$\boxed{\text{Pozitivně (semi)definitní matice}}$

$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ symetrická

- A je <u>pozitivně semidefinitní</u> pokud
$(\forall x \in \mathbb{R}^n)(x^T A x \geq 0)$ [PSD]

- A je <u>pozitivně definitní</u> pokud
$(\forall 0 \neq x \in \mathbb{R}^n)(x^T A x > 0)$ [PD]

(*) Dává smysl i pro ~~nesymetrické~~ čtvercové matice, ale podmínka se redukuje na symetrický případ:

$$x^T A x = \frac{1}{2} x^T A x + \left(\frac{1}{2} x^T A x\right)^T = \frac{1}{2} x^T A x + \frac{1}{2} x^T A^T x =$$

$$x^T \frac{1}{2}(A + A^T) x.$$

Matice $\frac{1}{2}(A + A^T)$ je symetrická.

$\boxed{\text{Pozorování}}$ Pozitivně semidefinitní matice má nezápornou diagonálu, pozitivně definitní matice má kladnou diagonálu.

Důkaz. $e_i = (0 \dots 0 \underset{i}{1} 0 \dots 0)^T$

$$e_i^T A e_i = a_{ii} \geq 0 \quad \boxtimes$$

$\boxed{\text{Věta}}$

(1) A, B jsou PD potom $A+B$ je PD

(2) A je PD a $\alpha > 0$ potom αA je PD

(3) A je PD potom A je regulární a A^{-1} je PD.

$\boxed{\text{Důkaz}}$ (1), (2) z definice

(3) $Ax = 0$ pak $x^T A x = x^T 0 = 0$

Pak nutně $x = 0$ protože A je PD.

$\Rightarrow$ A regulární tedy $\det A \neq 0$ a A^{-1} existuje a je regulární.

Nechť $x \neq 0$:

$x^T A^{-1} x = x^T A^{-1} A A^{-1} x = y^T A y$ pro

$y = A^{-1} x \neq 0$ a tudíž $x^T A^{-1} x > 0$.

$\boxtimes$

<u>Doma</u>: použila se symetrie A?

- Analogie (1), (2) platí i pro PSD matice ale ne (3) protože PSD matice může být singulární (např. 0).

Věta $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symetrická. Pak je ekviv.

(1) A je PD

(2) vlastní čísla A jsou kladná

(3) existuje matice $U \in \mathbb{R}^{n \times n}$ hodnosti n taková, že $A = U^T U$.

[Choleského dekompozice]

Důkaz

(1) $\Rightarrow$ (2) $Ax = \lambda x$, $\|x\|_2 = 1$ $\Rightarrow$

$x^T A x = \lambda x^T x = \lambda$ $\Rightarrow$ $\lambda > 0$.

[λ vlastní číslo, x vlastní vektor]

(2) $\Rightarrow$ (3) A symetrická a tudíž má spektrální rozklad QLQ^T kde L je diagonální matice s prvky $\lambda_1 \dots \lambda_n > 0$.

Definujme matici L' jako diagonální s prvky $\sqrt{\lambda_1}, \dots, \sqrt{\lambda_n} > 0$. Potom hledaná matice je $U = L'Q^T$:

$$U^T U = Q L' L' Q^T = Q L'^2 Q^T = Q L Q^T = A.$$

* U je regulární a má tudíž hodnost n neboť je součinem regulárních matic.

(3) $\Rightarrow$ (1) $x \neq 0$ $\Rightarrow$ $x^T A x = x^T U^T U x = (Ux)^T Ux = \|Ux\|_2^2 > 0$ protože sloupce U jsou lineárně nezávislé. $\boxtimes$

Věta $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symetrická. Je ekviv.

(1) A je PSD

(2) vlastní čísla A jsou nezáporná

(3) existuje matice $U \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $A = U^T U$.

