ĐẠI HỌC QUỐC GIA TP. HỒ CHÍ MINH TRƯỜNG ĐẠI HỌC KHOA HỌC TỰ NHIỀN KHOA CÔNG NGHỆ THÔNG TIN BỐ MÔN KHOA HOC MÁY TÍNH

THƯƠNG RAYLEIGH - RAYLEIGH QUOTIENT

KHAI THÁC DỮ LIÊU VÀ ỨNG DUNG

Lê Nhựt Nam

Ngày 18 tháng 10 năm 2024

THƯƠNG RAYLEIGH





Ma trận đối xứng

Định nghĩa 1

Ma trận A đ.g.l ma trận đối xứng nếu thỏa mãn

$$\mathbf{A}^{\top} = \mathbf{A}$$
.

(1)

Các tính chất của ma trận đối xứng

Cho trước $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ là ma trân đối xứng, ma trân này có các tính chất sau đây:

- (i) Tất cả các giá tri riêng của chúng đều là số thực
- (ii) Chéo hóa được, tức là tồn tại một ma trận trực giao ${f Q}$ và một ma trận đường chéo ${f \Lambda}$ (hai ma trận này có cùng kích thước với A) sao cho

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q} \mathbf{\Lambda} \mathbf{Q}^{\top} \quad \leftarrow \text{phân rã phổ của } \mathbf{A}$$
 (2)

(đường chéo của Λ là các giá tri riêng của \mathbf{A} và \mathbf{Q} có các vector riêng trực chuẩn theo côt)

Đinh nghĩa dang toàn phương

Định nghĩa 2

Gọi $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ là một ma trận đối xứng. Dạng toàn phương tương ứng với \mathbf{A} là một hàm $Q: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ được định nghĩa

$$Q(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^{\top} \mathbf{A} \mathbf{x}, \quad \text{v\'ei moi } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$$
 (3)

KỸ THUẬT GIẢM CHIỀU DỮ LIÊU

Cách viết đa thức của dạng toàn phương

Nhận xét 1 Một dạng toàn phương là một đa thức với các biến có bậc bằng hai

$$\mathbf{x}^{\top} \mathbf{A} \mathbf{x} = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_i x_j \tag{4}$$

KỸ THUẬT GIẢM CHIỀU DỮ LIỆU

Câu hỏi 1 Cho
$${\bf A}=\begin{pmatrix}1&3\\3&2\end{pmatrix}$$
 và ${\bf x}=\begin{pmatrix}x_1\\x_2\end{pmatrix}$. Viết dạng toàn phương ứng với ma trận ${\bf A}$.

Ví dụ

Trả lời:

$$Q(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^{\top} \mathbf{A} \mathbf{x} = x_1^2 + 2x_2^2 + 6x_1x_2$$

Định nghĩa 3

Một ma trận đối xứng $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ được gọi là bán xác định dương (PSD - positive **semindefinite)** nếu dạng toàn phương tương ứng của nó $Q(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^{\top} \mathbf{A} \mathbf{x} \geq 0$ với mọi $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$.

Định nghĩa 4 Nếu $Q(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^{\top} \mathbf{A} \mathbf{x} > 0$ với mọi $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$, thì \mathbf{A} được gọi là **xác định dương (PD - positive** definite).

Cách xác định ma trân (bán) xác định dương

Định lý 1 Một ma trận là xác định dương (bán xác định dương) khi và chỉ khi tất cả các giá trị riêng của nó không âm.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 5 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{C} = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 3 & 2 \end{pmatrix}$$

Xác định ma trận xác định dương? Bán xác định dương?

Lê Nhưt Nam

Cách xác định ma trân (bán) xác định dương

Định lý 2 Với bất kỳ ma trận hình chữ nhật $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, các ma trận $\mathbf{A}\mathbf{A}^{\top} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ và $\mathbf{A}^{\top}\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ là ma trận vuông, đối xứng và bán xác định dương.

Chứng minh.

