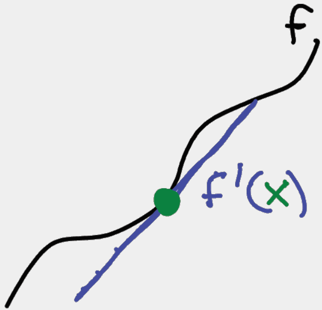
Lineární algebra pro pokročilé

Martin Černý, Peter Zeman

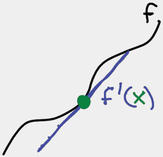
kam.mff.cuni.cz/∼cerny
cerny@kam.mff.cuni.cz

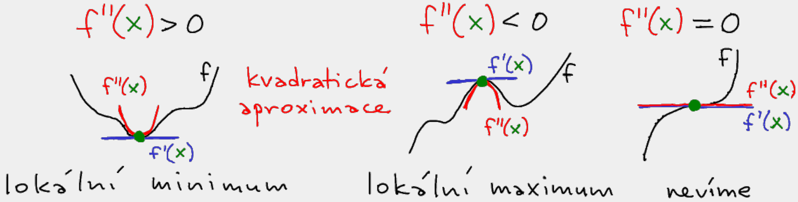
May 9, 2022

Pozitivně definitní matice: extrémy a energie

- Jak hledat extrémy funkcí?
  - potřebné pro pochopení chování funkce, optimalizační úlohy
- Aproximací pomocí polynomů
  - místo funkce zvolíme speciální polynom
  - nejlepší lokální aproximace
- 

Motivace

- 

- Kandidáti na extrém: body $\mathbf{x}$ s $f'(\mathbf{x}) = 0$
  - lineární funkce má extrém pokud je konstantní
- ověříme kandidáty pomocí kvadratických aproximací
- 

- v posledním případě můžeme derivovat dále a dozvědět se více

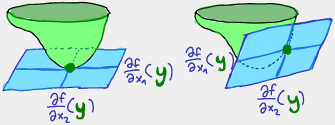
Proč to funguje

- derivace $\sim$ nejlepší lokální aproximace pomocí polynomu
- **Taylorův polynom**
- $T_f(\mathbf{x}) = f(0) + f'(0)\mathbf{x} + \frac{f''(0)}{2!}\mathbf{x}^2 + \frac{f^{(3)}(0)}{3!}\mathbf{x}^3 + \dots$
  - lokálně převládne první nenulový člen $\frac{f^{(k)}(0)}{k!}\mathbf{x}^k$

1. k liché ... inflexní bod
2. k sudé ... extrém

Funkce více proměnných $f(x_1, \ldots, x_n)$

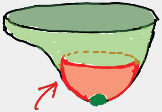
- stejná myšlenka
  - parciální derivace $\frac{\delta f}{\delta x_i}(\mathbf{y})$



- kandidát není extrém
- Kandidáti na extrém: body $\mathbf{y} : \frac{\delta f}{\delta x_1}(\mathbf{y}) = 0, \ldots, \frac{\delta f}{\delta x_n}(\mathbf{y}) = 0$

Funkce více proměnných $f(x_1, \dots, x_n)$

- stejná myšlenka
  - parciální derivace $\frac{\delta f}{\delta x_i}(\mathbf{y})$
- Kandidáti na extrém: body $\mathbf{y}$: $\frac{\delta f}{\delta x_1}(\mathbf{y}) = 0, \dots, \frac{\delta f}{\delta x_n}(\mathbf{y}) = 0$
- tečný kvadratický polynom $P(\mathbf{x})$

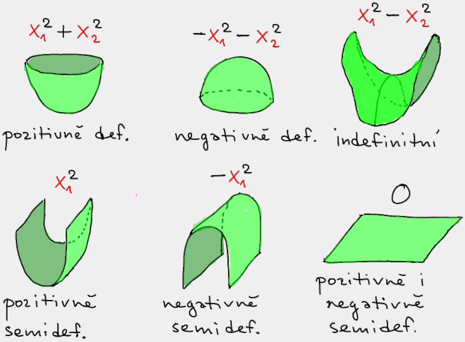


lokální kvadratická aproximace

-
- $P(\mathbf{x}) = P(x_1, \dots, x_n) = \sum_{i,j} \frac{\delta^2 f(\mathbf{y})}{\delta x_i \delta x_j} x_i x_j = \sum_{i} \frac{\delta^2(\mathbf{y})}{\delta x_i^2} x_i{}^2 + 2 \sum_{i<j} \frac{\delta^2 f(\mathbf{y})}{\delta x_i \delta x_j} x_i x_j$
  - $\frac{\delta^2(\mathbf{y})}{\delta x_i^2} x_i{}^2, \frac{\delta^2 f(\mathbf{y})}{\delta x_i \delta x_j}$ ... koeficienty $P(\mathbf{x})$
- **Zajímají nás lokální i globální chování** $P(\mathbf{x})$

