ∈ ℝ^{*n*×*m*}

poté platí

λ

a

=

λ

a

,

 kde *a* ∈ ℝ

Určování definit

kde $\mathbf{S}_k = \text{diag}(s_1, \dots, s_k, 0) \in \mathbb{R}^{p \times p}$.

Kvalita aproximace
Pro $k = 1, \dots, r - 1$ dostaneme

$$\frac{\|\mathbf{A} - \mathbf{B}^*\|}{\|\mathbf{A}\|} = \sqrt{\frac{s_{k+1}^2 + \dots + s_r^2}{s_1^2 + \dots + s_r^2}}$$

Pro $r \leq k \leq p$ triviálně platí $\mathbf{B}^* = \mathbf{A}$ a chyba je 0.

PCA pomocí SVD

Předpokládejme: Matice $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1 \dots \mathbf{a}_n] \in \mathbb{R}^{m \times n}$ má ve sloupcích datové vektory $\mathbf{a}_i$, předpokládáme $\mathbf{\bar{a}} = \mathbf{0}$. Promítáme je na podprostor dimenze k . **Řešení**

- Spočítí redukované SVD $\mathbf{A} = \mathbf{USV}^T$, kde $s_1 \geq \dots \geq s_p$.
- Označ $\mathbf{X} = [\mathbf{u}_1 \dots \mathbf{u}_k] \in \mathbb{R}^{m \times k}$.
- Levé singulární vektory $\mathbf{u}_i$ (vlastní vektory matice $\mathbf{AA}^T$) tvoří ortonormální bázi hledaného podprostoru dimenze k .
- Souřadnice promítnutých bodů jsou sloupce matice $\mathbf{X}^T \mathbf{A}$.
- Optimální hodnota úlohy (absolutní chyba) je $s_{k+1}^2 + \dots + s_p^2$.

Lineární programování

Vytvoření duální úlohy

$$\begin{array}{ll} \min \sum_{j \in J} c_j x_j & \max \sum_{i \in I} b_i y_i \\ \text{za podmínky} & \text{za podmínky} \\ \sum_{j \in J} a_{ij} x_j = b_i & y_i \in \mathbb{R}, \quad i \in I_0 \\ \sum_{j \in J} a_{ij} x_j \geq b_i & y_i \geq 0, \quad i \in I_+ \\ \sum_{j \in J} a_{ij} x_j \leq b_i & y_i \leq 0, \quad i \in I_- \\ x_j \in \mathbb{R} & \sum_{i \in I} a_{ij} y_i = c_j, \quad j \in J_0 \\ x_j \geq 0 & \sum_{i \in I} a_{ij} y_i \leq c_j, \quad j \in J_+ \\ x_j \leq 0 & \sum_{i \in I} a_{ij} y_i \geq c_j, \quad j \in J_- \end{array}$$

Vlastnosti duální úlohy

primární/duální	má optimum	neomezená	nepřipustná
má optimum	ano	ne	ne
neomezená	ne	ne	ano
nepřipustná	ne	ano	ano

Věta o komplementaritě

$$\begin{array}{lll} \sum_{j \in J} a_{ij} x_j = b_i & \text{nebo} & y_i = 0 \\ x_j = 0 & \text{nebo} & \sum_{i \in I} a_{ij} y_j = c_j \end{array} \quad \begin{array}{l} \forall i \in I, \\ \forall j \in J. \end{array}$$

Konvexní optimalizace

Minimalizace konvexních funkcí na konvexních množinách.

Kombinace $\alpha_1 x_1 + \dots + \alpha_k x_k$

- Lin: $\alpha_i \in \mathbb{R}$

- Aff: $\sum \alpha_i = 1$

- Nezáp: $\alpha_i \geq 0$ (konvexní kužel)

- Konvex: $\sum \alpha_i = 1, \alpha_i \geq 0$

Pojmy

- Epigraf funkce je množina $\{(\mathbf{x}, y) \in \mathbb{R}^{n+1} \mid f(\mathbf{x}) \leq y\}$.

- Subkontura výšky y je množina $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid f(\mathbf{x}) \leq y\}$.

Konvexní funkce

Funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ je konvexní na konvexní množině $X \subseteq \mathbb{R}^n$, jestliže:

$$\mathbf{x} \in X, \mathbf{y} \in X, 0 \leq \alpha \leq 1 \implies f((1 - \alpha)\mathbf{x} + \alpha\mathbf{y}) \leq (1 - \alpha)f(\mathbf{x}) + \alpha f(\mathbf{y}).$$

Funkce je konvexní pokud je její epigraf konvexní.

Podmínka 1. řádu

Diferencovatelná funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ je konvexní na otevřené konvexní množině $X \subseteq \mathbb{R}^n$, právě když

$$\mathbf{x}, \mathbf{y} \in X \implies f(\mathbf{y}) \geq f(\mathbf{x}) + f'(\mathbf{x})(\mathbf{y} - \mathbf{x}).$$

Podmínka 2. řádu

Dvakrát diferencovatelná funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ je konvexní na otevřené konvexní množině $X \subseteq \mathbb{R}^n$, právě když v každém bodě $\mathbf{x} \in X$ je Hessova matice $f''(\mathbf{x})$ pozitivně semidefinitní.

operace zachovávající konvexitu

- Nechť $g_1, \dots, g_k: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ jsou konvexní funkce a nechť $\alpha_1, \dots, \alpha_k \geq 0$. Pak funkce $f = \alpha_1 g_1 + \dots + \alpha_k g_k$ je konvexní.