Důkaz podobný jako pro PD. Choleského dekompozice

Příklad Gramova matice $G \in \mathbb{R}^{m \times m}$

$\{w_1, \dots, w_m\}$ je generátor podprostoru U

pak $G_{ij} \overset{def}{=} \langle w_i, w_j \rangle$ [skalární součin]

$$x \in \mathbb{R}^m \Rightarrow x^T G x = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} x_i x_j \langle w_i, w_j \rangle =$$

$$\left\langle \sum_{i=1}^{n} x_i w_i , \sum_{j=1}^{n} x_j w_j \right\rangle \geq 0 .$$

$\{w_1, \dots, w_m\}$ je báze U $\Rightarrow G$ je PD. (Proč?)

Nechť $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je symetrická.

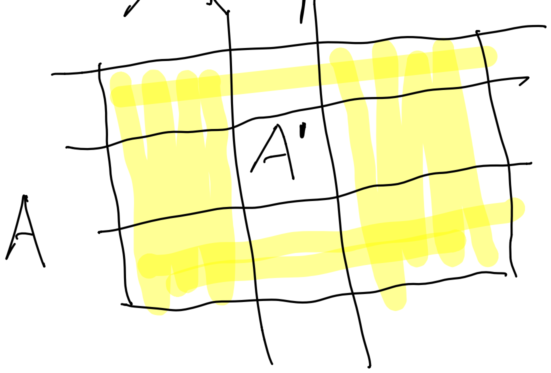
Řekneme že A' je **hlavní podmatice** A jestliže A' vznikne z A odstraněním podmnožiny řádků a sloupců o týmiž indexy. → i prázdné

$\boxed{\text{Lemma}}$

- A je PD právě když každá hlavní podmatice je PD.
- A je PSD právě když každá hlavní podmatice je PSD.

Důkaz. $\Leftarrow$ jasné pro oba případy

$\Rightarrow$ (pro PSD, pro PD stejně)



$x^T A' x = z^T A z$ kde

$$z = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ x \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$\boxtimes$

TESTOVÁNÍ PD

Věta A symetrická $A = \begin{pmatrix} \alpha & a^T \\ a & \tilde{A} \end{pmatrix}$

$\alpha \in \mathbb{R}$, $a \in \mathbb{R}^{n-1}$, $\tilde{A} \in \mathbb{R}^{(n-1)\times(n-1)}$. A je PD

$\iff$

$\alpha > 0$, $\tilde{A} - \frac{1}{\alpha} a a^T$ je PD

Důkaz

$\Rightarrow$: $\alpha = e_1^T A e_1 > 0$. Nechť $\tilde{x} \in \mathbb{R}^{n-1}$, $\tilde{x} \neq 0$:

$\tilde{x}^T (\tilde{A} - 1/\alpha\, a a^T) \tilde{x} =$

$\tilde{x}^T \tilde{A} \tilde{x} - 1/\alpha\, (a^T \tilde{x})^2 =$

$$\begin{pmatrix} -1/\alpha\, a^T \tilde{x} & \tilde{x}^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha & a^T \\ a & \tilde{A} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1/\alpha\, a^T \tilde{x} \\ \tilde{x} \end{pmatrix} > 0.$$

$\Leftarrow$: $x = \begin{pmatrix} \beta \\ \tilde{x} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n$. Potom

$$x^T A x = \begin{pmatrix} \beta & \tilde{x}^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha & a^T \\ a & \tilde{A} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta \\ \tilde{x} \end{pmatrix} = \alpha \beta^2 + 2\beta a^T \tilde{x} + \tilde{x}^T \tilde{A} \tilde{x}$$

$$= \tilde{x}^T \left(\tilde{A} - \frac{1}{\alpha} a a^T\right) \tilde{x} + \left(\sqrt{\alpha}\,\beta + \frac{1}{\sqrt{\alpha}} a^T \tilde{x}\right)^2 \geq 0$$

a rovnost jen pro $\tilde{x} = 0$ a $\beta = 0$. $\boxtimes$

TESTOVÁNÍ PSD

Věta A symetrická $A = \begin{pmatrix} \alpha & a^T \\ a & \tilde{A} \end{pmatrix}$

$\alpha \in \mathbb{R}$, $a \in \mathbb{R}^{n-1}$, $\tilde{A} \in \mathbb{R}^{(n-1)\times(n-1)}$. $\tilde{A}$ je PSD

$\iff$

(1) $\alpha > 0$, $\tilde{A} - \frac{1}{\alpha} a a^T$ je PSD nebo

(2) $\alpha = 0$, $a = 0$ a $\tilde{A}$ je PSD.