Hiển nhiên ta có $\mathbf{A}^{\top}\mathbf{A}$ là ma trân vuông và đối xứng, nên

$$(\mathbf{A}^{\top}\mathbf{A})^{\top} = \mathbf{A}^{\top}(\mathbf{A}^{\top})^{\top} = \mathbf{A}^{\top}\mathbf{A}$$

(5)

Xét dạng toàn phương, với bất kỳ $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$,

$$\mathbf{x}^{\top}(\mathbf{A}^{\top}\mathbf{A})\mathbf{x} = (\mathbf{x}^{\top}\mathbf{A}^{\top})(\mathbf{A}\mathbf{x}) = (\mathbf{A}\mathbf{x})^{\top}(\mathbf{A}\mathbf{x}) = \|\mathbf{A}\mathbf{x}\|^2 \ge 0$$

Bài tập: Thực hiện phần chứng minh cho $\mathbf{A}\mathbf{A}^{\top}$.

KỸ THUẬT GIẢM CHIỀU DỮ LIÊU Lê Nhưt Nam 10 / 32

Căn bậc hai ma trận

Bài toán

Cho ma trận $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ là một ma trận PSD. Tìm một ma trận \mathbf{B} sao cho $\mathbf{A} = \mathbf{B}^2$.

Căn bậc hai ma trận

Bài toán

Cho ma trận $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ là một ma trận PSD. Tìm một ma trận \mathbf{B} sao cho $\mathbf{A} = \mathbf{B}^2$.

Bởi vì ma trận **A** là ma trận đối xứng và PSD, thế nên tồn tại một ma trận trực giao $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ và một ma trận đường chéo $\mathbf{\Lambda} = \operatorname{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ với mọi $\lambda_i \geq 0$ thoả $\mathbf{A} = \mathbf{Q} \mathbf{\Lambda} \mathbf{Q}^{\top}$. Đặt $\mathbf{\Lambda}^{1/2} = \operatorname{diag}(\lambda_1^{1/2}, \dots, \lambda_n^{1/2})$. Rỗ ràng, $\mathbf{\Lambda}^{1/2} \mathbf{\Lambda}^{1/2} = \mathbf{\Lambda}$. Gọi $\mathbf{B} = \mathbf{Q} \mathbf{\Lambda}^{1/2} \mathbf{Q}^{\top}$. Thì

$$\mathbf{B}^2 = (\mathbf{Q} \mathbf{\Lambda}^{1/2} \mathbf{Q}^\top) (\mathbf{Q} \mathbf{\Lambda}^{1/2} \mathbf{Q}^\top) = \mathbf{Q} \underbrace{\mathbf{\Lambda}^{1/2} \mathbf{\Lambda}^{1/2}}_{\mathbf{\Lambda}} \mathbf{Q}^\top = \mathbf{A}.$$

Do đó,

$$\boldsymbol{\mathsf{B}} = \boldsymbol{\mathsf{A}}^{1/2} = \boldsymbol{\mathsf{Q}}\boldsymbol{\mathsf{\Lambda}}^{1/2}\boldsymbol{\mathsf{Q}}^\top$$

Lê Nhựt Nam KỸ THUẬT GIẢM CHIỀU DỮ LIỆU 12 / 32

Ví du

Câu hỏi 3 Cho ma trận ${\bf A}=\begin{pmatrix}1&2\\2&4\end{pmatrix}$. Chứng minh rằng ma trận ${\bf A}$ là ma trận PSD. Tìm ma trận căn bậc hai của ${\bf A}$.