- Nechť funkce $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ je konvexní. Nechť funkce $g: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ je konvexní a neklesající. Pak složená funkce $g \circ f$ (daná předpisem $(g \circ f)(x) = g(f(x))$) je konvexní.

- Nechť funkce $f_i: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, i \in \mathbb{I}$ jsou konvexní. Pak funkce $\max_{i \in \mathbb{I}} (f_i(x))$ je konvexní.

- Nechť funkce $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ je konvexní, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}, b \in \mathbb{R}^m$ pak $g(x) = f(Ax + b)$ je konvexní

Volné lokální extrémy

Nechť funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ je v bodě $x \in \mathbb{R}^n$ dvakrát diferencovatelná.

- Jestliže x je lokální minimum [maximum] funkce f , pak platí $f'(x) = 0$ a Hessova matice $f''(x)$ je pozitivně [negativně] semidefinitní.

- Jestliže platí $f'(x) = 0$ a Hessova matice $f''(x)$ je pozitivně [negativně] definitní, pak x je ostré lokální minimum [maximum] funkce f .

Iterační metody

- Iterace: $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{v}_k$.

- Hledání optimálního kroku (parametr α)**

- $\phi_k(\alpha) := f(\mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{v}_k), \text{Min}_{\alpha \in \mathbb{R}} \phi_k(\alpha)$
- najdeme nulovou derivaci a zvolíme extrém který je kladný (takže pokud vyjdou potenciálně dva extrémy s alpha tak alpha musí být kladné)

- Gradientní metoda** - jako další krok od počátečního odhadu zvolíme zápornou hodnotu gradientu

$$\mathbf{v}_k = -f'(\mathbf{x}_k)^T = -\nabla f(\mathbf{x}_k).$$

- Newtonova metoda**

- Původně určená na hledání kořenů. Snaží se najít kořeny Taylorova polynomu funkce. Takže pro minimalizaci musíme pracovat s jacobihio maticí funkce, jinak bychom hledali také kořeny.

- $\mathbf{v}_k = -f''(\mathbf{x}_k)^{-1} f'(\mathbf{x}_k)^T$ - pro hledání extrémů funkce f

- doporučuje délku kroku
- Newtonův směr je sestupný pokud $f' \neq 0$ a f'' je pozitivně definitní

- Pro náhodně zvolený vektor $\mathbf{v}_k \in \mathbb{R}^n$ vypočteme směrovou derivaci

- je-li nulová, možná už jsme ve stacionárním bodě;
- je-li záporná, $\mathbf{v}_k$ je sestupný směr;
- je-li kladná, $-\mathbf{v}_k$ je sestupný směr.

Nelineární MNČ (ř. soustavy rovnic)

- Mějme soustavu rovnic $g(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$

- $f(\mathbf{x}) := \|g(\mathbf{x})\|^2 = \sum_{i=1}^m g_i(\mathbf{x})^2, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$.

- Poté nl. MNČ řeší $\text{Min}_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}} f(\mathbf{x})$

Solvery nl. MNČ - pokračování it. metod

- Gaussova-Newtonova metoda**
 - Rovnicová** $g(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$
 - místo hledání minima $\|g(\mathbf{y})\|^2$ minimalizujeme $\|\mathbf{T}_{1,k}(\mathbf{y})\|^2$,
 - $\mathbf{v}_k = -\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^{-1} \mathbf{g}(\mathbf{x}_k)$
 - Jakobiho matice $g'(x_k)$ musí mít LN sloupce.
 - speciální případ n rovnic o n neznámých $\mathbf{v}_k = -\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^{-1} \mathbf{g}(\mathbf{x}_k)$.
 - Optimalizační** $\text{Min}_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}} g(\mathbf{x})$
 - $\mathbf{v}_k = -(\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k))^{-1} \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{g}(\mathbf{x}_k)$

- Levenbergova-Marquardtova metoda**

- kombinace gradientní a Gauss-newtonovy metody
- $\mathbf{v}_k = -(\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k) + \mu_k \mathbf{I})^{-1} \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{g}(\mathbf{x}_k)$
- čím více μ tím více adidas (gradientní metoda), kompletně GN pro $\mu = 0$
- zvolíme nějakou konstantu $q > 1$ např. 2 a začneme s nějakou velkou hodnotou μ_0 . Pokud se účelová funkce sníží další krok bude $\mu_{k+1} = u_k/q$. Pokud se zvýší $\mu_{k+1} = u_k q$

Vázané extrémy

- Pojmy**

- regulární bod - bod $x \in \mathbb{R}$ zobrazení $g: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, pokud je zobrazen v bodě spojitě diferenciovatelné a Jacobiho matice má LN řádky

- $\lambda_L(\mathbf{x}) = L(\mathbf{x}, \lambda) = f(\mathbf{x}) + \lambda^T g(\mathbf{x})$