1. $\forall \mathbf{x} : P(\mathbf{x}) > 0$ ... ***positivně definitní***
   - lokální minimum
2. $\forall \mathbf{x} : P(\mathbf{x}) < 0$ ... ***negativně definitní***
   - lokální maximum
3. $\forall \mathbf{x} : P(\mathbf{x}) \geq 0$ ... ***positivně semidefinitní***
   - nevíme, potřeba aproximace vyšších řádů
4. $\forall \mathbf{x} : P(\mathbf{x}) \leq 0$ ... ***negativně semidefinitní***
   - nevíme, potřeba aproximace vyšších řádů
5. $\exists \mathbf{x}, \exists \mathbf{y} : P(\mathbf{x}) < 0, P(\mathbf{y}) > 0$ ... ***indefinitní***
   - není extrém

- existuje 6 typů (*Sylvestrova věta o setrvačnosti*):



-
  - $P(x_1, x_2) = x_1 x_2$ je *sedlo* otočené o $45°$
- **Otázka:** Jak zjistit typ daného polynomu?

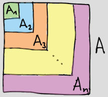
- $P(\mathbf{x}) = P(x_1, \ldots, x_n) = \sum_{i,j} \frac{\delta^2 f(\mathbf{y})}{\delta x_i \delta x_j} x_i x_j = \sum_i \frac{\delta^2(\mathbf{y})}{\delta x_i^2} x_i^2 + 2 \sum_{i<j} \frac{\delta^2 f(\mathbf{y})}{\delta x_i \delta x_j} x_i x_j$
- matice $A : a_{ij} = \frac{\delta^2 f(\mathbf{y})}{\delta x_i \delta x_j}$
- $P(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T A \mathbf{x}$ ... kvadratická forma
- předpokládáme symetrické matice A
- $\implies P(\mathbf{x}) = \sum_i a_{ii} x_i^2 + 2 \sum_{i<j} a_{ij} x_i x_j$

1. A je ***pozitivně definitní*** (SPD), pokud $\mathbf{x}^T A \mathbf{x} > 0 \forall \mathbf{x} \neq 0$
2. A je ***negativně definitní*** (SND), pokud $\mathbf{x}^T A \mathbf{x} < 0 \forall \mathbf{x} \neq 0$
3. A je ***pozitivně semidefinitní*** (PSD), pokud $\mathbf{x}^T A \mathbf{x} \geq 0$
4. A je ***negativně semidefinitní*** (NSD), pokud $\mathbf{x}^T A \mathbf{x} \leq 0$
5. A je ***indefinitní*** (ID), pokud $\exists \mathbf{x}, \mathbf{y} : \mathbf{x}^T A \mathbf{x} < 0$ a $\mathbf{y}^T A \mathbf{y} > 0$

1. A je ***pozitivně definitní*** (SPD), pokud $\mathbf{x}^T A\mathbf{x} > 0 \forall \mathbf{x} \neq 0$
2. A je ***negativně definitní*** (SND), pokud $\mathbf{x}^T A\mathbf{x} < 0 \forall \mathbf{x} \neq 0$
3. A je ***pozitivně semidefinitní*** (PSD), pokud $\mathbf{x}^T A\mathbf{x} \geq 0$
4. A je ***negativně semidefinitní*** (NSD), pokud $\mathbf{x}^T A\mathbf{x} \leq 0$
5. A je ***indefinitní*** (ID), pokud $\exists \mathbf{x}, \mathbf{y} : \mathbf{x}^T A\mathbf{x} < 0$ a $\mathbf{y}^T A\mathbf{y} > 0$

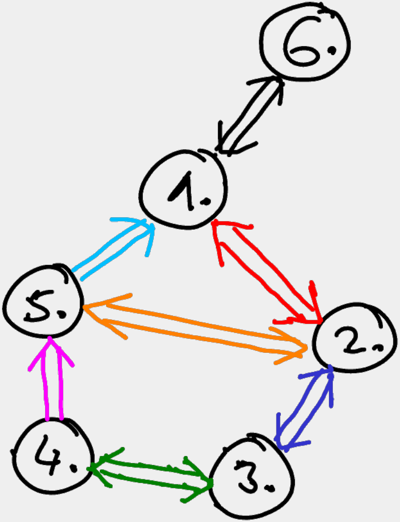
- typ matice lze rozeznat efektivně řadou kritérií
- speciálně se zaměříme na SPD

Charakterizace pozitivní definitnosti

1. $\mathbf{x}^T A \mathbf{x} > 0 \ \forall \mathbf{x} \neq 0$
2. vlastní čísla $\lambda_i > 0$
3. determinanty principiálních minorů jsou kladné: $\det(A_1) > 0, \dots, \det(A_n) > 0$
   - 