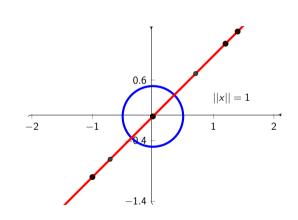
Bài toán (Tối ưu có ràng buộc)

Cho trước một ma trận đối xứng $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, tìm giá trị cực đại của dạng toàn phương trên quả cầu đơn vị trong không gian \mathbb{R}^n :

$$egin{array}{ll} \max_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} & \mathbf{x}^{ op} \mathbf{A} \mathbf{x} \\ s.t & \|\mathbf{x}\|^2 = 1 \end{array}$$

Bài toán (Tối ưu không ràng buộc)

$$\max_{\mathbf{x} \neq \mathbf{0} \in \mathbb{R}^n} \frac{\mathbf{x}^\top \mathbf{A} \mathbf{x}}{\mathbf{x}^\top \mathbf{x}} \leftarrow \text{ scaling invariant }$$



Lê Nhựt Nam KỸ THUẬT GIẢM CHIỀU DỮ LIỆU 14 / 32

Định nghĩa 5 Với một ma trận đối xứng cố định \mathbf{A} , dạng toàn phương chuẩn hóa $\frac{\mathbf{x}^{\top}\mathbf{A}\mathbf{x}}{\mathbf{x}^{\top}\mathbf{x}}$ được gọi là **thương Rayleigh (Rayleigh quotient)**.

Cho trước một ma trận xác định dương **B** co cùng kích thước, định lượng $\frac{\mathbf{x}^{\top} \mathbf{A} \mathbf{x}}{\mathbf{x}^{\top} \mathbf{B} \mathbf{x}}$ được gọi là thương Rayleigh suy rộng (generalized Rayleigh quotient).

Ứng dụng của Thương Rayleigh

(i) **PCA**:

$$\max_{\mathbf{v} \neq \mathbf{0}} \frac{\mathbf{v}^{\top} \mathbf{\Sigma} \mathbf{v}}{\mathbf{v}^{\top} \mathbf{v}}$$

(ii) LDA:

$$\max_{\mathbf{v}\neq\mathbf{0}}\frac{\mathbf{v}^{\top}\mathbf{S}_{b}\mathbf{v}}{\mathbf{v}^{\top}\mathbf{S}_{w}\mathbf{v}}$$

(iii) Spectral clustering:

$$\max_{\mathbf{v}
eq \mathbf{0}} \frac{\mathbf{v}^{\top} \mathsf{L} \mathbf{v}}{\mathbf{v}^{\top} \mathsf{D} \mathbf{v}}$$

Định lý 3 Với bất kỳ ma trận đối xứng $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, ta có:

$$\max_{\mathbf{x} \neq \mathbf{0} \in \mathbb{R}^n} \frac{\mathbf{x}^\top \mathbf{A} \mathbf{x}}{\mathbf{x}^\top \mathbf{x}} = \lambda_{\max} \quad \text{(khi } \mathbf{x} = \text{vector riêng "lớn nhất" của } \mathbf{A}\text{)}$$

$$\min_{\mathbf{x} \neq \mathbf{0} \in \mathbb{R}^n} \frac{\mathbf{x}^\top \mathbf{A} \mathbf{x}}{\mathbf{x}^\top \mathbf{x}} = \lambda_{\min} \quad \text{(khi } \mathbf{x} = \text{vector riêng "nhỏ nhất" của } \mathbf{A}\text{)}$$

Ví du

Câu hỏi 4 Cho ma trận ${\bf A}=\begin{pmatrix}1&2\\2&4\end{pmatrix}$. Tính nghiệm tối ưu và giá trị tối ưu (cực đại và cực tiểu) của thương Rayleigh.

Chứng minh dựa trên tiếp cận đại số tuyến tính

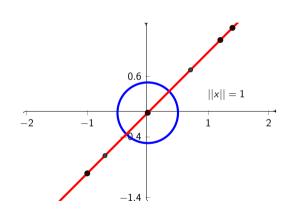
Xét bài toán

$$\max_{\mathbf{x} \neq \mathbf{0} \in \mathbb{R}^n} \frac{\mathbf{x}^\top \mathbf{A} \mathbf{x}}{\mathbf{x}^\top \mathbf{x}}$$

