UNIVERZITA PALACKÉHO V OLOMOUCI
PŘÍRODOVĚDECKÁ FAKULTA
KATEDRA MATEMATICKÉ ANALÝZY A APLIKACÍ MATEMATIKY

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Diferenciální počet funkcí na simplexu

Vedoucí bakalářské práce:
RNDr. Karel Hron, Ph.D.
Rok odevzdání: 2013

Vypracovala:
Renáta Talská
ME, III. ročník

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem bakalářskou práci zpracovala samostatně pod vedením pana RNDr. Karla Hrona, Ph.D. s použitím uvedené literatury.

V Olomouci dne 10. dubna 2013

Poděkování

Ráda bych poděkovala především svému vedoucímu bakalářské práce panu RNDr. Karlu Hronovi, Ph.D. za spolupráci i za čas, který mi věnoval při konzultacích. Dále moje poděkování patří mé rodině a přátelům, kteří mě po celou dobu studia podporovali.

Obsah

Úvod

V mé bakalářské práci se budu zabývat problematikou kompozičních dat, kompozičních funkcí a diferenciálním počtem pro kompoziční data. Přestože oblast matematiky, která se zabývá tímto typem mnohorozměrných dat, je poměrně mladá, nabízí již mnoho přístupů, jak s takovými daty pracovat. Při práci s kompozičními daty bereme v potaz jen relativní informaci, na rozdíl od standardních mnohorozměrných pozorování, kde nás zajímá informace absolutní. Setkáváme se s nimi v případech, když chceme kvantitativně popsat podíly částí. Pod kompozičními daty si můžeme představit například procentuální podíly zastoupení jednotlivých politických stran v poslanecké sněmovně, relativní zastoupení jednotlivých krevních skupin v populaci Evropy nebo zastoupení různých národností hráčů v zámořské hokejové soutěži NHL. V případech, kdy nás zajímá, jak se kompoziční data vyvíjejí v závislosti na čase, použijeme pro popis vývoje kompozičních dat kompoziční funkce. Konkrétně bychom mohli pozorovat, jak se mění procentuální podíl v zastoupení jednotlivých krevních skupin v Evropě během určitého časového úseku. Diferenciální počet kompozičních funkcí bychom využili v případě, kdybychom chtěli kvantifikovat, jak moc velká změna ve vývoji kompozičních dat nastala.

Práce je rozdělena do tří kapitol, které jsou dále členěny na podkapitoly. V první kapitole se budeme zabývat kompozičními daty jako takovými. Seznámíme se s jejich odlišnou geometrií, nadefinujeme si příslušné operace pro práci s kompozičními daty, představíme si výběrový prostor kompozičních dat a představíme si určitou trasformaci, s jehož pomocí můžeme s kompozičními daty pracovat v reálném prostoru. V kapitole druhé se blíže podíváme na problematiku kompozičních funkcí. Ukážeme si, jak vypadají nám známé reálné funkce s hodnotami ve výběrovém prostoru kompozičních dat, simplexu, a pro jejich zobrazení použijeme odpovídajícího grafického nástroje, ternárního diagramu. Poté, co se seznámíme s kompozičními funkcemi, přejdeme ke stěžejní kapitole této práce, a to k diferenciálnímu počtu kompozičních funkcí. Začneme zavedením pojmu limita kompoziční funkce, protože pomocí ní je derivace kompoziční funkce definována. Zmíníme její vlastnosti a uvidíme, že půjde o analogii toho, s čím se můžete setkat v základních kurzech matematiky na vysokých školách.

Neopomeneme ani příklady derivací kompozičních funkcí, představených ve druhé kapitole. Jelikož jde o práci především teoretickou, pokusím se na vhodných místech doplnit teorii názornými příklady.

1. Kompoziční data a jejich geometrické vlastnosti

Základní poznatky týkající se kompozičních dat sepsal John Aitchison v 80. letech minulého století ve svém stěžejním díle [1], ze kterého budeme čerpat i v této práci. Další použitou literaturou při tvorbě této kapitoly byly knihy [2] [4] [5].

Kompoziční data neboli kompozice jsou definovány jako vektory, jejichž složky jsou kladná čísla, nesoucí pouze relativní informaci; typicky je reprezentujeme jako vektory s libovolným, ale pevně daným součtem složek κ,

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_D)\,, x_i > 0, \sum_{i=1}^{D} x_i = \kappa, \quad \kappa \in \mathbf{R}^+.$$

Relativní informací rozumíme, že jediná informace, kterou má smysl uvažovat, bude obsažena v poměrech mezi složkami daného vektoru. Při násobení vektoru libovolným kladným reálným číslem zůstávají poměry mezi složkami kompozičního vektoru zachovány. Z toho vyplývá, že pro vhodnou intepretaci dat můžeme libovolně měnit součet složek daného vektoru, a to prostřednictvím následující operace.

Definice 1.1 *Mějme dánu D-složkovou kompozici*

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_D) \in \mathbf{R}^D_+.$$

Pak uzávěrem kompozice $\mathbf{x}$ *je rozuměn vektor*

$$\mathcal{C}(\mathbf{x}) = \left(\frac{\kappa x_1}{\sum_{i=1}^{D} x_i}, \frac{\kappa x_2}{\sum_{i=1}^{D} x_i}, \ldots, \frac{\kappa x_D}{\sum_{i=1}^{D} x_i} \right).$$

Složky vektoru pak představují části vzhledem k celku κ. Při volbě $\kappa = 1$ složky kompozice vyjadřují proporcionální části vzhledem k celku κ, pro $\kappa = 100$ představují procentuální podíly na celku κ.

Definice 1.2 *Výběrovým prostorem reprezentací kompozičních dat je simplex, značíme* $\mathcal{S}^D$*,*

$$\mathcal{S}^D = \left\{ \mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_D), x_i > 0, \sum_{i=1}^{D} x_i = \kappa \right\}.$$

Simplex je tedy množina všech vektorů s D kladnými složkami a konstantním součtem rovným číslu κ.

1.1. Aitchisonova geometrie na simplexu

U kompozičních dat nemůžeme pro výpočet například délek a vzdáleností mezi kompozicemi na simplexu použít standardní euklidovskou geometrii. To proto, že tato geometrie nerespektuje jejich přirozené vlastnosti. Uveďme si aspoň dvě z nich. První vlastností je *podkompoziční dominance.* Ta nám říká, že vzdálenost dvou kompozic musí být vždy stejná nebo větší než vzdálenost mezi dvěma příslušnými podkompozicemi. Podkompozicí rozumíme kompoziční vektor, který vznikne výběrem složek z původní kompozice. Ukažme si to na příkladu. Uvažujme dvě kompozice $(1, 7, 2)$ a $(3, 10, 7)$. Použitím operace uzávěru upravíme součet jejich složek na 1 (bez ztráty informace) a dostáváme kompozice $(0{,}1; 0{,}7; 0{,}2)$ a $(0{,}15; 0{,}5; 0{,}35)$. Jejich euklidovská vzdálenost je přibližně rovna číslu 0,255. Nyní uvažujme příslušné podkompozice $(0{,}125; 0{,}875)$ a $(0{,}4125; 0{,}5875)$, vzniklé výběrem prvních dvou složek obou kompozic, s euklidovskou vzdáleností 0,41, která ale není menší nebo rovna vzdálenosti příslušných kompozic. Jako druhou z vlastností zmíníme *invariatnost vzhledem k permutaci.* Protože změnou pořadí složek kompozičního vektoru se nezmění podíly mezi složkami, měla by tuto vlastnost respektovat též libovolná operace, použitá pro analýzu kompozic.

Geometrie, která tyto přirozené vlastnosti kompozičních dat respektuje, se nazývá *Aitchisonova.* Nyní si zavedeme dvě operace, *pertubaci* a *mocninnou transformaci*, které odpovídají standardnímu sčítání vektorů a násobení vektoru skalárem v reálném prostoru.

Definice 1.3 *Mějme dány dvě kompozice* $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{S}^D$*. Pak pertubace mezi* $\mathbf{x}$ *a* $\mathbf{y}$

je definována jako kompozice

$$\mathbf{x} \oplus \mathbf{y} = \mathcal{C}\left(x_1 y_1, x_2 y_2, \ldots, x_D y_D\right).$$

Neutrálním prvkem operace pertubace je

$$\mathbf{n} = \mathcal{C}\left(1, \ldots, 1\right),$$

neboť

$$\mathbf{x} \oplus \mathbf{n} = \mathcal{C}\left(x_1 \cdot 1, x_2 \cdot 1, \ldots, x_D \cdot 1\right) = \mathcal{C}\left(\mathbf{x}\right) \propto \mathbf{x}.$$

Definice 1.4 *Mějme dánu kompozici* $\mathbf{x} \in \mathcal{S}^D$ *a reálné číslo* $\alpha \in \mathbf{R}$*. Pak mocninná transformace je definována jako kompozice*

$$\alpha \odot \mathbf{x} = \mathcal{C}\left(x_1^{\alpha}, x_2^{\alpha}, \ldots, x_D^{\alpha}\right).$$

Následně zavedeme operaci $\ominus$. Pro kompozice $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{S}^D$ a operaci $\ominus$ platí

$$\mathbf{y} \ominus \mathbf{x} = \mathbf{y} \oplus \left[(-1) \odot \mathbf{x}\right].$$

Dále si nadefinujeme v Aitchisonově geometrii skalární součin, normu a vzdálenost mezi kompozicemi.

Definice 1.5 *Skalární součin dvou kompozic* $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{S}^D$ *je definován vztahem*

$$\left\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \right\rangle_a = \frac{1}{2D} \sum_{i=1}^{D} \sum_{j=1}^{D} \ln \frac{x_i}{x_j} \ln \frac{y_i}{y_j}.$$

Definice 1.6 *Norma kompozice* $\mathbf{x} \in \mathcal{S}^D$ *je dána vztahem*

$$\left\| \mathbf{x} \right\|_a = \sqrt{\frac{1}{2D} \sum_{i=1}^{D} \sum_{j=1}^{D} \left(\ln \frac{x_i}{x_j}\right)^2} = \sqrt{\left\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \right\rangle_a}.$$

Definice 1.7 *Vzdálenost mezi dvěma kompozicemi* $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{S}^D$ *určíme ze vztahu*

$$d_a\left(\mathbf{x}, \mathbf{y}\right) = \sqrt{\frac{1}{2D} \sum_{i=1}^{D} \sum_{j=1}^{D} \left(\ln \frac{x_i}{x_j} - \ln \frac{y_i}{y_j}\right)^2} = \left\| \mathbf{x} \ominus \mathbf{y} \right\|_a.$$

1.2. Vyjádření kompozic v ortonormálních souřadnicích

Kvůli simplexu, odlišnému výběrovému prostoru, a specifické geometrii, kterou kompoziční data vyžadují, nelze na data tohoto typu použít standardní metody pro jejich analýzu. Pokud bychom ale chtěli standardní postupy na kompoziční data použít, je potřeba data nejprve upravit pomocí tzv. logratio transformací. Použitím těchto transformací převedeme data ze simplexu do reálného prostoru. Práce v reálném prostoru je nejenom podstatně snazší, ale i odpovídající výsledky analýzy jsou obvykle snázeji interpretovatelné. Existuje několik možných typů logratio transformací, nás bude ale zajímat jen izometrická logratio transformace (značíme ilr), protože pomocí ní lze vyjádřit kompozice v ortonormálních souřadnicích.

Definice 1.8 *Ilr transformace přiřazuje každé kompozici $\mathbf{x} \in \mathcal{S}^D$ řádkový vektor $\mathbf{z} \in \mathbf{R}^{D-1}$, kde $\mathbf{R}^{D-1}$ je reálný vektorový prostor dimenze $D-1$.*

Uvažujme trojsložkovou kompozici $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3) \in \mathcal{S}^3$. Aplikováním ilr transformace na kompozici $\mathbf{x}$ dostaneme souřadnice rovinného vektoru $\mathbf{z} = (z_1, z_2) \in \mathbf{R}^2$. Jedná se tedy o zobrazení ze simplexu do roviny a pro získání ortonormálních souřadnic rovinného vektoru $\mathbf{z}$ použijeme transformační vztahy

$$z_1^{(1)} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \ln \frac{x_1}{\sqrt{x_2 x_3}}, \quad z_2^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \ln \frac{x_2}{x_3}, \tag{1}$$

respektive

$$z_1^{(2)} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \ln \frac{x_2}{\sqrt{x_1 x_3}}, \quad z_2^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \ln \frac{x_1}{x_3}, \tag{2}$$

respektive

$$z_1^{(3)} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \ln \frac{x_3}{\sqrt{x_1 x_2}}, \quad z_2^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \ln \frac{x_1}{x_2}. \tag{3}$$

Výsledné rovinné vektory můžeme zobrazit zpět do simplexu pomocí invezní ilr transformace, kterou značíme ilr^{-1}. Souřadnice třísložkové kompozice

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3) \in \mathcal{S}^3$$

tak získáme v případě (1) pomocí vztahů

$$x_1 = \exp\left(\sqrt{\frac{2}{3}} z_1^{(1)}\right), \tag{4}$$

$$x_2 = \exp\left(-\frac{1}{\sqrt{6}} z_1^{(1)} + \frac{1}{\sqrt{2}} z_2^{(1)}\right), \tag{5}$$

$$x_3 = \exp\left[-\left(\frac{1}{\sqrt{6}} z_1^{(1)} + \frac{1}{\sqrt{2}} z_2^{(1)}\right)\right]. \tag{6}$$

Pro zbylé dvě varianty irl transformace obdržíme výslednou kompozici permutací vztahů (4)$-$(6). Výše uvedené vztahy budeme ilustrovat na následujícím příkladu.

