Lineární algebra II (pro fyziky)

Pozdní sběr

Dalibor Šmíd

MFF UK

Tato přednáška obsahuje několik užitečných a zajímavých tvrzení, která bychom bývali zvládli formulovat a dokázat už dříve, ale zavedlo by nás to stranou od hlavního výkladu. Může posloužit i jako forma opakování, pokud si v rámci předpřednáškové přípravy připomenete potřebné pojmy. Na programu jsou:

1. Cayley-Hamiltonova věta
2. Vzorec pro determinant exponenciály
3. Pozitivně (semi)definitní matice a Choleského rozklad
4. Současná diagonalizovatelnost komutujících operátorů
5. Geršgorinovy kruhy
6. QR-algoritmus
7. Gaussovské integrály

Dosazením 2×2 matice do jejího charakteristického polynomu získáme pozoruhodnou rovnost ♣:

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}^2 - (a+d)\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} + (ad-bc)\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Věta (Cayley-Hamilton)

Nechť $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ a p_A její char. polynom. Pak $p_A(A) = 0$.

Důkaz.

Nechť $\sigma(A) = \{\lambda_1, \ldots, \lambda_m\}$, $p_A(\lambda) = \pm \prod_{i=1}^m (\lambda - \lambda_i)^{k_i}$, $J = R^{-1}AR = \mathrm{diag}(J_{k_1}, \ldots, J_{k_m})$ Jordanův tvar A, kde J_{k_i} je $k_i \times k_i$ blok obsahující buňky s vlastním číslem λ_i. Platí ♣ $p_A(A) = p_J(A) = Rp_J(J)R^{-1}$. Protože $(J_{k_i} - \lambda_i E)^{k_i} = 0$ ♣,

$$p_J(J) = \pm \prod_{i=1}^m (J - \lambda_i E)^{k_i} = \begin{pmatrix} (J_{k_1} - \lambda_1 E)^{k_1} K & 0 \\ 0 & L \end{pmatrix} = 0,$$

protože i bloky uvnitř matice L obsahují nulový činitel. □

Z Cayley-Hamiltonovy věty plyne, že A^n je LK matic $E, A, \ldots, A^{n-1}$, např. pro 2×2 matice

$$A^2 = (\operatorname{Tr} A)A - (\det A)E$$

Lze odtud např. spočítat rekurentně libovolnou mocninu matice, aniž bychom potřebovali znát její spektrum. Pro A regulární lze takto vyjádřit i inverzní matici, např. pro 2×2

$$A^{-1} = \frac{1}{\det A}((\operatorname{Tr} A)E - A)$$

Další pěkný vzorec, plynoucí z převodu na Jordanův tvar $\clubsuit$ je

$$\det \exp A = e^{\operatorname{Tr} A}$$

Speciálně $\operatorname{Tr} A = 0 \Rightarrow \det \exp A = 1$, neboli $\exp A$ zachovává orientovaný objem.

Pozitivně (semi)definitní matice potkáváme jako matice skalárního součinu, Gramovy matice posloupností vektorů, matice normálních soustav $R^T R\mathbf{x} = R^T\mathbf{b}$ v metodě nejmenších čtverců, coby součást polárního rozkladu, jako souřadnice určitých typů tenzorů (setrvačnosti, malých deformací) i jinde. Co o nich víme nebo snadno vypozorujeme (A reálná symetrická):

- A je pozitivně (semi)definitní $\Leftrightarrow \forall \mathbf{x} : \mathbf{x}^T A\mathbf{x} > 0 \ (\geq 0)$
- A je P(S)D $\Leftrightarrow \forall$ vlastní čísla A jsou kladná (nezáporná)
- Je-li A P(S)D, pak diagonální elementy $a_{ii} \equiv \mathbf{e}_i^T A\mathbf{e}_i$ jsou kladné (nezáporné). Opačná implikace neplatí ♣.
- Je-li A pozitivně definitní, pak z blokové symetrické úpravy

$$\begin{pmatrix} 1 & \mathbf{o}^T \\ -\frac{1}{\alpha}\mathbf{a} & E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha & \mathbf{a}^T \\ \mathbf{a} & \tilde{A} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{\alpha}\mathbf{a}^T \\ \mathbf{o} & E \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & \mathbf{o}^T \\ \mathbf{o} & \tilde{A} - \frac{1}{\alpha}\mathbf{a}\mathbf{a}^T \end{pmatrix}$$

  plyne, že $\alpha > 0$ a $\tilde{A} - \frac{1}{\alpha}\mathbf{a}\mathbf{a}^T$ je pozitivně definitní ♣. Opačná implikace platí, semidefinitní verze tvrzení neplatí ♣.

