

Optimalizace

7. Spektrální rozklad

Tomáš Kroupa Tomáš Werner

2022 LS

Fakulta elektrotechnická
ČVUT v Praze

Vlastní čísla a vlastní vektory

Nechť pro matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, nenulový vektor $\mathbf{v} \in \mathbb{C}^n$ a $\lambda \in \mathbb{C}$ platí

$$\mathbf{A}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}.$$

Pak λ je **vlastní číslo** matice \mathbf{A} a \mathbf{v} je **vlastní vektor** příslušný λ .

λ je vlastní číslo

$$\det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}) = 0$$

\mathbf{v} je vlastní vektor

$$\mathbf{v} \in \text{null}(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})$$

Diagonalizovatelné matice

Definujme

$$\mathbf{\Lambda} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n) \quad \text{a} \quad \mathbf{V} = [\mathbf{v}_1 \dots \mathbf{v}_n].$$

- Platí $\mathbf{AV} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}$.
- Matice \mathbf{A} je **diagonalizovatelná** pokud je \mathbf{V} regulární.

Spektrální rozklad

Pro diagonalizovatelnou matici \mathbf{A} platí

$$\mathbf{A} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^{-1} \quad \text{a} \quad \mathbf{\Lambda} = \mathbf{V}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{V}.$$

Spektrální rozklad symetrické matice

Věta

Pro matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ jsou následující tvrzení ekvivalentní:

- \mathbf{A} je symetrická.
- Každé vlastní číslo matice \mathbf{A} je reálné a existuje ortonormální množina vlastních vektorů $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n$ matice \mathbf{A} .

Tedy pro reálnou symetrickou matici \mathbf{A} je matice $\mathbf{V} = [\mathbf{v}_1 \dots \mathbf{v}_n]$ dokonce ortogonální a platí

$$\mathbf{A} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^T = \lambda_1 \mathbf{v}_1 \mathbf{v}_1^T + \dots + \lambda_n \mathbf{v}_n \mathbf{v}_n^T.$$

Spektrální rozklad symetrické matice – interpretace (1)

$$\mathbf{A} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^T$$

Interpretace

- Matice \mathbf{V} a \mathbf{V}^T jsou ortogonální
- Matice \mathbf{V} tak vyjadřuje např. rotaci a matice \mathbf{V}^T představuje rotaci v opačném směru

Vektor \mathbf{Ax} tak najdeme pomocí zrotovaného vektoru $\mathbf{V}^T\mathbf{x}$, na který aplikujeme škálování maticí $\mathbf{\Lambda}$ a opačnou rotaci \mathbf{V} :

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^T\mathbf{x}$$

Spektrální rozklad symetrické matice – interpretace (2)

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^n \lambda_i \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i^T$$

Interpretace

- Každý sčítanec $\mathbf{v}_i \mathbf{v}_i^T$ je až na násobek λ_i ortogonální projektor na přímku se směrem \mathbf{v}_i
- Matice \mathbf{A} je tedy vážený součet ortogonálních projektorů na vzájemně kolmé přímky určené směry \mathbf{v}_i

Vektor \mathbf{Ax} tak najdeme jeho vyjádřením v ortonormální bázi $(\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n)$ a škálováním pomocí vlastních čísel $\lambda_1, \dots, \lambda_n$:

$$\mathbf{Ax} = \sum_{i=1}^n \lambda_i (\mathbf{v}_i^T \mathbf{x}) \mathbf{v}_i$$

Jak počítat vlastní čísla?

Základní metoda pro výpočet vlastních čísel matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je

QR algoritmus:

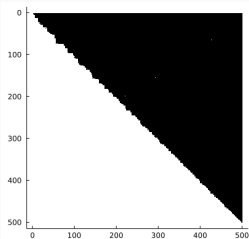
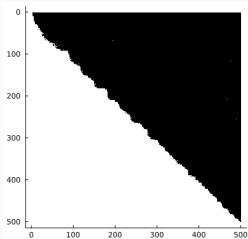
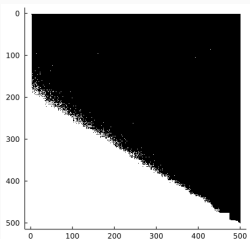
1. $\mathbf{A}_0 := \mathbf{A}$, $i := 0$
2. Dokud není splněna ukončovací podmínka:
 - 2.1 Sestroj QR rozklad, $\mathbf{A}_i = \mathbf{QR}$
 - 2.2 $\mathbf{A}_{i+1} := \mathbf{RQ}$
 - 2.3 $i := i + 1$

Tvrzení

Matice $\mathbf{A}_0, \mathbf{A}_1, \dots$ mají stejné spektrum.

QR algoritmus

- Algoritmus konverguje téměř ve všech případech k blokově horní trojúhelníkové matici s bloky o velikosti 1 a 2
- Ukázka faktorů \mathbf{R} pro náhodnou matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{500 \times 500}$ (iterace 50, 500 a 2000)



Pozitivní semidefinitnost

Matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je **pozitivně semidefinitní**, pokud

$$\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \geq 0 \quad \text{pro každý } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n.$$

Tvrzení

Pro symetrickou matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ jsou tato tvrzení ekvivalentní.

1. \mathbf{A} pozitivně semidefinitní.
2. Vlastní čísla matice \mathbf{A} jsou nezáporná.
3. Existuje matice $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ taková, že $\mathbf{A} = \mathbf{B}^T \mathbf{B}$.
4. Všechny hlavní minory matice \mathbf{A} jsou nezáporné.