Příklad 1 Mějme dánu kompozici $\mathbf{x} = (0{,}1; 0{,}3; 0{,}6)$, kterou transformujeme ilr transformací a poté zobrazíme zpět do simplexu. Ilr transformaci provedeme dosazením do vztahů (1), (2), (3):

$ilr\,(\mathbf{x}) = \mathbf{z}_1 = \left(z_1^{(1)}, z_2^{(1)}\right),$

$$z_1^{(1)} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \ln \frac{0{,}1}{\sqrt{0{,}3 \cdot 0{,}6}} = -1{,}18;$$

$$z_2^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \ln \frac{0{,}3}{0{,}6} = -0{,}49.$$

$ilr\,(\mathbf{x}) = \mathbf{z}_2 = \left(z_1^{(2)}, z_2^{(2)}\right),$

$$z_1^{(2)} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \ln \frac{0{,}3}{\sqrt{0{,}1 \cdot 0{,}6}} = -1{,}166;$$

$$z_2^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \ln \frac{0{,}1}{0{,}6} = -1{,}267.$$

$ilr\,(\mathbf{x}) = \mathbf{z}_3 = \left(z_1^{(3)}, z_2^{(3)}\right),$

$$z_1^{(3)} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \ln \frac{0{,}6}{\sqrt{0{,}1 \cdot 0{,}3}} = 1{,}014;$$

$$z_2^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \ln \frac{0{,}1}{0{,}3} = -0{,}777.$$

Pro třísložkovou kompozici jsme obdrželi celkem tři možnosti jejího vyjádření v $\mathbf{R}^2$. Nyní získané rovinné vektory

$$\mathbf{z}_1 = (-1{,}18; -0{,}49)\,, \mathbf{z}_2 = (-1{,}166; -1{,}267)\,, \mathbf{z}_3 = (1{,}014; -0{,}777)$$

zobrazíme zpět do simplexu užitím vztahů (4) – (6):

$ilr^{-1}(\mathbf{z}_1) = \mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)\,,$

$$x_1 = \exp\left(\sqrt{\frac{2}{3}} \cdot (-1{,}18)\right) = 0{,}382;$$

$$x_2 = \exp\left(-\frac{1}{\sqrt{6}} \cdot (-1{,}18) + \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (-0{,}49)\right) = 1{,}145;$$

$$x_3 = \exp\left[-\left(\frac{1}{\sqrt{6}} \cdot (-1{,}18) + \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (-0{,}49)\right)\right] = 2{,}289.$$

$ilr^{-1}(\mathbf{z}_2) = \mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)\,,$

$$x_1 = \exp\left(-\frac{1}{\sqrt{6}} \cdot 0{,}166 + \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (-1{,}267)\right) = 0{,}382;$$

$$x_2 = \exp\left(\sqrt{\frac{2}{3}} \cdot 0{,}166\right) = 1{,}145;$$

$$x_3 = \exp\left[-\left(\frac{1}{\sqrt{6}} \cdot 0{,}166 + \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (-1{,}267)\right)\right] = 2{,}289.$$

$ilr^{-1}(\mathbf{z}_3) = \mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)\,,$

$$x_1 = \exp\left(-\frac{1}{\sqrt{6}} \cdot 1{,}014 + \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (-0{,}777)\right) = 0{,}382;$$

$$x_2 = \exp\left[-\left(\frac{1}{\sqrt{6}} \cdot 1{,}014 + \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (-0{,}777)\right)\right] = 1{,}145;$$

$$x_3 = \exp\left(\sqrt{\frac{2}{3}} \cdot 1{,}014\right) = 2{,}289.$$

Získanou kompozici $\tilde{\mathbf{x}} = (0{,}382; 1{,}145; 2{,}289)$ v posledním kroce ještě upravíme na součet 1 a tím získáme naši původní kompozici $\mathbf{x}$,

$$\mathcal{C}(\tilde{\mathbf{x}}) = \mathcal{C}(0{,}382, 1{,}145, 2{,}289) = \left(\frac{0{,}382}{3{,}816}, \frac{1{,}145}{3{,}816}, \frac{2{,}289}{3{,}816}\right) = (0{,}1; 0{,}3; 0{,}6)\,.$$

Dále se v této práci budeme vzhledem k možnosti detailního konkrétního rozepsání obecných vztahů zabývat jen případem pro $D = 3$.

2. Kompoziční data jako funkce

Běžně se setkáváme s kompozičními daty, které se vyvíjejí v závislosti na čase, teplotě atd. Tento vývoj může být popsán pomocí funkcí reálné proměnné t s hodnotami na simplexu. V praxi pomocí těchto funkcí budeme tedy schopni popsat změny v proporcionálním zastoupení složek určité látky, chemických sloučenin, hrubého domácího produktu apod. V této kapitole se pokusíme zmiňované funkce nadefinovat a ukážeme si také konkrétní příklady kompozičních funkcí [4].

Definice 2.1 *Uvažujme nějaký interval I v $\mathbf{R}$. Vektor kladných funkcí reálné proměnné je definovaný jako zobrazení $\mathbf{f} : I \subseteq \mathbf{R} \to \mathbf{R}^3_+$, $\mathbf{f}(t) = (f_1(t), f_2(t), f_3(t))$, $t \in I$. Každá složka f_1, f_2, f_3 vektoru $\mathbf{f}$ je kladná reálná funkce reálné proměnné.*

Příkladem takového vektoru kladných funkcí reálné proměnné může být vektor

$$\mathbf{f}(t) = \left(\frac{3t-10}{5}, \frac{4}{3} + \sin(t), \frac{1}{2}t^3 - 1 \right), t \in \langle 4, 10 \rangle .$$

Definice 2.2 *Nechť I je interval v $\mathbf{R}$. Kompoziční funkce reálné proměnné t je zobrazení $\mathbf{f} : I \subseteq \mathbf{R} \to \mathcal{S}^3$, definované jako kompozice, jejíž složky jsou kladné funkce reálné proměnné, na niž je aplikovaná operace uzávěru $\mathcal{C}$. Kompoziční funkce reálné proměnné je dána vztahem*

$$\mathbf{f}(t) = \mathcal{C}\left(f_1\left(t\right), f_2\left(t\right), f_3\left(t\right)\right) = \left(\frac{f_1(t)}{\sum_{j=1}^3 f_j(t)}, \frac{f_2(t)}{\sum_{j=1}^3 f_j(t)}, \frac{f_3(t)}{\sum_{j=1}^3 f_j(t)} \right), t \in I.$$

Povšimněme si, že kompoziční funkce má součet složek rovný 1.

2.1. Příklady kompozičních funkcí

Nyní se podívejme, jak by vypadaly konstantní a exponenciální kompoziční funkce a polynomy prvního a druhého stupně.

Konstatní kompoziční funkce

Uvažujme reálná čísla $\alpha_i, i = 1,2,3, \alpha_i > 0$. Konstatní kompoziční funkce je definována jako

$$\mathbf{f}(t) = \mathcal{C}\left(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3\right) \in \mathcal{S}^3.$$

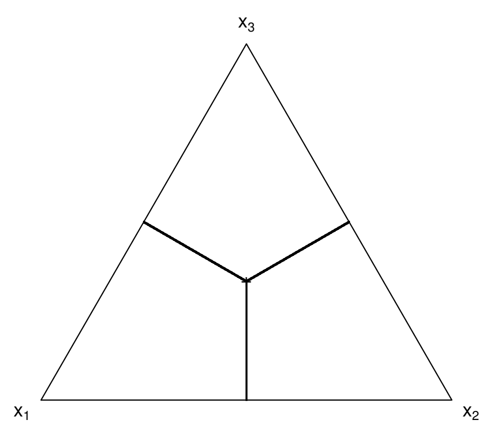
Příkladem takové kompoziční funkce může být kompoziční vektor

$$\mathbf{x} = \mathcal{C}\left(1,6,8\right) = \left(\frac{1}{15}, \frac{6}{15}, \frac{8}{15}\right).$$

Neutrální prvek operace pertubace je taktéž příkladem konstatní kompoziční funkce

$$\mathbf{n} = \mathcal{C}\left(1,1,1\right) = \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right).$$

Pro grafické zobrazení trojsložkové kompozice používáme ternární diagram. Pro kompozici $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ dostáváme bod v rovnostranném trojúhelníku, přičemž vzdálenosti od jednotlivých stran představují hodnoty jednotlivých složek kompozice. V následujícím obrázku je zobrazena kompozice $\mathbf{n}$, která leží v těžišti rovnostranného trojúhelníku, neboť hodnoty všech složek jsou stejné.



Obrázek 1: Zobrazení trojsložkové kompozice $\mathbf{n}$.

Exponenciální kompoziční funkce

Uvažujme reálná čísla a_1, a_2, a_3. Exponenciální kompoziční funkce je definována jako

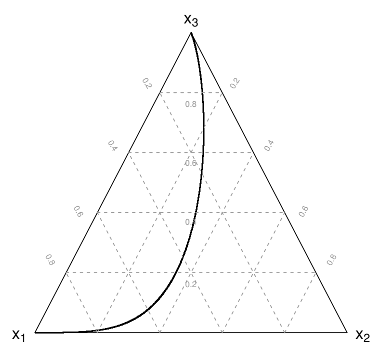
$$\mathbf{f}(t) = \mathcal{C}\left(e^{a_1 t}, e^{a_2 t}, e^{a_3 t}\right) = \mathcal{C}e^{(a_1 t, a_2 t, a_3 t)} \in \mathcal{S}^3, t \in \mathbf{R}.$$

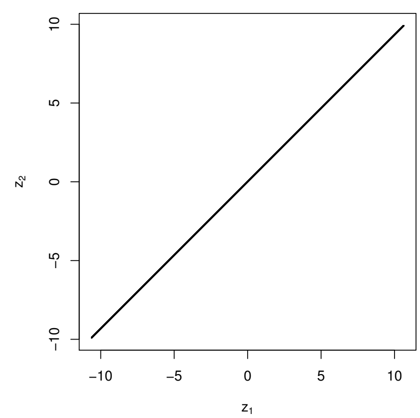
Jako příklad této kompoziční funkce můžeme uvést vektor (viz obrázek 2)

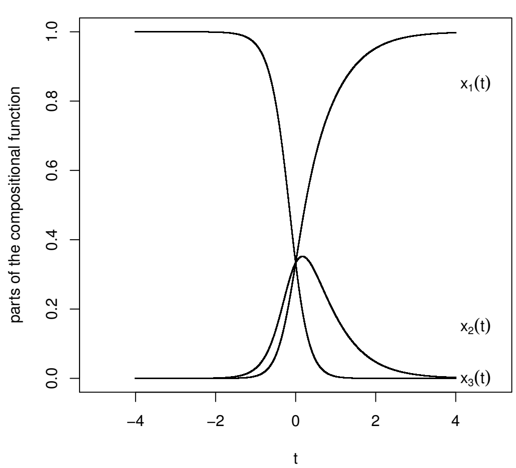
$$\mathbf{f}(t) = \mathcal{C}\left(e^{2t}, e^{\frac{1}{2}t}, e^{-3t}\right) = \mathcal{C}e^{\left(2t, \frac{1}{2}t, -3t\right)},$$

souřadnice $z_1(t), z_2(t)$ určíme ze vztahu

$$ilr(\mathbf{f}(t)) = \left(\frac{13\sqrt{2}}{4\sqrt{3}} \cdot t, \frac{7}{2\sqrt{2}} \cdot t\right), \quad t \in \langle -4, 4 \rangle .$$







Obrázek 2: Zobrazení exponenciální kompoziční funkce v ternárním diagramu (vlevo nahoře), v ortonormálních souřadnicích (vpravo nahoře) a po složkách (dole).