Bởi vì thương Rayleigh bất biến với phép co dãn, nên ta chỉ cần tập trung vào bài toán tối ưu:

$$\max_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \ \mathbf{x}^{\top} \mathbf{A} \mathbf{x} \ \text{s.t.} \ \|\mathbf{x}\|^2 = 1 \Leftrightarrow \max_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n: \|\mathbf{x}\| = 1}$$

 $\mathbf{x}^{\mathsf{T}}\mathbf{A}\mathbf{x}$



Lê Nhưt Nam

Chứng minh

Đặt $\mathbf{A} = \mathbf{Q} \mathbf{\Lambda} \mathbf{Q}^{\top}$ là phân rã phổ của ma trận \mathbf{A} trong đó $\mathbf{Q} = [\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n]$ là ma trận trực giao và $\mathbf{\Lambda} = \operatorname{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ là ma trận đường chéo với đuòng chéo được sắp xếp từ lớn đến bé. Thì với bất kỳ vector đơn vị \mathbf{x} ta có:

$$\mathbf{x}^{\top}\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{x}^{\top}\left(\mathbf{Q}\mathbf{\Lambda}\mathbf{Q}^{\top}\right)\mathbf{x} = \left(\mathbf{x}^{\top}\mathbf{Q}\right)\mathbf{\Lambda}\left(\mathbf{Q}^{\top}\mathbf{x}\right) = \mathbf{y}^{\top}\mathbf{\Lambda}\mathbf{y}$$

trong đó $\mathbf{y} = \mathbf{Q}^{\top}\mathbf{x}$ cũng là một vector đơn vị. Thật vậy:

$$\|\mathbf{y}\|^2 = \mathbf{y}^{\top}\mathbf{y} = \left(\mathbf{Q}^{\top}\mathbf{x}\right)^{\top}\left(\mathbf{Q}^{\top}\mathbf{x}\right) = \mathbf{x}^{\top}\mathbf{Q}\mathbf{Q}^{\top}\mathbf{x} = \mathbf{x}^{\top}\mathbf{x} = 1$$

Thế nên bài toán tối ưu ban đầu có thể được viết lại như sau:

$$\max_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n : \|\mathbf{y}\| = 1} \mathbf{y}^{\top} \underbrace{\mathbf{\Lambda}}_{\text{ma trân đường chéo}} \mathbf{y}$$

Lê Nhựt Nam

Chứng minh

Để giải quyết bài toán, ta viết $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)^{\top}$. Suy ra,

$$\mathbf{y}^{ op} \mathbf{\Lambda} \mathbf{y} = \sum_{i=1}^{n} \underbrace{\lambda_{i}}_{\mathsf{c\acute{o}} \; \mathsf{dinh}} y_{i}^{2} \quad (\mathsf{s.t} \; y_{1}^{2} + y_{2}^{2} + \cdots + y_{n}^{2} = 1)$$

Bởi vì $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$, khi $y_1^2 = 1, y_2^2 = \cdots = y_n^2 = 0$ (i.e., $\mathbf{y} = \pm \mathbf{e}_1$), hàm mục tiêu đạt được giá tri lớn nhất $\mathbf{y}^\top \mathbf{\Lambda} \mathbf{y} = \lambda_1$.

Theo biến gốc x, nghiệm cực đại là

$$\mathbf{x}^* = \mathbf{Q}\mathbf{y}^* = \mathbf{Q}\left(\pm\mathbf{e}_1
ight) = \pm\mathbf{q}_1$$

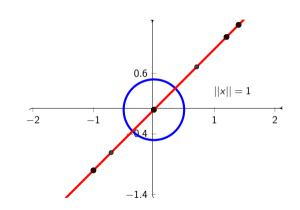
Như vậy, khi $\mathbf{x} = \pm \mathbf{q}_1$ (vector riêng lớn nhất), $\mathbf{x}^{\top} \mathbf{A} \mathbf{x}$ đạt được giá trị lớn nhất λ_1 (giá trị riêng lớn nhất).