Důkaz

Jestli $\alpha > 0$ postupujme stejně jako v předchozím důkaze.

Nechť $\alpha = 0$.

$\Rightarrow$: z lemma dostaneme že $a = 0$ protože matice 2×2 tvaru

$$\begin{pmatrix} 0 & a \\ a & a \end{pmatrix} \text{ pro } 0 \neq a \in \mathbb{R} \text{ není PSD.}$$

Tudíž: $\tilde{A}$ je PSD.

$\Leftarrow$: z definice protože předp. že

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \tilde{A} & \\ 0 & & & \end{pmatrix}.$$

$\boxtimes$

Tyto věty dávají

Polynomiální rekurzivní

algoritmus na testování

PD, PSD.

Příklad

$$A = \begin{pmatrix} 4 & -2 & 4 \\ -2 & 10 & 1 \\ 4 & 1 & 6 \end{pmatrix} \qquad \begin{array}{l} \alpha = 4 \\ a^T = (-2\ 4) \\ \tilde{A} = \begin{pmatrix} 10 & 1 \\ 1 & 6 \end{pmatrix} \end{array}$$

$$\tilde{A} - \frac{1}{\alpha} a a^T = \begin{pmatrix} 10 & 1 \\ 1 & 6 \end{pmatrix} - 1/4 \begin{pmatrix} -2 \\ 4 \end{pmatrix} (-2\ 4) = \begin{pmatrix} 9 & 3 \\ 3 & 2 \end{pmatrix}$$

V další iteraci dostaneme matici 1×1.

Stejně rekurzivně se dostane i

Choleského dekompozice pro PD a PSD.

POZOR! Lze najít jen APROXIMACI

už pro $n = 1$: $\sqrt{2}$ "neznáme" přesně.

Explicitní Choleského Dekompozice

Věta $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ PD. Potom $A = LL^T$ kde L je dolní trojúhelníková s kladnou diagonálou a pro $A = \begin{pmatrix} \alpha & a^T \\ a & \tilde{A} \end{pmatrix}$ je

$$L = \begin{pmatrix} \sqrt{\alpha} & o^T \\ \frac{1}{\sqrt{\alpha}} a & \tilde{L} \end{pmatrix}$$

kde rekurzivně $\tilde{L}$ je rozkladová matice pro PD matici $\tilde{A} - \frac{1}{\alpha} a a^T$.

Věta $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ PSD. Potom $A = LL^T$ kde L je dolní trojúhelníková s nezápornou diagonálou.

- Pro $A = \begin{pmatrix} \alpha & a^T \\ a & \tilde{A} \end{pmatrix}$ je

$$L = \begin{pmatrix} \sqrt{\alpha} & o^T \\ \frac{1}{\sqrt{\alpha}} a & \tilde{L} \end{pmatrix}$$

kde rekurzivně $\tilde{L}$ je rozkladová matice pro PSD matici $\tilde{A} - \frac{1}{\alpha} a a^T$.

- Pro $A = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \tilde{A} \end{pmatrix}$ je $L = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \tilde{L} \end{pmatrix}$ kde $\tilde{L}$ je rozkladová matice pro PSD matici $\tilde{A}$.

$\boxed{\text{FAKT}}$ Choleského rozklad PD matic je jednoznačný; to nutně neplatí pro PSD matice.

$\boxed{\text{Pozorování}}$ (předchozí věta a Gaussova Elim)

$$A = \begin{pmatrix} \alpha & a^T \\ a & \tilde{A} \end{pmatrix},$$ $\alpha > 0$ a provedeme jeden krok GA

Dostaneme matici

$$\begin{pmatrix} \alpha & a^T \\ 0 & \tilde{A} - \frac{1}{\alpha} a a^T \end{pmatrix}$$ To vede k:

$\boxed{\text{Věta}^*}$ A symetrická je PD právě tehdy když ji Gaussova Eliminace (GE) převede do odstupňovaného tvaru s kladnou diagonálou za použití jediného typu el. úpravy: přičtení násobku řádku s pivotem k jinému řádku pod ním.