Můžeme se setkat i s *dvojnou exponenciální kompoziční funkcí*. Nechť $\lambda_j, a_j, j = 1, 2, 3$, jsou reálná čísla. Kompoziční funkce v tomto případě je dána předpisem

$$\mathbf{f}(t) = \mathcal{C}e^{\left(\lambda_1 e^{a_1 t}, \lambda_2 e^{a_2 t}, \lambda_3 e^{a_3 t}\right)} \in \mathcal{S}^3, t \in \mathbf{R}.$$

Lineární funkce

Mějme dány kompozice $\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta} \in \mathcal{S}^3$. Definujme kompoziční funkci $\mathbf{P}_1$, která je dána předpisem

$$\mathbf{P}_1(t) = \boldsymbol{\alpha} \oplus (t \odot \boldsymbol{\beta}).$$

Pro trojsložkové kompozice

$$\boldsymbol{\alpha} = \mathcal{C}\left(\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2\right), \boldsymbol{\beta} = \mathcal{C}\left(\beta_0, \beta_1, \beta_2\right)$$

dostáváme polynom prvního stupně ve tvaru

$$\begin{aligned}\mathbf{P}_1(t) &= \mathcal{C}\left(\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2\right) \oplus \left(t \odot \mathcal{C}\left(\beta_0, \beta_1, \beta_2\right)\right) \\ &= \mathcal{C}\left(\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2\right) \oplus \mathcal{C}\left(\beta_0^t, \beta_1^t, \beta_2^t\right) \\ &= \mathcal{C}\left(\alpha_0\, \beta_0^t, \alpha_1\, \beta_1^t, \alpha_2\, \beta_2^t\right).\end{aligned}$$

Kvadratická funkce

Mějme dány kompozice $\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\gamma} \in \mathcal{S}^3$. Definujme kompoziční funkci $\mathbf{P}_2$, která je dána předpisem

$$\mathbf{P}_2(t) = \boldsymbol{\alpha} \oplus (t \odot \boldsymbol{\beta}) \oplus (t^2 \odot \boldsymbol{\gamma}).$$

Pro trojsložkové kompozice

$$\boldsymbol{\alpha} = \mathcal{C}\left(\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2\right), \boldsymbol{\beta} = \mathcal{C}\left(\beta_0, \beta_1, \beta_2\right), \boldsymbol{\gamma} = \mathcal{C}\left(\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2\right)$$

dostáváme polynom druhého stupně ve tvaru

$$\begin{aligned}
\mathbf{P}_2(t) &= \mathcal{C}\left(\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2\right) \oplus \left(t \odot \mathcal{C}\left(\beta_0, \beta_1, \beta_2\right)\right) \oplus \left(t^2 \odot \mathcal{C}\left(\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2\right)\right) \\
&= \mathcal{C}\left(\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2\right) \oplus \mathcal{C}\left(\beta_0^t, \beta_1^t, \beta_2^t\right) \oplus \mathcal{C}\left(\gamma_0^{t^2}, \gamma_1^{t^2}, \gamma_2^{t^2}\right) \\
&= \mathcal{C}\left(\alpha_0\, \beta_0^t\, \gamma_0^{t^2}, \alpha_1\, \beta_1^t\, \gamma_1^{t^2}, \alpha_2\, \beta_2^t\, \gamma_2^{t^2}\right).
\end{aligned}$$

Obecně pro polynomy m-tého stupně bude platit vztah

$$\mathbf{P}_m(t) = \boldsymbol{\beta}_0 \oplus \left(t \odot \boldsymbol{\beta}_1\right) \oplus \left(t^2 \odot \boldsymbol{\beta}_2\right) \oplus \cdots \oplus \left(t^m \odot \boldsymbol{\beta}_m\right).$$

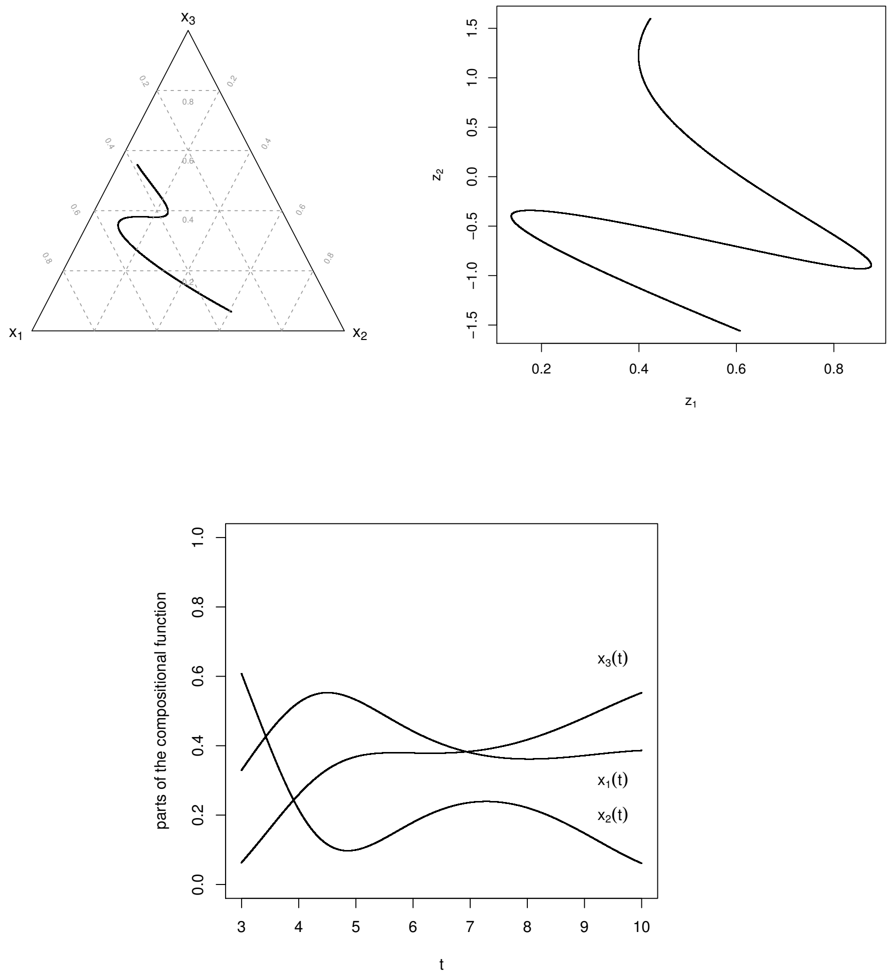
Příklad 2 V posledním příkladě této kapitoly uvažujme interval $I = \langle 3, 10\rangle \subset \mathbf{R}$. Kompoziční funkce

$$\begin{aligned}
\mathbf{f}(t) &= \mathcal{C}\left(\frac{3}{5}t - 1, \frac{4}{3} + \sin(t), \frac{t^2 - 7}{13}\right) \\
&= \mathcal{C}\left(\frac{3t - 5}{5}, \frac{4 + 3\sin(t)}{3}, \frac{t^2 - 7}{13}\right), \quad t \in I,
\end{aligned}$$

je znázorněna na obrázku 3. Souřadnice $z_1(t), z_2(t)$ získáme z předpisu

$$ilr(\mathbf{f}(t)) = \left(\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \ln \frac{\frac{3t-5}{5}}{\sqrt{\frac{(4+\sin(t))(t^2-7)}{39}}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \ln \frac{\frac{4+\sin(t)}{3}}{\frac{t^2-7}{13}}\right), \quad t \in I.$$

$\circ$



Obrázek 3: Zobrazení kompoziční funkce z příkladu 2 v ternárním diagramu (vlevo nahoře), v ortonormálních souřadnicích (vpravo nahoře) a po složkách (dole).

3. Diferenciální počet pro kompoziční data

V předchozí kapitole jsme se seznámili s kompozičními funkcemi, pomocí nichž lze popsat změny kompozičních dat v čase. Pokud chceme znát ale velikost změny, která v datech nastala, je nutné představit poznatky o diferenciálním počtu pro tyto funkce. S popisovanou problematikou se blíže seznámíme v této kapitole. Uvidíme, že půjde o analogii k standardnímu přístupu k diferenciálnímu počtu [3] [4].

3.1. Limita kompoziční funkce

Definice 3.1 (Limita kompoziční funkce v reálném bodě) *Nechť* $\mathbf{f} : I \subseteq \mathbf{R} \to \mathcal{S}^3$ *je kompoziční funkce a nechť* $t_0 \in I$ *je hromadný bod množiny* I*. Říkáme, že kompoziční funkce* $\mathbf{f}$ *má v bodě* t_0 *limitu* $\mathbf{L}_0$*, jestliže*

$$\forall \varepsilon > 0 \quad \exists \delta > 0 \quad 0 < |t - t_0| < \delta : \|\mathbf{f}(t) \ominus \mathbf{L}_0\|_a < \varepsilon.$$

Zapisujeme

$$\lim_{t \to t_0} \mathbf{f}(t) = \mathbf{L}_0.$$

Poznámka:

- Definici můžeme ekvivalentně zapsat jako

  $$\lim_{t \to t_0} \mathbf{f}(t) = \mathbf{L}_0 \Leftrightarrow \lim_{t \to t_0} \left(\mathbf{f}(t) \ominus \mathbf{L}_0\right) = \mathbf{n},$$

  kde $\mathbf{n} = \mathcal{C}\,(1, 1, 1)$ je neutrálním prvkem pertubace.

- Podmínku $\|\mathbf{f}(t) \ominus \mathbf{L}_0\|_a < \varepsilon$ můžeme aplikováním ilr transformace přepsat na

  $$\|\mathbf{f}(t) \ominus \mathbf{L}_0\|_a = \|ilr\,(\mathbf{f}(t)) - ilr\,(\mathbf{L}_0)\| < \varepsilon,$$

  kde $\|\cdot\|$ je euklidovská vzdálenost v $\mathbf{R}^2$.

V případě, že je interval I neomezený zdola, $I = (-\infty, a\rangle$, nebo neomezený shora, $I = \langle a, \infty)$, definujeme limitu v nevlastním bodě následovně.

Definice 3.2 (Limita kompoziční funkce v nevlastním bodě $\pm\infty$) *Nechť* $\mathbf{f} : I = (-\infty, a\rangle \subseteq \mathbf{R} \to \mathcal{S}^3$ *(resp.* $I = \langle a, +\infty) \subseteq \mathbf{R} \to \mathcal{S}^3$*) je kompoziční funkce. Říkáme, že kompoziční funkce* $\mathbf{f}$ *má limitu* $\mathbf{L}_0$ *v bodě* $-\infty$ *(resp.* $+\infty$*), jestliže*

$$\forall \varepsilon > 0 \quad \exists K > 0 \quad t < K : \|\mathbf{f}(t) \ominus \mathbf{L}_0\|_a < \varepsilon$$

$$\left(\mathit{resp.} \quad \forall \varepsilon > 0 \quad \exists K > 0 \quad t > K : \|\mathbf{f}(t) \ominus \mathbf{L}_0\|_a < \varepsilon\right).$$

Zapisujeme

$$\lim_{t \to -\infty} \mathbf{f}(t) = \mathbf{L}_0$$

$$(\mathit{resp.} \lim_{t \to +\infty} \mathbf{f}(t) = \mathbf{L}_0).$$

3.2. Vlastnosti limit kompozičních funkcí

Opět můžeme očekávat, že se i v tomto případě bude jednat o analogické vlastnosti, které platí u standardních limit funkcí.

Věta 3.1 *Každá kompoziční funkce má v bodě nejvýše jednu limitu, tzn. jednu nebo žádnou.*

Věta 3.2 *Nechť* $\mathbf{f}, \mathbf{g} : I \subseteq \mathbf{R} \to \mathcal{S}^3$ *jsou kompoziční funkce a* $\alpha \in \mathbf{R}$. *Nechť existují limity* $\lim_{t \to t_0} \mathbf{f}(t)$ *a* $\lim_{t \to t_0} \mathbf{g}(t)$. *Potom platí*

$$\lim_{t \to t_0} (\mathbf{f} \oplus \mathbf{g})(t) = \left(\lim_{t \to t_0} \mathbf{f}(t)\right) \oplus \left(\lim_{t \to t_0} \mathbf{g}(t)\right)$$

$$\lim_{t \to t_0} (\alpha \odot \mathbf{f})(t) = \alpha \odot \left(\lim_{t \to t_0} \mathbf{f}(t)\right).$$

Předchozí věta nám umožňuje počítat limitu pertubace kompozičních funkcí jako pertubaci limit kompozičních funkcí a pro libovolnou konstantu platí, že ji můžeme (prostřednictvím mocninné transformace) vytknout před limitu.