Věta (Choleského rozklad)

Je-li A pozitivně definitní matice, pak existuje právě jedna dolní trojúhelníková matice L s kladnou diagonálou, pro niž $LL^T = A$.

Důkaz indukcí ♣: z IP $\exists \tilde{L}$ dolní trojúhelníková s kladnou diagonálou, že $\tilde{A} - \frac{1}{\alpha}\mathbf{a}\mathbf{a}^T = \tilde{L}\tilde{L}^T$. Pak $L := \begin{pmatrix} \sqrt{\alpha} & \mathbf{o}^T \\ \frac{1}{\sqrt{\alpha}}\mathbf{a} & \tilde{L} \end{pmatrix}$.

Podobně jako u LU-rozkladu je možné jej využít k řešení soustav rovnic dvoufázovým dosazením $L\mathbf{y} = \mathbf{b}$, $L^T\mathbf{x} = \mathbf{y}$.

Hlavním minorem matice $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ je determinant podmatice vzniklé vynecháním nějaké množiny řádků a stejné množiny sloupců. *Vedoucí hlavní minor* je takový, kdy vynechaná množina je poslední k-tice, $k \in \{0, \ldots, n-1\}$. Z Jacobi-Sylvesterovy věty plyne, že symetrická matice A je pozitivně definitní, právě když má všechny vedoucí hlavní minory kladné. Sylvesterovo kritérium zobecníme i na semidefinitní matice:

VĚTA

Symetrická matice A je pozitivně semidefinitní, právě když jsou všechny její hlavní minory nezáporné.

DŮKAZ.

Je-li A PSD, pak je PSD i každá hlavní podmatice $\clubsuit$.
Předpokládejme, že opačná implikace je dokázána pro matice stupně menšího než n. Nechť $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ PSD není, $\lambda < 0$ je její vlastní číslo a $\mathbf{x}$ příslušný vlastní vektor, $\|\mathbf{x}\| = 1$. Je-li hlavní minor $\det A < 0$, pak jsme skončili, předpokládejme tedy opak. Musí pak existovat ještě další vlastní číslo $\mu \leq 0$ s vlastním vektorem $\mathbf{y}$, $\|\mathbf{y}\| = 1$, $\mathbf{y} \perp \mathbf{x}$. Zvolme α tak, aby nějaká (i-tá) složka $\mathbf{z} := \mathbf{x} + \alpha\mathbf{y}$ byla nulová. Pak

$$\mathbf{z}^T A\mathbf{z} = \mathbf{z}^T(A\mathbf{x} + \alpha A\mathbf{y}) = \lambda\mathbf{x}^T\mathbf{x} + \alpha^2\mu\mathbf{y}^T\mathbf{y} < 0$$

To by znamenalo, že hlavní podmatice A vzniklá vynecháním i-tého řádku a sloupce není PSD. Z indukčního předpokladu pak musí být nějaký hlavní minor této podmatice (a tedy i A) záporný. $\square$

Nechť $\mathbb{A}, \mathbb{B} \in \mathrm{End}(V)$, $\mathbb{A}\mathbb{B} = \mathbb{B}\mathbb{A}$, $\lambda \in \sigma(\mathbb{A})$, $W \leq V$ vlastní podprostor $\mathbb{A}$ příslušný λ. Pak W je invariantní podprostor $\mathbb{A}$ a pro $\mathbf{v} \in W$

$$\mathbb{A}(\mathbb{B}\mathbf{v}) = \mathbb{B}(\mathbb{A}\mathbf{v}) = \mathbb{B}(\lambda\mathbf{v}) = \lambda\mathbb{B}\mathbf{v} \quad \Rightarrow \quad \mathbb{B}\mathbf{v} \in W$$

Zúžený operátor $\mathbb{B}|_W$ má vlastní číslo μ a jemu příslušný vlastní vektor $w \in W$ je společný vlastní vektor komutujících operátorů $\mathbb{A}, \mathbb{B}$. Kdybychom takových vektorů našli $\dim V$, měli bychom bázi, vzhledem k níž jsou oba operátory reprezentovány diagonální maticí. Říkáme pak, že množina $\mathcal{A} = \{\mathbb{A}, \mathbb{B}\}$ je *současně diagonalizovatelná*. Obecně platí

Věta

Nechť $\mathcal{A} \subset \mathrm{End}\, V$ je množina diagonalizovatelných operátorů. Pak $\mathcal{A}$ je současně diagonalizovatelná, právě když každé dva operátory v ní komutují.