Lê Nhựt Nam $K \tilde{Y}$ THUẬT GIẢM CHIỀU DỮ LIỆU 21/32

Chứng minh dựa trên tiếp cận giải tích

Xét bài toán

 $\mathbf{x}^{\mathsf{T}}\mathbf{A}\mathbf{x}$ $\max_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n}$ s.t. $\|\mathbf{x}\|^2 = 1$



Chứng minh

Xây dựng hàm Larangian

$$L(\mathbf{x}, \lambda) = \mathbf{x}^{\top} \mathbf{A} \mathbf{x} - \lambda \left(\|\mathbf{x}\|^2 - 1 \right)$$

Tính đạo hàm riêng
$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}} = \left(\frac{\partial L}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial L}{\partial x_n}\right)^{\top}, \frac{\partial L}{\partial \lambda}$$
 và cho chúng bằng 0 để tìm các điểm ứng viên.

Câu hỏi 5 Làm thế nào để đạo hàm các hàm như $\mathbf{x}^{\top}\mathbf{A}\mathbf{x},\|\mathbf{x}\|^2$ ứng với biến vector \mathbf{x} ?

Nhắc lai: Giải tích ma trận

Mệnh đề 1

Với bất kỳ ma trận đối xứng $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, ma trận hình chữ nhật cố định $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ và một vector cố định $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$, ta có:

$$\begin{split} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \left(\mathbf{a}^{\top} \mathbf{x} \right) &= \mathbf{a}, & \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \left(\| \mathbf{x} \|^2 \right) &= 2 \mathbf{x} \\ \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \left(\mathbf{x}^{\top} \mathbf{A} \mathbf{x} \right) &= 2 \mathbf{A} \mathbf{x}, & \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \left(\| \mathbf{B} \mathbf{x} \|^2 \right) &= 2 \mathbf{B}^{\top} \mathbf{B} \mathbf{x} \end{split}$$

Nhắc lại: Giải tích ma trận - Chứng minh mệnh để

Với hai đẳng thức đầu tiên, chúng có thể được xác minh bằng cách tính toán trực tiếp đạo hàm riêng thứ k. Thất vậy, với mỗi 1 < k < n:

$$\frac{\partial}{\partial x_k} \left(\mathbf{a}^\top \mathbf{x} \right) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\sum a_i x_i \right) = a_k$$

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (\|\mathbf{x}\|^2) = \frac{\partial}{\partial x_k} (\sum x_i^2) = 2x_k$$

Nhắc lại: Giải tích ma trận - Chứng minh mênh đề

Với đẳng thức thứ ba, ta khai triển $\mathbf{x}^{\top} \mathbf{A} \mathbf{x}$, ta có đạo riêng thứ k được tính như sau:

$$\begin{split} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\mathbf{x}^\top \mathbf{A} \mathbf{x} \right) &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\sum_i \sum_j a_{ij} x_i x_j \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\sum_{\substack{j \neq k \\ i = k}} a_{kj} x_k x_j + \sum_{\substack{i \neq k \\ j = k}} a_{ik} x_i x_k + a_{kk} x_k^2 \right) \\ &= \sum_{\substack{j \neq k \\ j = k}} a_{kj} x_j + \sum_{\substack{i \neq k \\ i \neq k}} a_{ik} x_i + 2a_{kk} x_k \\ &= \sum_j a_{kj} x_j + \sum_i x_i a_{ik} \\ &= \mathbf{A}(k,:) \mathbf{x} + \mathbf{x}^\top \mathbf{A}(:,k) = 2\mathbf{A}(k,:) \mathbf{x} \quad (\text{b\'oi vì } \mathbf{A} \text{ là ma trận đối xứng }) \end{split}$$