Věta 3.3 *Nechť* $\mathbf{f} : I \subseteq \mathbf{R} \to \mathcal{S}^3$ *je kompoziční funkce a nechť* $\varphi : I \subseteq \mathbf{R} \to \mathbf{R}$ *je reálná funkce. Pokud existují limity* $\lim_{t \to t_0} \mathbf{f}(t)$ *a* $\lim_{t \to t_0} \varphi(t)$, *pak*

$$\lim_{t \to t_0} (\varphi \odot \mathbf{f})(t) = \left(\lim_{t \to t_0} \varphi(t)\right) \odot \left(\lim_{t \to t_0} \mathbf{f}(t)\right).$$

Limitu mocninné transformace mezi reálnou funkcí a kompoziční funkcí můžeme podle této věty počítat jako mocninnou transformaci mezi limitami. Poslední věta nám dává do souvislosti předchozí vlastnosti s *ilr* transformací.

Věta 3.4 *Nechť* $\mathbf{f} : I \subseteq \mathbf{R} \to \mathcal{S}^3$*. Pokud* $\lim_{t \to t_0} \mathbf{f}(t) = \mathbf{L}_0$*, pak*

$$\lim_{t \to t_0} ilr\left(\mathbf{f}(t)\right) = ilr\left(\mathbf{L}_0\right).$$

3.3. Spojitost kompozičních funkcí v bodě a na množině

Spojitost funkce, jak už název sám napovídá, nám říká, zda je funkce v daném bodě definičního oboru spojitá (lze nakreslit graf funkce nepřerušovanou čarou) nebo je v uvažovaném bodě graf funkce přerušen. Spojitost je definovaná pomocí limity funkce a o funkci řekneme, že je v daném bodě spojitá, jestliže se limita funkce v daném bodě rovná funkční hodnotě v tomto bodě. S přihlédnutím k Aitchisonově geometrii můžeme spojitost na simplexu definovat analogicky.

Definice 3.3 *Nechť* $\mathbf{f} : I \subseteq \mathbf{R} \to \mathcal{S}^3$ *je kompoziční funkce a nechť* $t_0 \in I$ *je bod, v němž má kompoziční funkce limitu. Říkáme, že funkce* $\mathbf{f}$ *je spojítá v bodě* t_0 *právě tehdy, když* $\lim_{t \to t_0} \mathbf{f}(t) = \mathbf{f}(t_0)$*.*

Dále se podíváme na čtyři vlastnosti, které se spojitostí funkce v bodě souvisí. Opět můžeme očekávat platnost obdobných vět jako v případě reálných funkcí reálné proměnné.

Věta 3.5 *Nechť* $\mathbf{f}, \mathbf{g} : I \subseteq \mathbf{R} \to \mathcal{S}^3$ *jsou kompoziční funkce a* $\alpha \in \mathbf{R}$*. Pokud jsou* $\mathbf{f}$ *a* $\mathbf{g}$ *spojité v* $t_0 \in I$*, pak kompoziční funkce* $\mathbf{f} \oplus \mathbf{g}$ *a* $\alpha \odot \mathbf{f}$ *jsou spojité v bodě* t_0*.*

Věta 3.6 *Nechť* $\mathbf{f} : I \subseteq \mathbf{R} \to \mathcal{S}^3$ *je kompoziční funkce a nechť* $\varphi : I \to \mathbf{R}$ *je reálná funkce. Pokud jsou* $\mathbf{f}$ *a* φ *spojité v* $t_0 \in I$*, pak je funkce* $\varphi \odot \mathbf{f}$ *spojitá v* t_0*.*

Věta 3.7 *Nechť* $\mathbf{f} : I \subseteq \mathbf{R} \to \mathcal{S}^3$ *je kompoziční funkce a nechť* $\Phi : J \to I$ *je reálná funkce. Pokud je* Φ *spojitá v* $t_0 \in J$ *a* $\mathbf{f}$ *je spojitá v bodě* $\Phi(t_0) \in I$*, pak je složená funkce* $\mathbf{f} \circ \Phi$ *spojitá v* t_0*.*

Věta 3.8 *Nechť* $\mathbf{f} : I \subseteq \mathbf{R} \to \mathcal{S}^3$ *je kompoziční funkce. Pokud je* $\mathbf{f}$ *spojitá v* $t_0 \in I$*, pak je omezená na intervalu* $(t_0 - \delta, t_0 + \delta) \subseteq I$.

O funkci řekneme, že je spojitá na množině, je-li spojitá v každém bodě na námi uvažované množině. Opět s přihlédnutím k Aitchisonově geometrii, která je vyžadována, definujeme spojitost na množině následovně.

Definice 3.4 *Kompoziční funkce* $\mathbf{f} : I \subseteq \mathbf{R} \to \mathcal{S}^3$ *je spojitá na množině* $J \subseteq I$*, jestliže je spojitá v každém bodě množiny* J.

Následně tak obdržíme kompoziční variantu známé Weierstrassovy věty.

Věta 3.9 *Nechť* $\mathbf{f} : I \subset \mathbf{R} \to \mathcal{S}^3$*. Pokud je* $\mathbf{f}$ *spojitá na uzavřeném intervalu* I*, pak je na tomto intervalu omezená a Aitchisonova norma takové kompoziční funkce nabývá v nějakých bodech uzavřeného intervalu* I *své minimální a maximální hodnoty.*

Příklad 3 Pro kompoziční funkci

$$\mathbf{f}(t) = \mathcal{C}\left(\exp(t^2-1), \frac{t^2-4}{t^3-8}, 3t+4\right)$$

spočtěme její limitu

$$\lim_{t\to 2}\mathbf{f}(t) = \lim_{t\to 2}\mathcal{C}\left(\exp(t^2-1), \frac{t^2-4}{t^3-8}, 3t+4\right),$$

a to nejprve na simplexu. Označme si složky kompoziční funkce

$$f_1(t) = \exp(t^2-1), \quad f_2(t) = \frac{t^2-4}{t^3-8}, \quad f_3(t) = 3t+2$$

a spočtěme limitu pro každou složku zvlášť. Tedy

$$\lim_{t\to 2} f_1(t) = \exp(t^2-1) = \exp(2^2-1) = \exp(3),$$

$$\lim_{t\to 2} f_2(t) = \frac{t^2-4}{t^3-8} = \lim_{t\to 2} \frac{(t-2)(t+2)}{(t-2)(t^2+2t+4)} =$$

$$= \lim_{t\to 2} \frac{t+2}{(t^2+2t+4)} = \frac{2+2}{(2^2+2\cdot 2+4)} = \frac{4}{12} = \frac{1}{3},$$

$$\lim_{t\to 2} f_3(t) = \lim_{t\to 2}(3t+4) = 3\cdot 2+4 = 10.$$

Spočtenou limitu

$$\begin{aligned}\lim_{t\to 2} \mathbf{f}(t) &= \mathcal{C}\left(\exp(3), \frac{1}{3}, 10\right)\\ &= (0{,}328, 0{,}012, 0{,}660)\end{aligned}$$

ještě převedeme pomocí vztahu (1) do ortonormálních souřadnic,

$$z_1 = \sqrt{\frac{2}{3}} \ln \frac{\exp(3)}{\sqrt{\frac{1}{3}\cdot 10}} = 1{,}958,$$

$$z_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \ln \frac{\frac{2}{5}}{10} = -2{,}405.$$

Získáváme tak vektor se souřadnicemi

$$\mathbf{z} = (1{,}958; -2{,}404)\,.$$

Limitu kompoziční funkce můžeme použitím *ilr* transformace počítat také v reálném prostoru. Dosazením do vztahu (1) dostáváme vyjádření kompoziční funkce $\mathbf{f}(t)$ jako funkce $\mathbf{z}(t) = (z_1(t), z_2(t))$,

$$z_1(t) = \sqrt{\frac{2}{3}} \ln \frac{\exp(t^2-1)}{\sqrt{\frac{t^2-4}{t^3-8}\cdot(3t+4)}} = \sqrt{\frac{2}{3}}\left[(t^2-1) - \ln\left(\frac{t^2-4}{t^3-8}\cdot(3t+4)\right)^{\frac{1}{2}}\right] =$$

$$= \sqrt{\frac{2}{3}}\left[(t^2-1) - \ln\left(\frac{(t-2)(t+2)}{(t-2)(t^2+2t+4)}\cdot(3t+4)\right)^{\frac{1}{2}}\right] =$$

$$= \sqrt{\frac{2}{3}}\left[(t^2-1) - \ln\left(\frac{(t+2)(3t+4)}{(t^2+2t+4)}\right)^{\frac{1}{2}}\right],$$

$$z_2(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \ln \frac{\frac{t^2-4}{t^3-8}}{3t+4} = \frac{1}{\sqrt{2}} \ln \frac{t+2}{(t^2+2t+4)(3t+4)}.$$

Ve výpočtu jsme využili toho, že platí

$$\ln \frac{a}{b} = \ln(a) - \ln(b), \quad \ln(a)^c = c \cdot \ln(a), \quad a, b > 0, c \in \mathbf{R}.$$

Vypočítejme limity pro $z_1(t), z_2(t)$

$$\lim_{t \to 2} z_1(t) = \sqrt{\frac{2}{3}} \left[(2^2 - 1) - \ln \left(\frac{(2+2)(3 \cdot 2 + 4)}{(2^2 + 2 \cdot 2 + 4)} \right)^{\frac{1}{2}} \right] =$$

$$= \sqrt{\frac{2}{3}} \left[3 - \ln \left(\frac{4 \cdot 10}{12} \right)^{\frac{1}{2}} \right] = 1{,}958,$$

$$\lim_{t \to 2} z_2(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \ln \frac{2+2}{(2^2 + 2 \cdot 2 + 4)(3 \cdot 2 + 4)} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \ln \frac{4}{12 \cdot 10} = -2{,}405.$$

Spočtené hodnoty $(1{,}958, -2{,}405)$ ještě převedeme na simplex za použití vztahů (5), (6), (7).

$$x_1 = \exp \left[- \left(\frac{1}{\sqrt{6}} \cdot 1{,}958 + \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (-2{,}405) \right) \right] = 2{,}4626,$$

$$x_2 = \exp \left(- \frac{1}{\sqrt{6}} \cdot 1{,}958 + \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (-2{,}405) \right) = 0{,}082,$$

$$x_3 = \exp \left(\sqrt{\frac{2}{3}} \cdot 1{,}958 \right) = 4{,}9466.$$

Výslednou kompozici $\tilde{\mathbf{x}} = (2{,}4626, 0{,}082; 4{,}9466)$ si ještě vyjádříme proporcionálně,

$$\mathcal{C}(\tilde{\mathbf{x}}) = \mathcal{C}(2{,}4626, 0{,}082; 4{,}9466) = \left(\frac{2{,}4626}{7{,}4912}, \frac{0{,}0820}{7{,}4912}, \frac{4{,}9466}{7{,}4912} \right) =$$

$$= (0{,}3280; 0{,}012; 0{,}660).$$

Můžeme si všimnout, že vyjádřením kompoziční funkce v souřadnicích jsme eliminovali nespojistost, která se vyskytla při výpočtu limity pro funkci $f_2(t)$. $\circ$

Proveďme stejný postup při výpočtu limity kompoziční funkce i v následujícím příkladu.