Důkaz indukcí ♣ podle $\dim V$. Věta má význam v kvantové mechanice a kdekoli, kde jsou důležité symetrie.

Věta (Geršgorinovy kruhy)
Každé vlastní číslo $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ leží pro nějaké $i \in \{1,\dots,n\}$ v kruhu o středu a_{ii} a poloměru $\sum_{j\neq i}|a_{ij}|$.

Důkaz.
Pro $\lambda \in \sigma(A)$ zvolme $\mathbf{x} \in V_\lambda$ a i tak, že $x_i = 1$ a $\forall j \neq i$, $1 \geq |x_j|$. Pak $((A-\lambda E)\mathbf{x})_i = 0$ dává

$$|\lambda - a_{ii}| = \left|\sum_{j\neq i} a_{ij}x_j\right| \leq \sum_{j\neq i}|a_{ij}||x_j| \leq \sum_{j\neq i}|a_{ij}|$$

□

Matice je *diagonálně dominantní*, pokud $|a_{ii}| > \sum_{j\neq i}|a_{ij}|$. Geršgorinovy kruhy pak neobsahují počátek, tedy A musí být regulární. Další aplikací je odhad chyby a test ukončení iterativních algoritmů pro výpočet vlastních čísel.

Příkladem takového algoritmu je *QR-algoritmus*. Je-li $A =: A_0$ reálná čtvercová matice s QR-rozkladem $A_0 = QR$, definujme

$$A_1 := RQ = Q^T QRQ = Q^T A_0 Q = Q^{-1} A_0 Q$$

Protože A_0 a A_1 jsou podobné, mají stejné spektrum. Pokud je A symetrická, dá se iterací tohoto postupu získat posloupnost, která konverguje k diagonální matici, jejíž diagonální prvky jsou vlastní čísla A. Pro většinu ostatních matic konverguje algoritmus k matici blokově diagonální s bloky velikosti 1 a 2 (ty odpovídají dvojici komplexně sdružených kořenů). Příklad:

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 1 & -1 \\ 1 & 3 & -1 \\ -1 & -1 & 5 \end{pmatrix} \xrightarrow{5 \text{ iterací}} \begin{pmatrix} 5.9940 & 0.0284 & -0.1323 \\ 0.0284 & 2.0002 & -0.0009 \\ -0.1323 & -0.0009 & 3.0058 \end{pmatrix}$$

Tj. $\sigma(A) = \{5.9940 \pm 0.1607, 2.0002 \pm 0.0293, 3.0058 \pm 0.1332\}$

O *Gaussově integrálu* $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx$ je známo, že je roven $\sqrt{\pi}$. Odtud snadno pro $\lambda_1, \ldots, \lambda_n > 0$

$$\int_{\mathbb{R}^n} e^{-\lambda_1 x_1^2 - \ldots - \lambda_n x_n^2} dx_1 \ldots dx_n = \sqrt{\frac{\pi^n}{\lambda_1 \ldots \lambda_n}}$$

Pokud $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je pozitivně definitní symetrická matice a U ortogonální matice, pro kterou $U^T A U = D = \operatorname{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$, pak

$$\int_{\mathbb{R}^n} e^{-\mathbf{x}^T A \mathbf{x}} dx_1 \ldots dx_n = \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\mathbf{x}^T U D U^T \mathbf{x}} dx_1 \ldots dx_n$$

Protože $|\det U| = 1$, substituce $\mathbf{x}' = U^T \mathbf{x}$ zachovává objem, tedy $dx'_1 \ldots dx'_n = dx_1 \ldots dx_n =: d\mathbf{x}$. Protože $\det A = \det D$, dostáváme

$$\int_{\mathbb{R}^n} e^{-\mathbf{x}^T A \mathbf{x}} d\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\mathbf{x}'^T D \mathbf{x}'} d\mathbf{x}' = \sqrt{\frac{\pi^n}{\det A}}$$