<u>Důkaz</u>. $\Rightarrow$: úvaha nad větou

$\Leftarrow$: nechť GA funguje jak popsáno. Nejprve dostaneme (po 1. kroku GE) tvar

$$\begin{pmatrix} \alpha & a^T \\ 0 & \tilde{A} - \frac{1}{\alpha} a a^T \end{pmatrix}, \quad \alpha > 0.$$

Indukcí můžeme předpokládat, že matice $\tilde{A} - \frac{1}{\alpha} a a^T$ je PD. A tudíž A je PD. $\boxtimes$

$\boxed{\text{Příklad}}$ $A =$

$$\begin{pmatrix} 4 & -2 & 4 \\ -2 & 10 & 1 \\ 4 & 1 & 6 \end{pmatrix} \overset{GE}{\sim} \begin{pmatrix} 4 & -2 & 4 \\ 0 & 9 & 3 \\ 0 & 3 & 2 \end{pmatrix} \overset{GE}{\sim} \begin{pmatrix} 4 & -2 & 4 \\ 0 & 9 & 3 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Prvky na diagonále kladné a tak A je PD.

<u>Věta</u> (Sylvestrovo kriterium PD)

Symetrická $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je PD právě tehdy když $(\forall i = 1, \dots, n)(\det A_i > 0)$ kde A_i vznikne vynecháním posledních $(n-i)$ řádků a sloupců.

Důkaz.

$\Rightarrow$: každá A_i je PD podle lemma.
Tudíž každá A_i má kladná vlastní čísla a tudíž součin vlastních čísel = det je kladný.

$\Leftarrow$: Během Gaussovy eliminace matice A jsou všechny pivoty kladné, neboť pokud je i-tý pivot nekladný, je $\det(A_i) \leq 0$. Tudíž podle věty * je A PD.

Věta (Sylvestrovo kriterium PSD)

Symetrická $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je PSD právě když determinanty všech hlavních podmatic jsou nezáporné.

Důkaz $\Rightarrow$ z lemma a faktu že det je součin vlastních čísel.

$\Leftarrow$ indukcí dle n; $n=1$ jasné.

$\boxed{(n-1) \to n}$ (sporem)

Nechť $\lambda < 0$ je vlastní číslo A a x je vlastní vektor λ splňující $\|x\|_2 = 1$.
Jsou-li ostatní vlastní čísla kladná, je $\det A < 0$ ... $\boxed{\text{spor}}$

Tudíž nechť $\lambda \leq 0$ je dalším vlastním číslem A a nechť y, $\|y\|_2 = 1$ je jeho vlastní vektor.

Nyní nalezneme $\Delta \in \mathbb{R}$ tak že

$z := x + \Delta y$ má aspoň 1 složku 0, nechť je to složka i.

Protože $x \perp y$

máme:

$z^T A z = (x + \Delta y)^T A (x + \Delta y) =$

$(x+\Delta y)^T(Ax+\Delta Ay) =$

$(x+\Delta y)^T(\lambda x+\Delta \alpha y) =$

$\lambda x^T x + \Delta^2 \alpha y^T y = \lambda + \Delta^2 \alpha < 0.$

Nechť A' vznikne z A odstraněním i-tého řádku a sloupce, a z' vznikne ze z odstraněním i-té složky. Potom

$z'^T A' z' = z^T A z < 0$, tudíž hlavní podmatice A není PSD.

Tudíž dle indukčního předpokladu má nějaká její hlavní podmatice záporný determinant a tudíž i nějaká hlavní podmatice A má záporný determinant. To je spor.