Příklad 4 Uvažujme kompoziční funkci

$$\mathbf{f}(t) = \mathcal{C}\left(\frac{\sin^2(2t)}{1-\cos(2t)}, \exp(3t^2+3), \exp(t)\right)$$

a spočtěme na simplexu její limitu

$$\lim_{t\to 0}\mathbf{f}(t) = \mathcal{C}\left(\frac{\sin^2(2t)}{1-\cos(2t)}, \exp(3t^2+3), \exp(t)\right).$$

Označme si složky kompoziční funkce

$$f_1(t) = \frac{\sin^2(2t)}{1-\cos(2t)}, \quad f_2(t) = \exp(3t^2+3), \quad f_3(t) = \exp(t)$$

a spočtěme limity pro každou složku zvlášť.

$$\lim_{t\to 0} f_1(t) = \lim_{t\to 0}\frac{\sin^2(2t)}{1-\cos(2t)} = \lim_{t\to 0}\frac{4\sin^2(t)\cos^2(t)}{1-\cos^2(t)+\sin^2(t)} =$$

$$= \lim_{t\to 0}\frac{4\sin^2(t)\cos^2(t)}{2\sin^2(t)} = 2\cos^2 0 = 2,$$

$$\lim_{t\to 0} f_2(t) = \lim_{t\to 0}\exp(3t^2+3) = \exp(3\cdot 0^2+3) = \exp(3),$$

$$\lim_{t\to 0} f_3(t) = \lim_{t\to 0}\exp(t) = \exp(0) = 1.$$

U první limity jsme využili toho, že platí

$$\sin^2(t)+\cos^2(t) = 1, \quad \sin(2t) = 2\sin(t)\cos(t), \quad \cos(2t) = \cos^2(t)-\sin^2(t).$$

Výsledná limita je

$$\begin{aligned}\lim_{t\to 0}\mathbf{f}(t) &= \mathcal{C}\left(2, \exp(3), 1\right)\\ &= (0{,}087; 0{,}87; 0{,}043)\,,\end{aligned}$$

a souřadnice vektoru $\mathbf{z} = (z_1, z_2)$, dosazením například do vztahu (1), jsou

$$z_1 = -0{,}6588, \quad z_2 = 2{,}1213.$$

Nyní se na celou situaci podíváme z jiného pohledu. Vyjadříme se nejprve kompoziční funkci v ortonormálních souřadnicích $z_1(t), z_2(t)$, potom pro každou souřadnici $z_1(t), z_2(t)$ spočítáme limitu.

$$z_1(t) = \sqrt{\frac{2}{3}} \ln \frac{\frac{\sin^2(2t)}{1-\cos(2t)}}{\sqrt{\exp(3t^2+3)\cdot\exp(t)}} =$$

$$= \sqrt{\frac{2}{3}} \left[\ln \frac{\sin^2(2t)}{1-\cos(2t)} - \ln\Big(\exp(3t^2+t+3)\Big)^{\frac{1}{2}}\right] =$$

$$= \sqrt{\frac{2}{3}} \left[\ln \frac{4\sin^2 t\cos^2 t}{1-\cos^2 t+\sin^2 t} - \frac{1}{2}(3t^2+t+3)\right] =$$

$$= \sqrt{\frac{2}{3}} \left[\ln\Big(2\cos^2 t\Big) - \frac{1}{2}(3t^2+t+3)\right],$$

$$z_2(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \ln \frac{\exp(3t^2+3)}{\exp(t)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \ln\Big(\exp(3t^2-t+3)\Big) = \frac{1}{\sqrt{2}}(3t^2-t+3).$$

Spočítané souřadnice pro funkci $\mathbf{z}(t) = (z_1(t), z_2(t))$ jsou tedy

$$\mathbf{z}(t) = \left(\sqrt{\frac{2}{3}} \left[\ln\Big(2\cos^2 t\Big) - \frac{1}{2}(3t^2+t+3)\right], \frac{1}{\sqrt{2}}(3t^2-t+3)\right).$$

Nyní spočítáme limity.

$$\lim_{t\to 0} z_1(t) = \lim_{t\to 0}\left[\sqrt{\frac{2}{3}} \left[\ln\Big(2\cos^2 t\Big) - \frac{1}{2}(3t^2+t+3)\right]\right] =$$

$$= \sqrt{\frac{2}{3}} \left[\ln\Big(2\cos^2 0\Big) - \frac{1}{2}(3\cdot 0^2+0+3)\right] =$$

$$= \sqrt{\frac{2}{3}} \left(\ln(2) - \frac{1}{2}\cdot 3\right) = -0{,}6588,$$

$$\lim_{t\to 0} z_2(t) = \lim_{t\to 0}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}(3t^2 - t + 3)\right] = \frac{1}{\sqrt{2}}(3\cdot 0^2 - 0 + 3) = 2{,}1213.$$

Spočtené hodnoty $(-0{,}6588, 2{,}1213)$ ještě zobrazíme zpět na simplex dosazením do vztahů (5), (6), (7).

$$x_1 = \exp\left(\sqrt{\frac{2}{3}}\cdot(-0{,}6588)\right) = 0{,}584,$$

$$x_2 = \exp\left(-\frac{1}{\sqrt{6}}\cdot(-0{,}6588) + \frac{1}{\sqrt{2}}\cdot 2{,}1213\right) = 5{,}8646,$$

$$x_3 = \exp\left[-\left(\frac{1}{\sqrt{6}}\cdot(-0{,}6588) + \frac{1}{\sqrt{2}}\cdot 2{,}1213\right)\right] = 0{,}292.$$

Kompozici $\tilde{\mathbf{x}} = (0{,}584; 5{,}8646; 0{,}292)$ si ještě upravíme na součet 1,

$$\mathcal{C}\left(\tilde{\mathbf{x}}\right) = \mathcal{C}\left(0{,}584; 5{,}8646; 0{,}292\right) = \left(\frac{0{,}584}{7{,}4912}, \frac{5{,}8646}{7{,}4912}, \frac{0{,}292}{7{,}4912}\right) =$$

$$= \left(0{,}087; 0{,}870; 0{,}043\right).$$

Stejně jako v předchozím příkladu, i nyní vedlo vyjádření kompoziční funkce v souřadnicích k odstranění nespojitosti při výpočtu limity $\mathbf{f}(t)$ v bodě $t = 0$. $\circ$

Z příkladu 3 a 4 vidíme, že se můžeme sami rozhodnout, zda danou limitu kompoziční funkce budeme počítat na simplexu, nebo v reálném prostoru.

3.4. Derivace kompoziční funkce

Derivace kompozičních funkcí se definuje pomocí limit, stejně jako v případě derivací reálných funkcí. Podíváme se na derivaci kompoziční funkce v bodě a uvedeme si příslušné věty o derivaci kompoziční funkce v daném bodě, které v tomto případě také dokážeme.

Definice 3.5 (Derivace kompoziční funkce v bodě) *Nechť* $\mathbf{f} : I \subseteq \mathbf{R} \to \mathcal{S}^3$ *je kompoziční funkce a nechť* $t \in I$ *je vnitřním bodem* I*, tedy existuje* $\delta > 0$ *takové, že* $(t - \delta, t + \delta) \subset I$*. Kompoziční funkce* $\mathbf{f}$ *má derivaci v bodě* t *právě tehdy, když limita*

$$D^{\oplus}\mathbf{f}(t) = \lim_{h \to 0} \left(\frac{1}{h} \odot (\mathbf{f}(t+h) \ominus \mathbf{f}(t)) \right),$$

existuje. Pak kompozici $D^{\oplus}\mathbf{f}(t) \in \mathcal{S}^3$ *nazýváme derivací kompoziční funkce* $\mathbf{f}$ *v bodě* t*.*

Poznámka: Položíme-li $v = t + h$, potom pro $h \to 0$ dostáváme $v \to t$ a derivaci můžeme vyjádřit ve tvaru

$$D^{\oplus}\mathbf{f}(t) = \lim_{v \to t} \left(\frac{1}{v - t} \odot (\mathbf{f}(v) \ominus \mathbf{f}(t)) \right).$$

Pro jednostranné limity, derivace kompoziční funkce $\mathbf{f}$ v bodě t zprava $D^{\oplus}_{+}\mathbf{f}(t)$ (resp. zleva $D^{\oplus}_{-}\mathbf{f}(t)$), platí analogie se standardním diferenciálním počtem, potažmo jednostrannými derivacemi reálných funkcí.

Věta 3.10 *Nechť* $\mathbf{f} : I \subseteq \mathbf{R} \to \mathcal{S}^3$ *je kompoziční funkce a nechť* $t \in I$ *je vnitřním bodem* I*. Pokud má* $\mathbf{f}$ *derivaci v* $t \in I$*, pak*

$$D^{\oplus}\mathbf{f}(t) = \mathcal{C} \exp\left(D \ln(\mathbf{f}(t))\right) = \mathcal{C} \exp\left(\frac{Df_1(t)}{f_1(t)}, \frac{Df_2(t)}{f_2(t)}, \frac{Df_3(t)}{f_3(t)} \right).$$

Důkaz: Rozepíšeme si výraz

$$\frac{1}{h} \odot (\mathbf{f}(t+h) \ominus \mathbf{f}(t)) =$$

$$= \frac{1}{h} \odot \left[\mathcal{C}\left(f_1(t+h), f_2(t+h), f_3(t+h)\right) \ominus \mathcal{C}\left(f_1(t), f_2(t), f_3(t)\right) \right],$$

provedeme operaci uzávěru

$$= \frac{1}{h} \odot \left[\left(\frac{f_1(t+h)}{\sum_{j=1}^{3} f_j(t+h)}, \frac{f_2(t+h)}{\sum_{j=1}^{3} f_j(t+h)}, \frac{f_3(t+h)}{\sum_{j=1}^{3} f_j(t+h)} \right) \oplus \right.$$

$$\left[(-1) \odot \left(\frac{f_1(t)}{\sum_{j=1}^3 f_j(t)}, \frac{f_2(t)}{\sum_{j=1}^3 f_j(t)}, \frac{f_3(t)}{\sum_{j=1}^3 f_j(t)}\right)\right]\right],$$

protože všechny složky prvního kompozičního vektoru jsou násobeny stejným výrazem $\frac{1}{\sum_{j=1}^3 f_j(t+h)}$, můžeme ho *vypustit*, protože nám to nezmění poměry mezi jednotlivými složkami vektoru. Toho využijeme i u druhého kompozičního vektoru,

$$= \frac{1}{h} \odot \left[(f_1(t+h), f_2(t+h), f_3(t+h)) \oplus \left(\frac{1}{f_1(t)}, \frac{1}{f_2(t)}, \frac{1}{f_3(t)}\right)\right],$$

a po provedení pertubace a mocninné transformace dostáváme

$$= \mathcal{C}\left(\left(\frac{f_1(t+h)}{f_1(t)}\right)^{\frac{1}{h}}, \left(\frac{f_2(t+h)}{f_2(t)}\right)^{\frac{1}{h}}, \left(\frac{f_3(t+h)}{f_3(t)}\right)^{\frac{1}{h}}\right).$$

V následujících dvou krocích využijeme toho, že funkce exponenciální $e^t, t \in \mathbf{R}$ a logaritmická $\ln(t), t \in \mathbf{R}^+$ jsou navzájem funkcemi inverzními, a vzpomeneme si na pravidla pro počítání s logaritmy, kterých jsme už využili v příkladě 3,

$$= \mathcal{C}\exp\left(\ln\left(\frac{f_1(t+h)}{f_1(t)}\right)^{\frac{1}{h}}, \ln\left(\frac{f_2(t+h)}{f_2(t)}\right)^{\frac{1}{h}}, \ln\left(\frac{f_3(t+h)}{f_3(t)}\right)^{\frac{1}{h}}\right) =$$

$$= \mathcal{C}\exp\left(\frac{\ln f_1(t+h) - \ln f_1(t)}{h}, \frac{\ln f_2(t+h) - \ln f_2(t)}{h}, \frac{\ln f_3(t+h) - \ln f_3(t)}{h}\right).$$

Pro limitu z tohoto výrazu bude platit

$$D^{\oplus}\mathbf{f}(t) = \lim_{h\to 0}\left(\frac{1}{h} \odot (\mathbf{f}(t+h) \ominus \mathbf{f}(t))\right) =$$

$$= \mathcal{C}\exp\left(\lim_{h\to 0}\frac{\ln f_1(t+h) - \ln f_1(t)}{h}, \lim_{h\to 0}\frac{\ln f_2(t+h) - \ln f_2(t)}{h},\right.$$

$$\left.\lim_{h\to 0}\frac{\ln f_3(t+h) - \ln f_3(t)}{h}\right) =$$

$$= \mathcal{C} \exp\left(D \ln f_1(t), D \ln f_2(t), D \ln f_3(t)\right) =$$

$$= \mathcal{C} \exp\left(D \ln\left(\mathbf{f}(t)\right)\right).$$

$\square$

Vztah mezi spojitostí a derivací kompoziční funkce v bodě popisuje následující věta.