Pozitivní definitnost

Matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je **pozitivně definitní**, pokud

$$\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} > 0 \quad \text{pro každý } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \setminus \{\mathbf{0}\}.$$

Tvrzení

Pro symetrickou matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ jsou tato tvrzení ekvivalentní.

1. \mathbf{A} pozitivně definitní.
2. Vlastní čísla matice \mathbf{A} jsou kladná.
3. Existuje regulární matice $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ taková, že $\mathbf{A} = \mathbf{B}^T \mathbf{B}$.
4. Všechny vůdčí hlavní minory matice \mathbf{A} jsou kladné.

Věta

Nechť $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je symetrická. Je-li \mathbf{A} pozitivně semidefinitní, potom existuje horní trojúhelníková matice $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ tak, že

$$\mathbf{A} = \mathbf{R}^T \mathbf{R}.$$

Je-li \mathbf{A} pozitivně definitní, je taková matice \mathbf{R} jediná.

Aplikace pro symetrickou pozitivně definitní matici \mathbf{A} :

- Řešení soustavy $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$
- Invertování matice \mathbf{A}

Matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je

- **negativně semidefinitní**, pokud $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \leq 0$ pro každé $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$,
- **negativně definitní**, pokud $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} < 0$ pro každé $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$,
- **indefinitní**, existuje-li $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ tak, že $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} < 0 < \mathbf{y}^T \mathbf{A} \mathbf{y}$.

Pozorování

\mathbf{A} je negativně definitní, právě když $-\mathbf{A}$ je pozitivně definitní.

Kvadratické formy

Kvadratická forma je homogenní polynom $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ stupně 2,

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} x_i x_j, \quad \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}.$$

Poznámka

Pro každou kvadratickou formu $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ existuje symetrická matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ taková, že $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$.

Definitnost kvadratické formy f odpovídá definitnosti matice \mathbf{A} .

Tvrzení

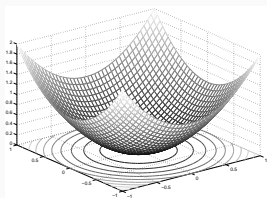
Uvažujme kvadratickou formu $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$, kde $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

- Je-li f pozitivně semidefinitní, pak má f v bodě $\mathbf{0}$ minimum.
- Je-li f pozitivně definitní, pak má f v bodě $\mathbf{0}$ ostré minimum.
- Je-li f indefinitní, pak f nemá minimum ani maximum.

Analogicky pro negativně semidefinitní matice/maximum.

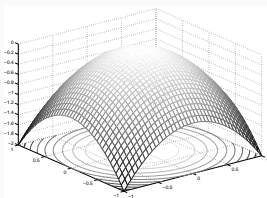
Příklad: kvadratické formy s diagonální maticí pro $n = 2$

$$g(\mathbf{y}) = \mathbf{y}^T \mathbf{\Lambda} \mathbf{y} = \lambda_1 y_1^2 + \dots + \lambda_n y_n^2$$



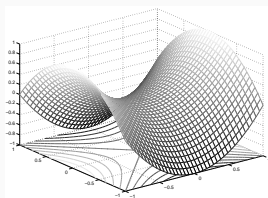
$$g(\mathbf{y}) = y_1^2 + y_2^2$$

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$



$$g(\mathbf{y}) = -y_1^2 - y_2^2$$

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$



$$g(\mathbf{y}) = y_1^2 - y_2^2$$

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Tvrzení

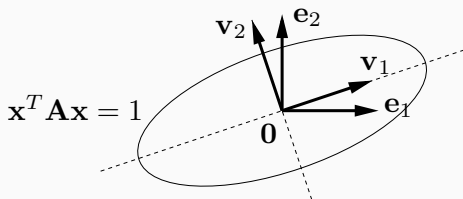
Pro každou kvadratickou formu f se symetrickou maticí \mathbf{A} existuje kvadratická forma g s diagonální maticí $\mathbf{\Lambda}$ tak, že $f(\mathbf{x}) = g(\mathbf{V}^T \mathbf{x})$, kde $\mathbf{A} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^T$ je spektrální rozklad.

- Transformace $\mathbf{x} \mapsto \mathbf{V}^T \mathbf{x}$ je rotace, reflexe nebo jejich složení
- Forma f má jednodušší popis v novém souřadném systému tvořeném ortonomální bází ze sloupců \mathbf{V}

Příklad: vrstevnice kvadratické formy pro $n = 2$

Elipsa

- Vrstevnice výšky 1 kvadratické formy $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$ s pozitivně definitní maticí $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^2$ je potočená elipsa
- Elipsa má osy ve směru vlastních vektorů \mathbf{v}_1 a \mathbf{v}_2
- Délky poloos elipsy jsou $\frac{1}{\sqrt{\lambda_1}}$ a $\frac{1}{\sqrt{\lambda_2}}$



Kvadratická funkce

Kvadratická funkce je polynom $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ druhého stupně,

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c,$$

kde $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je symetrická, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ a $c \in \mathbb{R}$.

Jak nalézt extrémy kvadratické funkce?

Má-li kvadratická funkce extrém, existují $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$ a y_0 takové, že

$$\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c = (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^T \mathbf{A} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + y_0.$$

Potom je f až na posunutí a konstantu kvadratická forma, o typu extrému v bodě \mathbf{x}_0 rozhodneme podle definitnosti matice \mathbf{A} .

Kvadrika je vrstevnice výšky 0 kvadratické funkce, tj. množina

$$\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c = 0\}.$$

Speciální případy

- **Elipsoid** (\mathbf{A} je pozitivně definitní)
- **Kuželosečka** (pro $n = 2$)