$\boxtimes$

APLIKACE

Věta (Skalární součin a PD)

Operace $\langle x, y \rangle$ je skalárním součinem v $\mathbb{R}^n$ právě když má tvar $\langle x, y \rangle = x^T A y$ pro nějakou pozitivně definitní matici $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

Důkaz

$\Rightarrow$: Definujme $A = (a_{ij})$ předpisem

$$a_{ij} \overset{\text{def}}{=} \langle e_i, e_j \rangle .$$

A je symetrická.

$$\langle x, y \rangle = \left\langle \sum_{i=1}^{n} x_i e_i, \sum_{j=1}^{n} y_j e_j \right\rangle =$$

$$\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} x_i y_j \langle e_i, e_j \rangle = \sum_{i,j=1}^{n} x_i y_j a_{ij} = x^T A y .$$

Tudíž A musí být PD z definice skalárního součinu.

$\Leftarrow$: z definic. $\boxtimes$

Příklad Je $f : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$

$$f(x, y) = x_1 y_1 - x_1 y_2 - x_2 y_1 + 7 x_2 y_2 + 3 x_2 y_3 + 3 x_3 y_2 + 2 x_3 y_3$$

skalární součin?

Píšeme:

$$f(x,y) = x^T \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 7 & 3 \\ 0 & 3 & 2 \end{pmatrix} y = x^T A y.$$

Teď zbývá přesvědčit se že matice je PD.

Věta (odmocnina matice)

A PDS $\Rightarrow$ existuje B PDS tak že $A = B^2$.

Důkaz Nechť A má spektrální rozklad $A = QLQ^T$ kde $L = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$. Definujme diagonální matici $L' = \mathrm{diag}(\sqrt{\lambda_1}, \ldots, \sqrt{\lambda_n})$ a nechť $B \stackrel{def}{=} QL'Q^T$.

Potom $B^2 = QL'Q^TQL'Q^T = QL'^2Q^T = QLQ^T = A$. $\boxtimes$

PSD a optimalizace

PSD matice jsou proměnné ve velmi úspěšném zobecnění lineárního programování: $\boxed{\text{Semidefinitní Programování}}$ častý základ aproximačních algoritmů.

Semidefinitní Programování učíme s Milanem Hladíkem v navazujících přednáškách (např. Úvod do nelineární optimalizace). Zde uvedu jen příklad (nezkouší se)

SDP formulace problému MAX CUT

$G=(V,E)$ graf, $E' \subseteq E$ je $\boxed{\text{řez}}$ jestli existuje $V' \subseteq V$ tak že

$$E' = \{ e \in E ; \ |e \cap V'| = 1 \}.$$

$\boxed{\text{MAX-CUT}}$ Najdi maximální velikost řezu.

Základní NP-úplný problém.

Nechť $V = \{1, \dots, n\}$. MAX-CUT lze zapsat:

$$OPT(G) = \max \sum_{\{i,j\} \in E} \frac{1 - z_i z_j}{2}, \quad z_i \in \{1,-1\}$$

(1) Relaxace pomocí vektorového programování

$$V(G) = \max \sum_{\{i,j\} \in E} \frac{1 - u_i^T u_j}{2}, \quad u_i \in S^{n-1} = \{x \in \mathbb{R}^n ; \|x\| = 1\}.$$

• $V(G) \geq OPT(G)$ $[x \in \{1,-1\} \longrightarrow (0 \dots 0\, x)]$

(2) Let $x_{ij} := u_i^T u_j$

SDP formulace ekvivalentní to $V(G)$

$$\max \sum_{\{i,j\} \in E} \frac{1 - x_{ij}}{2} \;;\; x_{ii} \overset{i=1,\dots,n}{=} 1 \text{ a } X \text{ je PSD.} \quad [X \succcurlyeq 0].$$

Z teorie SDP plyne že můžeme najít (polynomiálně) PSD matici X^*:

$$\sum_{\{i,j\} \in E} \frac{1 - x^*_{ij}}{2} \geq V(G) - \varepsilon \text{ pro každé } \varepsilon.$$

Pro X^* můžeme aproximovat Choleského faktorizaci $X^* \doteq U^T U$.

Sloupce matice U aproximují optimální řešení $V(G)$.

Nakonec musíme sloupce U zaokrouhlit na 1 nebo −1 abychom dostali aproximační řešení MAX CUT problému.