Věta 3.11 *Nechť* $\mathbf{f} : I \subseteq \mathbf{R} \to \mathcal{S}^3$ *je kompoziční funkce, která má derivaci v bodě* $t_0 \in I$*, bod* t_0 *je vnitřním bodem* I*. Potom je kompoziční funkce v bodě* t_0 *spojitá.*

Důkaz: Důkaz provedeme pomocí následujícího výpočtu

$$\begin{aligned}
\lim_{t\to t_0} \left(\mathbf{f}(t) \ominus \mathbf{f}(t_0)\right) &= \lim_{t\to t_0} \left[(t - t_0) \odot \left(\frac{1}{t - t_0} \odot \left(\mathbf{f}(t) \ominus \mathbf{f}(t_0)\right)\right)\right] \\
&= \left(\lim_{t\to t_0} (t - t_0)\right) \odot \left(\lim_{t\to t_0} \frac{1}{t - t_0} \odot \left(\mathbf{f}(t) \ominus \mathbf{f}(t_0)\right)\right) \\
&= \underbrace{\left(\lim_{t\to t_0} (t - t_0)\right)}_{=0} \odot D^{\oplus}\mathbf{f}(t_0) = \mathbf{n},
\end{aligned}$$

tedy $\lim_{t\to t_0} \mathbf{f}(t) = \mathbf{f}(t_0)$ a podle definice 3.3 o spojitosti funkce v bodě je kompoziční funkce $\mathbf{f}$ v bodě t_0 spojitá. $\square$

Věta 3.12 *Nechť* $\mathbf{f}, \mathbf{g} : I \subseteq \mathbf{R} \to \mathcal{S}^3$ *mají derivaci v bodě* t *a nechť* $\lambda \in \mathbf{R}$*. Potom*

$$D^{\oplus}\left(\mathbf{f} \oplus \mathbf{g}\right)(t) = D^{\oplus}\mathbf{f}(t) \oplus D^{\oplus}\mathbf{g}(t),$$

$$D^{\oplus}\left(\lambda \odot \mathbf{f}\right)(t) = \lambda \odot D^{\oplus}\mathbf{f}(t).$$

Důkaz: První vztah dokážeme jednoduchými úpravami výrazu

$$\begin{aligned}
D^{\oplus}\left(\mathbf{f} \oplus \mathbf{g}\right)(t) &= \lim_{h\to 0} \left(\frac{1}{h} \odot \left(\left(\mathbf{f} \oplus \mathbf{g}\right)(t + h) \ominus \left(\mathbf{f} \oplus \mathbf{g}\right)(t)\right)\right) \\
&= \lim_{h\to 0} \left(\frac{1}{h} \odot \left(\mathbf{f}(t + h) \oplus \mathbf{g}(t + h) \ominus \left(\mathbf{f}(t) \oplus \mathbf{g}(t)\right)\right)\right)
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \lim_{h\to 0}\left(\frac{1}{h}\odot(\mathbf{f}(t+h)\ominus\mathbf{f}(t))\oplus\frac{1}{h}\odot(\mathbf{g}(t+h)\ominus\mathbf{g}(t))\right)\\
&= \lim_{h\to 0}\left(\frac{1}{h}\odot(\mathbf{f}(t+h)\ominus\mathbf{f}(t))\right)\oplus\lim_{h\to 0}\left(\frac{1}{h}\odot(\mathbf{g}(t+h)\ominus\mathbf{g}(t))\right)\\
&= D^{\oplus}\mathbf{f}(t)\oplus D^{\oplus}\mathbf{g}(t),
\end{aligned}
$$

druhý vztah dokážeme obdobně

$$
\begin{aligned}
D^{\oplus}(\lambda\odot\mathbf{f})(t) &= \lim_{h\to 0}\left(\frac{1}{h}\odot(\lambda\odot\mathbf{f}(t+h)\ominus\lambda\odot\mathbf{f}(t))\right)\\
&= \lambda\odot\lim_{h\to 0}\left(\frac{1}{h}\odot(\mathbf{f}(t+h)\ominus\mathbf{f}(t))\right)\\
&= \lambda\odot D^{\oplus}\mathbf{f}(t).
\end{aligned}
$$

□

Věta 3.13 *Nechť* $\mathbf{f} : I\subseteq\mathbf{R}\to\mathcal{S}^3$ *je kompoziční funkce, která má derivaci v bodě* t, $t\in I$ *a nechť* $\varphi : I\subseteq\mathbf{R}\to\mathbf{R}$ *je reálná funkce, která má derivaci v bodě* t, $t\in I$. *Pak*

$$
D^{\oplus}(\varphi\odot\mathbf{f})(t) = (D\varphi(t)\odot\mathbf{f}(t))\oplus\Big(\varphi(t)\odot D^{\oplus}\mathbf{f}(t)\Big).
$$

Důkaz: Podle věty 3.10 si rozepíšeme výraz

$$
\begin{aligned}
D^{\oplus}(\varphi\odot\mathbf{f})(t) &= D^{\oplus}\Big((f_1(t))^{\varphi(t)},(f_2(t))^{\varphi(t)},(f_3(t))^{\varphi(t)}\Big)\\
&= \mathcal{C}\exp\Big(D\ln(f_1(t))^{\varphi(t)},D\ln(f_2(t))^{\varphi(t)},D\ln(f_3(t))^{\varphi(t)}\Big)\\
&= \mathcal{C}\exp\left(D\left(\varphi(t)\ln(f_1(t))\right),D\left(\varphi(t)\ln(f_2(t))\right),D\left(\varphi(t)\ln(f_3(t))\right)\right),
\end{aligned}
$$

spočítáme si derivaci součinu výrazu

$$
D\left(\varphi(t)\ln(f_j(t))\right) = D\varphi(t)\ln(f_j(t))+\varphi(t)\frac{Df_j(t)}{f_j(t)}, j=1,2,3,
$$

a pokračujeme

$$
\mathcal{C}\exp\left(D\varphi(t)\ln(f_1(t))+\varphi(t)\frac{Df_1(t)}{f_1(t)},D\varphi(t)\ln(f_2(t))+\varphi(t)\frac{Df_2(t)}{f_2(t)},\right.
$$

$$D\varphi(t)\ln(f_3(t)) + \varphi(t)\frac{Df_3(t)}{f_3(t)}\bigg) =$$

$$= \mathcal{C}\left(\exp\left(D\varphi(t)\ln(f_1(t))\right)\cdot\exp\left(\varphi(t)\frac{Df_1(t)}{f_1(t)}\right),\right.$$

$$\exp\left(D\varphi(t)\ln(f_2(t))\right)\cdot\exp\left(\varphi(t)\frac{Df_2(t)}{f_2(t)}\right),$$

$$\left.\exp\left(D\varphi(t)\ln(f_3(t))\right)\cdot\exp\left(\varphi(t)\frac{Df_3(t)}{f_3(t)}\right)\right).$$

Protože každá složka vektoru je tvořena součinem dvou funkcí, můžeme si rozepsat vektor na pertubaci dvou vektorů, tedy na kompozice

$$\mathcal{C}\exp\left(\ln(f_1(t))^{D\varphi(t)}, \ln(f_2(t))^{D\varphi(t)}, \ln(f_3(t))^{D\varphi(t)}\right)\oplus$$

$$\mathcal{C}\exp\left(\varphi(t)\frac{Df_1(t)}{f_1(t)}, \varphi(t)\frac{Df_2(t)}{f_2(t)}, \varphi(t)\frac{Df_3(t)}{f_3(t)}\right).$$

V následujícím kroku ještě upravíme tvar druhého vektoru tak, že aplikujeme exponenciální funkci na každou složku vektoru zvlášť,

$$\mathcal{C}\exp\left(\ln(f_1(t))^{D\varphi(t)}, \ln(f_2(t))^{D\varphi(t)}, \ln(f_3(t))^{D\varphi(t)}\right)\oplus$$

$$\mathcal{C}\left(\left(\exp\frac{Df_1(t)}{f_1(t)}\right)^{\varphi(t)}, \left(\exp\frac{Df_2(t)}{f_2(t)}\right)^{\varphi(t)}, \left(\exp\frac{Df_3(t)}{f_3(t)}\right)^{\varphi(t)}\right) =$$

$$= (D\varphi(t)\odot\mathbf{f}(t))\oplus\left(\varphi(t)\odot D^{\oplus}\mathbf{f}(t)\right).$$

□

Věta 3.14 (O derivaci složené funkce) *Nechť $\varphi : I \subseteq \mathbf{R} \to \mathbf{R}$ je reálná funkce, která má derivaci v bodě t a nechť $\mathbf{f} : \varphi(I) \subseteq \mathbf{R} \to \mathcal{S}^3$ je kompoziční funkce, která má derivaci v bodě $\varphi(t) \in \varphi(I)$. Potom $\mathbf{f}\circ\varphi : I \subseteq \mathbf{R} \to \mathcal{S}^3$ je kompoziční funkce, která má derivaci v bodě t a platí*

$$D^{\oplus}(\mathbf{f}\circ\varphi)(t) = (D\varphi(t))\odot D^{\oplus}\mathbf{f}(\varphi(t)).$$

Důkaz: Platnost vztahu dokážeme použitím věty 3.10.

$$D^{\oplus}\left(\mathbf{f}\circ\varphi\right)(t)=\mathcal{C}\exp\left(D\ln(\mathbf{f}(\varphi(t)))\right)=$$

$$=\mathcal{C}\exp\left(D\ln(f_1(\varphi(t))),D\ln(f_2(\varphi(t))),D\ln(f_3(\varphi(t)))\right)=$$

$$=\mathcal{C}\exp\left(\frac{Df_1(\varphi(t))D\varphi(t)}{f_1(\varphi(t))},\frac{Df_2(\varphi(t))D\varphi(t)}{f_2(\varphi(t))},\frac{Df_3(\varphi(t))D\varphi(t)}{f_3(\varphi(t))}\right).$$

Složky

$$\frac{Df_j(\varphi(t))D\varphi(t)}{f_j(\varphi(t))},\quad j=1,2,3,$$

si můžeme upravit do tvaru

$$\ln\left(\exp\frac{Df_j(\varphi(t))}{f_j(\varphi(t))}\right)^{D\varphi(t)},\quad j=1,2,3,$$

protože platí

$$\ln\left(\exp\frac{Df_j(\varphi(t))}{f_j(\varphi(t))}\right)^{D\varphi(t)}=D\varphi(t)\left(\ln\left(\exp\frac{Df_j(\varphi(t))}{f_j(\varphi(t))}\right)\right)=D\varphi(t)\frac{Df_j(\varphi(t))}{f_j(\varphi(t))}.$$

A pokračujeme v dokazování se složkami v tomto tvaru, tedy

$$\mathcal{C}\exp\left(\ln\left(\exp\frac{Df_1(\varphi(t))}{f_1(\varphi(t))}\right)^{D\varphi(t)},\ln\left(\exp\frac{Df_2(\varphi(t))}{f_2(\varphi(t))}\right)^{D\varphi(t)},\right.$$

$$\left.\ln\left(\exp\frac{Df_3(\varphi(t))}{f_3(\varphi(t))}\right)^{D\varphi(t)}\right)=$$

$$=\mathcal{C}\left(\left(\exp\frac{Df_1(\varphi(t))}{f_1(\varphi(t))}\right)^{D\varphi(t)},\left(\exp\frac{Df_2(\varphi(t))}{f_2(\varphi(t))}\right)^{D\varphi(t)},\left(\exp\frac{Df_3(\varphi(t))}{f_3(\varphi(t))}\right)^{D\varphi(t)}\right)=$$

$$=(D\varphi(t))\odot D^{\oplus}\mathbf{f}(\varphi(t)).$$

□

Nakonec si dejme do souvislosti derivaci kompoziční funkce s jejím vyjádřením v ortonormálních souřadnicích.

Věta 3.15 *Nechť* $\mathbf{f}, \mathbf{g} : I \subseteq \mathbf{R} \to \mathcal{S}^3$ *je kompoziční funkce a nechť* $t \in I$ *je vnitřním bodem* I. *Jestliže* $\mathbf{f}$ *má derivaci v bodě* $t \in I$, *pak*

$$D^{\oplus}\mathbf{f}(t) = ilr^{-1}(D\, ilr(\mathbf{f}(t))),$$

kde D *značí derivaci reálné funkce reálné proměnné, která je aplikovaná na každou složku funkce.*

Důkaz věty 3.15 najdeme v [4].

3.5. Výpočet derivací kompozičních funkcí

Spočítáme derivace kompozičních funkcí, které jsme již představili ve druhé kapitole. Podíváme se na derivace konstatní, exponenciální, lineární a kvadratické funkce.

Derivace konstantní funkce

Nechť $\mathbf{f}(t) = \mathcal{C}(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) \in \mathcal{S}^3$ je konstatní funkce. Pro její derivaci v bodě t bude platit

$$\begin{aligned} D^{\oplus}\mathbf{f}(t) &= \mathcal{C}\exp\left(D\ln(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)\right) = \mathcal{C}\exp\left(D\ln\alpha_1, D\ln\alpha_2, D\ln\alpha_3\right) \\ &= \mathcal{C}\exp(0,0,0) = \mathbf{n}. \end{aligned}$$

Derivace konstatní funkce se bude vždy rovnat vektoru $\mathbf{n}$.