   - principiální minor A_k je podmatice $k \times k$ v levém horním rohu
4. Gaussova eliminace lze provést bez *prohazování řádků a násobení* a má všechny *pivoty* $p_i > 0$
5. existuje regulární matice R, že $A = R^T R$
6. $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \mathbf{x}^T A \mathbf{y}$ je skalární součin a $\|\mathbf{x}\| = \sqrt{\mathbf{x}^T A \mathbf{x}}$ je norma

- Dokážeme si co nejvíce směrů:



-

Charakterizace pozitivní definitnosti 1⇒2

1. $\mathbf{x}^T A\mathbf{x} > 0 \ \forall \mathbf{x} \neq 0$
2. vlastní čísla $\lambda_i > 0$

Důkaz:

- ze symetrie jsou všechna vlastní čísla reálná
- $A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$
- $\lambda = \frac{\mathbf{x}^T A\mathbf{x}}{\mathbf{x}^T\mathbf{x}}$
  - $\mathbf{x}^T A\mathbf{x} > 0$ ... A je SPD
  - $\mathbf{x}^T\mathbf{x} = \|\mathbf{x}\|^2 > 0$
- $\lambda > 0$

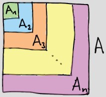
Charakterizace pozitivní definitnosti 1$\Leftarrow$2

1. $\mathbf{x}^T A\mathbf{x} > 0 \; \forall \mathbf{x} \neq 0$
2. vlastní čísla $\lambda_i > 0$

Důkaz:

- ze symetrie spektrální rozklad $A = Q\Lambda Q^T$
  - $\mathbf{q}_1, \ldots, \mathbf{q}_n$ ... ortogonální báze z vlastních vektorů
- $\mathbf{x} = \sum \alpha_i \mathbf{q}_i$
- $\mathbf{x}^T A\mathbf{x} = (\sum \alpha_i \mathbf{q}_i)^T A(\sum \alpha_i \mathbf{q}_i) =$
- $= \sum\limits_{i,j} \alpha_i \alpha_j {\mathbf{q}_i}^T A\mathbf{q}_j = \sum_{i,j} \lambda_j \alpha_i \alpha_j {\mathbf{q}_i}^T \mathbf{q}_j =$
- $= \sum\limits_{i} \lambda_i \alpha_i^2 {\mathbf{q}_i}^T \mathbf{q}_j = \sum\limits_{i} \lambda_i \alpha_i^2 > 0$

Charakterizace pozitivní definitnosti 2 $\iff$ 3

2. vlastní čísla $\lambda_i > 0$
3. determinanty principiálních minorů jsou kladné: $\det(A_1) > 0, \ldots, \det(A_n) > 0$
   - 

   - principiální minor A_k je podmatice $k \times k$ v levém horním rohu

Důkaz:

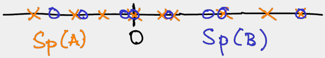
- pomůžeme si tvrzením o proplétání vlastní čísel

O proplétání vlastních čísel

Nechť A je symetrická a B vznikne z A vyškrtnutím i-tého řádku a sloupce. Nechť $\lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_n$ jsou vlastní čísla A a $\sigma_1 \geq \cdots \geq \sigma_{n-1}$ vlastní čísla B. Potom

$$\lambda_1 \geq \sigma_1 \geq \lambda_2 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \lambda_{n-1} \geq \sigma_{n-1} \geq \lambda_n.$$

$\lambda_i \geq \sigma_i \geq \lambda_{i+1}.$

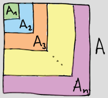


- ■

Důkaz:

- příští cvičení

Charakterizace pozitivní definitnosti 2⇒3

2. vlastní čísla $\lambda_i > 0$
3. determinanty principiálních minorů jsou kladné:
   $\det(A_1) > 0, \ldots, \det(A_n) > 0$
   - 

   - principiální minor A_k je podmatice $k \times k$ v levém horním rohu

Důkaz:

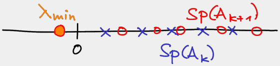
- podle věty o proplétání jsou vlastní čísla všech minorů A_k mezi λ_1 a λ_n, tedy kladná
- $\det(A_k) > 0$

Charakterizace pozitivní definitnosti 2$\Leftarrow$3

Charakterizace pozitivní definitnosti 2$\Leftarrow$3

2. vlastní čísla $\lambda_i > 0$
3. determinanty principiálních minorů jsou kladné:
   $\det(A_1) > 0, \ldots, \det(A_n) > 0$
   - principiální minor A_k je podmatice $k \times k$ v levém horním rohu

Důkaz:

- indukcí podle A_k
- $\det(A_1) > 0 \implies$ vlastní číslo A_1 je kladné
- A_k má vlastní čísla kladné
- $\overset{\text{proplétání}}{\implies}$ A_{k+1} má max jedno vlastní číslo λ_{min} záporné
- 

- potom $\det(A_{k+1}) > 0 \implies \lambda_{min} > 0$

Charakterizace pozitivní definitnosti 3⇒4

3. determinanty principiálních minorů jsou kladné: $\det(A_1) > 0, \ldots, \det(A_n) > 0$
   - principiální minor A_k je podmatice $k \times k$ v levém horním rohu
4. Gaussova eliminace lze provést bez *prohazování řádků a násobení* a má všechny *pivoty* $p_i > 0$

Důkaz:

- $\det(A_k) > 0 \implies A_k$ je regulární
- lze provést GE bez prohazování řádků
- úpravy nemění determinant: $\det(A_k) = \prod_{i=1}^{k} p_i$
- proto $p_k = \frac{\det(A_k)}{\det(A_{k-1})} > 0$

Charakterizace pozitivní definitnosti 3$\Leftarrow$4

3. determinanty principiálních minorů jsou kladné: $\det(A_1) > 0, \dots, \det(A_n) > 0$
   - principiální minor A_k je podmatice $k \times k$ v levém horním rohu
4. Gaussova eliminace lze provést bez *prohazování řádků a násobení* a má všechny *pivoty* $p_i > 0$

Důkaz:

- G-E nemění determinant žádné podmatice A_k
- $\implies \det(A_k) = \prod_{i=1}^{k} p_i > 0$

Charakterizace pozitivní definitnosti 4⇒5

4. Gaussova eliminace lze provést bez *prohazování řádků a násobení* a má všechny *pivoty* $p_i > 0$
5. existuje regulární matice R, že $A = R^T R$

Důkaz:

- ukážeme pomocí LDU dekompozice
- $A = LDU = U^T DU$
  - L ... matice úprav
  - D ... diagonální matice s p_i na diagonále
  - druhá rovnost ze symetrie A
- Potřebujeme *rozdělit* D
- $\exists \sqrt{D}$ s diagonálou $\sqrt{p_i}$
- $R = \sqrt{D}U$
- $A = R^T R$

Charakterizace pozitivní definitnosti $1 \Leftarrow 5$

1. $\mathbf{x}^T A \mathbf{x} > 0 \; \forall \mathbf{x} > 0$
5. existuje regulární matice R, že $A = R^T R$

Důkaz:

- dosazení $R^T R$ za A
- $\mathbf{x}^T A \mathbf{x} = \mathbf{x}^T R^T R \mathbf{x} = (R\mathbf{x})^T (R\mathbf{x}) = \|R\mathbf{x}\|^2 = \|\mathbf{s}\|_A > 0$
- **Poznámka:** Kvadratická forma s pozitivně definitní maticí určuje čtverec nějaké normy

Charakterizace pozitivní definitnosti 2⇒5

2. vlastní čísla $\lambda_i > 0$
5. existuje regulární matice R, že $A = R^T R$

Důkaz:

- uvažujme spektrální rozklad $A = Q\Lambda Q^T$
- Λ má kladnou diagonálu
- $R = \sqrt{\Lambda} Q^T$
  - $\sqrt{\Lambda}$ s diagonálou $\sqrt{\lambda_1}, \ldots, \sqrt{\lambda_n}$

Charakterizace pozitivní definitnosti 2$\Leftarrow$5

2. vlastní čísla $\lambda_i > 0$
5. existuje regulární matice R, že $A = R^T R$

Důkaz:

- $A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$
- $\lambda = \frac{\mathbf{x}^T A\mathbf{x}}{\mathbf{x}^T\mathbf{x}} = \frac{\|R\mathbf{x}\|^2}{\|\mathbf{x}\|^2} = \frac{\|\mathbf{x}\|_A^2}{\|\mathbf{x}\|^2} > 0$
    - podíl čtverců norem

1. propojují celou lineární algebru
   - díky speciálním vlastnostem
   - řada problémů jednodušší: $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, $A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$
2. Statistika
   - *Kovarianční matice* jsou pozitivně definitní
   - popisují lineární závislost veličin
   - ve fyzice k modelování energie

Důležitost pozitivně definitiních matic

1. propojují celou lineární algebru
   - díky speciálním vlastnostem
   - řada problémů jednodušší: $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, $A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$
2. Statistika
   - *Kovarianční matice* jsou pozitivně definitní
   - popisují lineární závislost veličin
   - ve fyzice k modelování energie

3. Metody optimalizace a řešení soustav

Nechť A je pozitivně definitní. Potom $\mathbf{x}$ minimalizuje $\mathbf{x}^T A\mathbf{x} - \mathbf{x}^T\mathbf{b} \iff$ je řešením $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$.