Příklad 5 Pro konstatní kompoziční funkci $\mathbf{f}(t) = \mathcal{C}(1,6,8)$ spočítáme její derivaci

$$\begin{aligned} D^{\oplus}\mathbf{f}(t) &= \mathcal{C}\exp\left(D\ln(1,6,8)\right) = \mathcal{C}\exp\left(D(\ln 1), D(\ln 6), D(\ln 8)\right) \\ &= \mathcal{C}\exp(0,0,0) = \mathcal{C}(1,1,1) = \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right). \end{aligned}$$

$\circ$

Derivace exponenciální funkce

Uvažujme exponenciání kompoziční funkci ve tvaru

$$\mathbf{f}(t) = \mathcal{C}\exp(a_1 t, a_2 t, a_3 t) \in \mathcal{S}^3, a_i \in \mathbf{R}, i = 1, 2, 3.$$

Pro derivaci exponenciální funkce bude platit

$$D^{\oplus}\mathbf{f}(t) = \mathcal{C}\exp\left(D\ln(\exp(a_1 t, a_2 t, a_3 t))\right) =$$

$$= \mathcal{C}\exp\left(D\ln(\exp(a_1 t)), D\ln(\exp(a_2 t)), D\ln(\exp(a_3 t))\right) =$$

$$= \mathcal{C}\exp\left(D(a_1 t), D(a_2 t), D(a_3 t)\right) =$$

$$= \mathcal{C}\exp(a_1, a_2, a_3).$$

Příklad 6 Uvažujme exponenciální funkci ve tvaru

$$\mathbf{f}(t) = \mathcal{C}\left(\exp(2t), \exp\left(\frac{1}{2}t\right), \exp(-3t)\right),$$

a její derivaci

$$D^{\oplus}\mathbf{f}(t) = \mathcal{C}\exp\left(D\ln\left(\exp(2t), \exp\left(\frac{1}{2}t\right), \exp(-3t)\right)\right)$$

$$= \mathcal{C}\exp\left(D\ln(\exp(2t)), D\ln\left(\exp\left(\frac{1}{2}t\right)\right), D\ln\left(\exp(-3t)\right)\right)$$

$$= \mathcal{C}\exp\left(D(2t), D\left(\frac{1}{2}t\right), D(-3t)\right)$$

$$= \mathcal{C}\exp\left(2, \frac{1}{2}, -3\right) = \mathcal{C}\left(\exp 2, \exp\frac{1}{2}, \exp(-3)\right)$$

$$= (0{,}8131; 0{,}1814; 0{,}0055)\,.$$

$\circ$

Všimněte si, že derivace exponenciální funkce v bodě $t \in \mathbf{R}$ je rovna vektoru konstant. Tohle bude platit pro derivace všech exponenciálních funkcí.

V kapitole o kompozičních funkcích jsme se zmínili i o *dvojné exponenciální funkci*. Uvažujme tedy nyní tuto funkci, která je dána předpisem

$$\mathbf{f}(t) = \mathcal{C}\exp\left(\lambda_1\exp(a_1t), \lambda_2\exp(a_2t), \lambda_3\exp(a_3t)\right) \in \mathcal{S}^3,$$

kde $\lambda_i, a_i, i = 1, 2, 3$, jsou reálná čísla. Pro její derivaci bude platit

$$D^{\oplus}\mathbf{f}(t) = \mathcal{C}\exp\left(D\ln\left(\exp\left(\lambda_1\exp(a_1t), \lambda_2\exp(a_2t), \lambda_3\exp(a_3t)\right)\right)\right) =$$

$$= \mathcal{C}\exp\left(D\left(\lambda_1\exp(a_1t), \lambda_2\exp(a_2t), \lambda_3\exp(a_3t)\right)\right) =$$

$$= \mathcal{C}\exp\left(D\left(\lambda_1\exp(a_1t)\right), D\left(\lambda_2\exp(a_2t)\right), D\left(\lambda_3\exp(a_3t)\right)\right) =$$

$$= \mathcal{C}\exp\left(a_1\lambda_1\exp(a_1t), a_2\lambda_2\exp(a_2t), a_3\lambda_3\exp(a_3t)\right).$$

Derivace lineární funkce

Pro lineární funkci ve tvaru

$$\mathbf{P}_1(t) = \boldsymbol{\alpha} \oplus (t \odot \boldsymbol{\beta}), \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta} \in \mathcal{S}^3$$

spočteme derivaci

$$D^{\oplus}\left(\boldsymbol{\alpha} \oplus (t \odot \boldsymbol{\beta})\right) = D^{\oplus}\boldsymbol{\alpha} \oplus D^{\oplus}\left(t \odot \boldsymbol{\beta}\right);$$

protože pro derivaci kontantní funkce platí, že je rovna vektoru $\mathbf{n}$, zde pro $D^{\oplus}\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{n}$, můžeme s využitím věty 3.13 o derivaci mocninné transformace pokračovat ve výpočtu

$$\begin{aligned} D^{\oplus}\left(t \odot \boldsymbol{\beta}\right) &= \left((Dt) \odot \boldsymbol{\beta}\right) \oplus \left(t \odot D^{\oplus}\boldsymbol{\beta}\right) \\ &= (1 \odot \boldsymbol{\beta}) \oplus \underbrace{\left(t \odot D^{\oplus}\boldsymbol{\beta}\right)}_{\mathbf{n}} \\ &= \boldsymbol{\beta} = \mathcal{C}\left(\beta_0, \beta_1, \beta_2\right). \end{aligned}$$

Derivace kvadratické funkce

Mějme dánu kvadratickou funkci

$$\mathbf{P}_2(t) = \boldsymbol{\alpha} \oplus (t \odot \boldsymbol{\beta}) \oplus (t^2 \odot \boldsymbol{\gamma}), \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\gamma} \in \mathcal{S}^3.$$

Pro derivaci kvadratické funkce bude platit

$$\begin{aligned} D^{\oplus}\mathbf{P}_2(t) &= D^{\oplus}\left(\boldsymbol{\alpha} \oplus (t \odot \boldsymbol{\beta}) \oplus (t^2 \odot \boldsymbol{\gamma})\right) \\ &= D^{\oplus}(\boldsymbol{\alpha}) \oplus D^{\oplus}(t \odot \boldsymbol{\beta}) \oplus D^{\oplus}(t^2 \odot \boldsymbol{\gamma}); \end{aligned}$$

nyní již víme, čemu se rovnají derivace konstatní a lineární funkce,

$$D^{\oplus}(\boldsymbol{\alpha}) = \mathbf{n}, \quad D^{\oplus}(t \odot \boldsymbol{\beta}) = \boldsymbol{\beta},$$

tedy

$$\begin{aligned} D^{\oplus}\mathbf{P}_2(t) &= \mathbf{n} \oplus \boldsymbol{\beta} \oplus D^{\oplus}(t^2 \odot \boldsymbol{\gamma}) \\ &= \boldsymbol{\beta} \oplus \left(D^{\oplus}(t^2) \odot \boldsymbol{\gamma}\right) \oplus \left(t^2 \odot D^{\oplus}\boldsymbol{\gamma}\right) \\ &= \boldsymbol{\beta} \oplus (2t \odot \boldsymbol{\gamma}) \oplus \underbrace{\left(t^2 \odot D^{\oplus}\boldsymbol{\gamma}\right)}_{\mathbf{n}} \\ &= \boldsymbol{\beta} \oplus (2t \odot \boldsymbol{\gamma}). \end{aligned}$$

Dále se pokusíme o obecný tvar derivace polynomické funkce. Označme mocninnou funkci

$$\mathbf{p}_k(t) = t^k \odot \boldsymbol{\beta}_k,$$

kde k je kladné celé číslo, $\boldsymbol{\beta}_k \in \mathcal{S}^3$, a uvažujme její derivaci. Tedy,

$$\begin{aligned} D^{\oplus}\left(t^k \odot \boldsymbol{\beta}_k\right) &= \left(\left(Dt^k\right) \odot \boldsymbol{\beta}_k\right) \oplus \left(t^k \odot D^{\oplus}\boldsymbol{\beta}_k\right) \\ &= \left(kt^{k-1} \odot \boldsymbol{\beta}_k\right) \oplus \left(t^k \odot \mathbf{n}\right) \\ &= kt^{k-1} \odot \boldsymbol{\beta}_k. \end{aligned}$$

Nechť $\mathbf{P}_m(t) = \bigoplus_{k=0}^m \mathbf{p}_k(t) = \bigoplus_{k=0}^m \left(t^k \odot \boldsymbol{\beta}_k\right)$ je polynom m-tého stupně. Pro derivaci této funkce bude platit

$$D^{\oplus}\mathbf{P}_m(t) = \bigoplus_{k=0}^{m}\left(kt^{k-1} \odot \boldsymbol{\beta}_k\right).$$

Vedle pojmu derivace kompoziční funkce v bodě zavádíme i pojem derivace kompoziční funkce na množině (otevřeném intervalu).

Definice 3.6 *Nechť* $\mathbf{f} : I \subseteq \mathbf{R} \to \mathcal{S}^3$ *je kompoziční funkce a nechť* $J \subseteq I$ *je otevřený interval. Řekneme, že kompoziční funkce* $\mathbf{f}$ *má derivaci na otevřeném intervalu* J *právě tehdy, když má derivaci v každém bodě* $t \in J$*. Kompoziční funkce* $D^{\oplus}\mathbf{f} : J \subseteq \mathbf{R} \to \mathcal{S}^3$*, která přiřadí každému bodu* $t \in J$ *derivaci v tomto bodě,* $D^{\oplus}\mathbf{f}(t)$*, se nazývá derivace kompoziční funkce* $\mathbf{f}$*.*

Příklad 7 Uvažujme funkci

$$\mathbf{f}(t) = \mathcal{C}\left(\frac{3t-5}{5}, \frac{4+3\sin(t)}{3}, \frac{t^2-7}{13}\right), t \in \langle 3, 10 \rangle$$

a spočteme její derivaci

$$D^{\oplus}\mathbf{f}(t) = \mathcal{C}\exp\left(D\ln\left(\frac{3t-5}{5}, \frac{4+3\sin(t)}{3}, \frac{t^2-7}{13}\right)\right) =$$

$$= \mathcal{C}\exp\left(D\ln\frac{3t-5}{5}, D\ln\frac{4+3\sin(t)}{3}, D\ln\frac{t^2-7}{13}\right) =$$

$$= \mathcal{C}\exp\left(\frac{15}{3t-5}, \frac{9\cos(t)}{4+3\sin(t)}, \frac{26t}{t^2-7}\right), t \in \langle 3, 10 \rangle .$$

∘

V definici 2.10 jsme si představili vektor kladných funkcí reálné proměnné $\mathbf{F}(t) = (f_1(t), f_2(t), f_3(t))$. V následující větě si ukážeme, že i na něm můžeme provést derivaci $D^{\oplus}$, protože kompoziční složky ve vztahu

$$D^{\oplus}\mathbf{f}(t) = \mathcal{C}\exp\left(D\ln(\mathbf{f}(t))\right) = \mathcal{C}\exp\left(\frac{Df_1(t)}{f_1(t)}, \frac{Df_2(t)}{f_2(t)}, \frac{Df_3(t)}{f_3(t)}\right),$$

jsou složkami vektoru kladných funkcí.

Věta 3.16 *Nechť* $\mathbf{F} : I \subseteq \mathbf{R} \to \mathbf{R}^3_+$ *a nechť* $t \in I$ *je vnitřním bodem intervalu* I*. Jestliže existuje derivace složek vektoru* $\mathbf{F}$*, pak platí*

$$D^{\oplus}\mathcal{C}\mathbf{F}(t) = \mathcal{C}D^{\oplus}\mathbf{F}(t) = D^{\oplus}\mathbf{F}(t).$$

Důkaz: Rozepsáním vztahu podle věty 3.10 dostáváme

$$D^{\oplus}\mathbf{F}(t) = \mathcal{C}\exp\left(D\ln\mathbf{F}(t)\right) =$$

$$= \mathcal{C}\exp\left(D\ln F_1(t), D\ln F_2(t), D\ln F_3(t)\right) =$$

$$= \mathcal{C}\exp\left(\frac{DF_1(t)}{F_1(t)}, \frac{DF_2(t)}{F_2(t)}, \frac{DF_3(t)}{F_3(t)}\right).$$

Na celou situaci se můžeme podívat i z jiného pohledu. Jako první provedeme operaci uzávěru, poté budeme postupovat stejně jako v předchozím případu,

$$D^{\oplus}\mathcal{C}\mathbf{F}(t) = D^{\oplus}\left(\frac{F_1(t)}{\sum_{j=1}^{3}F_j(t)}, \frac{F_2(t)}{\sum_{j=1}^{3}F_j(t)}, \frac{F_3(t)}{\sum_{j=1}^{3}F_j(t)}\right) =$$

$$= \mathcal{C}\exp\left(D\ln\frac{F_1(t)}{\sum_{j=1}^{3}F_j(t)}, D\ln\frac{F_2(t)}{\sum_{j=1}^{3}F_j(t)}, D\ln\frac{F_3(t)}{\sum_{j=1}^{3}F_j(t)}\right),$$

dále využijeme toho, že pro počítání logaritmu podílu platí, že jej můžeme počítat jako rozdíl logaritmů. Pro jednotlivé složky dostáváme

$$D\ln\frac{F_1(t)}{\sum_{j=1}^{3}F_j(t)} = D\ln F_1(t) - D\ln\left(\sum_{j=1}^{3}F_j(t)\right),$$

$$D\ln\frac{F_2(t)}{\sum_{j=1}^{3}F_j(t)} = D\ln F_2(t) - D\ln\left(\sum_{j=1}^{3}F_j(t)\right),$$

$$D\ln\frac{F_3(t)}{\sum_{j=1}^{3}F_j(t)} = D\ln F_3(t) - D\ln\left(\sum_{j=1}^{3}F_j(t)\right),$$

dosazením do kompozičního vektoru získáváme

$$= \mathcal{C}\exp\left(D\ln F_1(t) - D\ln\left(\sum_{j=1}^{3}F_j(t)\right), D\ln F_2(t) - D\ln\left(\sum_{j=1}^{3}F_j(t)\right),\right.$$

$$\left.D\ln F_3(t) - D\ln\left(\sum_{j=1}^{3}F_j(t)\right)\right);$$

nyní aplikujeme exponenciální funkci na každou složku zvlášť

$$= \mathcal{C}\left(\exp\left(D\ln F_1(t)\right)\cdot\exp\left(-D\ln\left(\sum_{j=1}^{3}F_j(t)\right)\right),\right.$$

$$\exp\left(D\ln F_2(t)\right)\cdot\exp\left(-D\ln\left(\sum_{j=1}^{3}F_j(t)\right)\right),$$

$$\left.\exp\left(D\ln F_3(t)\right)\cdot\exp\left(-D\ln\left(\sum_{j=1}^{3}F_j(t)\right)\right)\right) =$$

$$= \mathcal{C}\exp\left(D\ln F_1(t), D\ln F_2(t), D\ln F_3(t)\right) =$$

$$= \mathcal{C}\exp\left(\frac{DF_1(t)}{F_1(t)}, \frac{DF_2(t)}{F_2(t)}, \frac{DF_3(t)}{F_3(t)}\right).$$

V předposledním kroce jsme využili toho, že každá složka vektoru je násobena stejným výrazem $\exp\left(-D\ln\left(\sum_{j=1}^{3}F_j(t)\right)\right)$, proto ji můžeme vynechat (bez ztráty informace). □

Tvrzení této věty využijeme především při výpočtech. Dovoluje nám totiž provést derivaci před operací uzávěru, čímž dochází ke zjednodušení výpočtů. Podíváme-li se na příklad 6, vidíme, že zde jsme provedli právě prvně derivaci. V následujícím příkladě to zkusíme obráceně, jako první provedeme operaci uzávěru a oba postupy nakonec porovnáme.

Příklad 8 Mějme dán vektor kladných funkcí

$$\mathbf{F}(t) = \left(\exp(2t), \exp\left(\frac{1}{2}t\right), \exp(-3t)\right), \quad t \in \mathbf{R}$$

a spočtěme jeho derivaci tak, že prvně provedeme operaci uzávěru $\mathcal{C}$

$$D^{\oplus}\mathcal{C}\mathbf{F}(t) = D^{\oplus}\left(\frac{\exp(2t)}{S}, \frac{\exp\left(\frac{1}{2}t\right)}{S}, \frac{\exp(-3t)}{S}\right),$$

kde

$$S = \exp(2t) + \exp\left(\frac{1}{2}t\right) + \exp(-3t).$$

Užitím věty 3.10 a pravidel pro počítání s logaritmy dostáváme

$$\mathcal{C}\exp\left(D\ln\frac{\exp(2t)}{S}, D\ln\frac{\exp\left(\frac{1}{2}t\right)}{S}, D\ln\frac{\exp(-3t)}{S}\right) =$$

$$\mathcal{C}\exp\left(D(2t) - D\ln S, D\left(\frac{1}{2}t\right) - D\ln S, D(-3t) - D\ln S\right),$$

protože

$$\ln\left(\exp(2t)\right) = 2t, \quad \ln\left(\exp\left(\frac{1}{2}t\right)\right) = \frac{1}{2}t, \quad \ln\left(\exp(-3t)\right) = -3t.$$

Pokračujeme tak, že aplikujeme exponenciální funkci na každou složku vektoru zvlášť

$$\mathcal{C}\left(\exp\left(D(2t) - D\ln S\right), \exp\left(D\left(\frac{1}{2}t\right) - D\ln S\right), \exp\left(D(-3t) - D\ln S\right)\right),$$

a využijeme toho, že platí

$$\exp(u+v) = \exp(u)\cdot\exp(v), \quad u, v \in \mathbf{R},$$

$$\mathcal{C}\left(\exp\left(D(2t)\right)\exp\left(D\ln S\right), \exp\left(D\left(\frac{1}{2}t\right)\right)\exp\left(D\ln S\right),\right.$$
$$\left.\exp\left(D(-3t)\right)\exp\left(D\ln S\right)\right).$$

Vidíme, že každá složka vektoru je násobena stejným výrazem $\exp(D\ln S)$, můžeme jej tedy vynechat a dostáváme

$$\mathcal{C}\left(\exp\left(D(2t)\right), \exp\left(D\left(\frac{1}{2}t\right)\right), \exp\left(D(-3t)\right)\right),$$

nakonec provedeme derivaci a operaci uzávěru

$$\mathcal{C}\left(\exp 2, \exp\frac{1}{2}, \exp(-3)\right) = (0{,}8131; 0{,}1814; 0{,}0055).$$

Dopočítali jsme se ke stejnému výsledku jako v příkladě 6, ale když porovnáme postupy výpočtů, vidíme, že pokud před derivací provedeme operaci uzávěru, výpočet se nám tím značně zkomplikuje. ◦

Podívejme se ještě na *derivace vyšších řádů*. Dosud jsme totiž uvažovali tzv. derivaci prvního řádu. Derivaci druhého řádu (druhou derivaci) pak dostaneme jednoduše tak, že po provedení první derivace opět derivujeme. Dalším derivováním bychom dostali derivaci třetího řádu (třetí derivaci) a podobně.

Definice 3.7 (Derivace vyšších řádů) *Nechť* $\mathbf{f} : I \subseteq \mathbf{R} \to \mathcal{S}^3$ *je kompoziční funkce. Funkce* $\mathbf{f}$ *má* k*-tou derivaci na otevřeném intervale* $J \subseteq I$*, jestliže pro* $k \geq 2$ *existuje limita*

$$D^{\oplus k}\mathbf{f}(t) = \lim_{h\to 0}\left(\frac{1}{h} \odot \left(D^{\oplus(k-1)}\mathbf{f}(t+h) \ominus D^{\oplus(k-1)}\mathbf{f}(t)\right)\right).$$

Limitu nazýváme k*-tou derivací kompoziční funkce* $\mathbf{f}$ *v bodě* t*.*

Kompoziční funkce $\mathbf{f}$ *má* k*-tou derivaci na otevřeném intervalu* $J \subseteq I$*, jestliže* k*-tá derivace existuje v jakémkoliv bodě intervalu* J*. Kompoziční funkci definovanou na* J *předpisem* $D^{\oplus k}\mathbf{f}(t), t \in J$ *nazýváme* k*-tou derivací* $\mathbf{f}$*.*

Věta 3.17 (O počítání derivací vyšších řádů) *Nechť* $\mathbf{f} : I \subseteq \mathbf{R} \to \mathcal{S}^3$ *je kompoziční funkce, která má* k*-tou derivaci na otevřeném intervalu* $J \subseteq I$*. Pak* k*-tá derivace* $\mathbf{f}$ *v* $t \in J$ *je*

$$D^{\oplus k}\mathbf{f}(t) = \mathcal{C}\left(\exp\left(D^k \ln\left(\mathbf{f}(t)\right)\right)\right), \quad k = 1, 2, \ldots.$$

Příklad 9 Podívejme se, jak bude vypadat druhá derivace kompoziční funkce

$$\mathbf{f}(t) = \mathcal{C}\left(\frac{3t-5}{5}, \frac{4+3\sin(t)}{3}, \frac{t^2-7}{13}\right).$$

V této kapitole v příkladu 7 jsme si spočítali její první derivaci, která je rovna kompoziční funkci

$$D^{\oplus}\mathbf{f}(t) = \mathcal{C}\exp\left(\frac{15}{3t-5}, \frac{9\cos(t)}{4+3\sin(t)}, \frac{26t}{t^2-7}\right).$$

Spočítejme nyní druhou derivaci.

$$D^{\oplus 2}\mathbf{f}(t) = \mathcal{C}\left(\exp\left(D^2 \ln\left(\mathbf{f}(t)\right)\right)\right) =$$

$$= \mathcal{C}\left(\exp\left(D\ln\left(\exp\left(\frac{15}{3t-5}, \frac{9\cos(t)}{4+3\sin(t)}, \frac{26t}{t^2-7}\right)\right)\right)\right) =$$

$$= \mathcal{C}\left(\exp\left(D\left(\frac{15}{3t-5}, \frac{9\cos(t)}{4+3\sin(t)}, \frac{26t}{t^2-7}\right)\right)\right),$$

nyní provedeme derivaci po složkách vektoru podle vzorce pro derivaci podílu reálných funkcí u a v,

$$\left(\frac{u}{v}\right)(t_0) = \frac{D(u(t_0)) \cdot v(t_0) - u(t_0) \cdot D(v(t_0))}{(v(t_0))^2},$$

tedy

$$= \mathcal{C}\left(\exp\left(\frac{-15 \cdot 3}{(3t-5)^2}, \frac{-9\sin(t)(4+\sin(t)) - 9\cos(t) \cdot 3\cos(t)}{(4+3\sin(t))^2},\right.\right.$$

$$\left.\left.\frac{26(t^2-7) - 26t \cdot 2t}{(t^2-7)^2}\right)\right),$$

a výraz upravíme,

$$= \mathcal{C}\left(\exp\left(\frac{-45}{(3t-5)^2}, \frac{-36\sin(t) - 27\sin(t)^2 - 27\cos(t)^2}{(4+3\sin(t))^2}, \frac{-26t^2-182}{(t^2-7)^2}\right)\right) =$$

$$= \mathcal{C}\left(\exp\left(\frac{-45}{(3t-5)^2}, \frac{-36\sin(t) - 27(\sin^2(t)+\cos^2(t))}{(4+3\sin(t))^2}, -\frac{26(t^2+7)}{(t^2-7)^2}\right)\right) =$$

$$= \mathcal{C}\left(\exp\left(\frac{-45}{(3t-5)^2}, \frac{-36\sin(t) - 27}{(4+3\sin(t))^2}, -\frac{26(t^2+7)}{(t^2-7)^2}\right)\right).$$

V předposledním kroce jsme využili toho, že platí rovnost $\sin^2(t) + \cos^2(t) = 1$. $\circ$

Závěr

Cílem mé bakalářské práce bylo představení problematiky diferenciálního počtu funkcí na simplexu (speciálně v případě trojsložkových kompozic, který umožňuje detailní rozepsání vybraných důkazů vět) a názorného vysvětlení teorie na vlastních příkladech. Poprvé jsem se zde setkala s kompozičními daty, které se odlišují od standardních mnohorozměrných dat tím, že pouze relativní informace (podíl mezi složkami) je podstatná při analýze. Nejtěžší pro mě bylo do dané problematiky proniknout a seznámit se s odlišnou geometrií pro tento typ dat. Za velmi přínosnou pro můj další rozvoj považuji dále práci s anglicky psanou literaturou a seznámení se s dvěma programy, typografickým softwarem TEX, ve kterém je má práce vysázena, a statistickým softwarem R, který jsem použila při tvorbě grafů.

Musím konstatovat, že mě daná problematika zaujala a doufám, že se s ní při mém dalším studiu ještě setkám.

Literatura

[1] Aitchison, J., *The statistical analysis of compositional data*, London: Chapman and Hall, 1986.

[2] Filzmoser, P., Hron, K.: Robustness for compositional data. In: Becker, C., Fried, R., Kuhnt, S., eds.: Robustness and complex data structures, Springer, Heidelberg, 2013, 117-131.

[3] Mádrová, V., *Matematická analýza I*, 1. vydání, Univerzita Palackého v Olomouci, Olomouc, 2001.

[4] Pawlowsky-Glahn, V., Buccianti, A., *Compositional data analysis: Theory and applications*, Wiley, Chischester, 2011.

[5] Pawlowsky-Glahn, V., Egozcue, J.J., Tolosana-Delgado, J., *Lecture notes on compositional data analysis*, [online], dostupné z: http://hdl.handle.net/10256/297, [citováno 08. 01. 2010].