KỸ THUẬT GIẢM CHIỀU DỮ LIÊU

Nhắc lại: Giải tích ma trận - Chứng minh mênh để

Viết lại trong dạng ma trận, ta có:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \left(\mathbf{x}^{\top} \mathbf{A} \mathbf{x} \right) = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\mathbf{x}^{\top} \mathbf{A} \mathbf{x} \right) \\ \vdots \\ \frac{\partial}{\partial x_n} \left(\mathbf{x}^{\top} \mathbf{A} \mathbf{x} \right) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2\mathbf{A}(1,:)\mathbf{x} \\ \vdots \\ 2\mathbf{A}(n,:)\mathbf{x} \end{bmatrix} = 2\mathbf{A}\mathbf{x}$$

Nhắc lại: Giải tích ma trận - Chứng minh mênh đề

Để chứng minh đẳng thức cuối cùng, ta viết lai như sau:

$$\|\mathbf{B}\mathbf{x}\|^2 = (\mathbf{B}\mathbf{x})^\top(\mathbf{B}\mathbf{x}) = \mathbf{x}^\top \left(\mathbf{B}^\top \mathbf{B}\right)\mathbf{x}$$

Bằng cách áp dung kết quả ở đẳng thức thứ ba, ta suy ra điều phải chứng minh.

Chứng minh

Bằng cách áp dụng kết quả ở Mệnh đề 1, ta có:

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}} = 2\mathbf{A}\mathbf{x} - \lambda(2\mathbf{x}) = 0 \longrightarrow \mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$$
$$\frac{\partial L}{\partial \lambda} = \|\mathbf{x}\|^2 - 1 = 0 \longrightarrow \|\mathbf{x}\|^2 = 1$$

Điều này có nghĩa là \mathbf{x} , λ phải là một cặp trị riêng - vector riêng của ma trận \mathbf{A} . Với bất kỳ nghiệm $\lambda = \lambda_i$, $\mathbf{x} = \mathbf{v}_i$, hàm mục tiêu đạt giá trị:

$$\mathbf{v}_{i}^{\top} \mathbf{A} \mathbf{v}_{i} = \mathbf{v}_{i}^{\top} (\lambda_{i} \mathbf{v}_{i}) = \lambda_{i} \|\mathbf{v}_{i}\|^{2} = \lambda_{i}$$

Do đó, vector riêng \mathbf{v}_1 (ứng với trị riêng lớn nhất λ_1 của ma trận \mathbf{A}) là cực đại toàn cục. Tương tự, vector riêng \mathbf{v}_n ứng với giá trị riêng nhỏ nhất λ_n là cực tiểu toàn cục.

Lê Nhựt Nam KỸ THUẬT GIẨM CHIỀU DỮ LIỆU 29 / 32

Phát biểu

Hệ quả 1

Với một ma trận đối xứng cố định $\bf A$ và một ma trận xác định dương cố định $\bf B$ có cùng kích thước, giá trị cực đại λ của thương Rayleigh suy rộng $\frac{\bf x}{\bf x}^{\top} {\bf B} {\bf x}$ (và tương ứng với biến vector \boldsymbol{v}) thỏa mãn

$$\mathbf{A}\mathbf{v} = \lambda \mathbf{B}\mathbf{v} \quad \Longleftrightarrow \quad \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{v} = \lambda \mathbf{v}$$

Chứng minh dựa trên phương pháp thế ngược

Bởi vì **B** is xác định dương, nên nó có căn bậc hai. Ta đặt $\mathbf{B}^{1/2}$ (ma trận này cũng xác định dương và do đó nó khả nghịch). Gọi $\mathbf{y} = \mathbf{B}^{1/2}\mathbf{x}$. Thì phần mẫu có thể được viết lại như sau:

$$\mathbf{x}^{\top}\mathbf{B}\mathbf{x} = \mathbf{x}^{\top}\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{x} = \mathbf{y}^{\top}\mathbf{y}$$

Thế $\mathbf{x} = (\mathbf{B}^{1/2})^{-1} \mathbf{y} \stackrel{\text{bằng}}{=} \mathbf{B}^{-1/2} \mathbf{y}$ vào tử số và viết lại nó với biến mới \mathbf{y} . Phần chứng minh còn lai xem như bài tâp về nhà.

Chứng minh dựa trên phương pháp nhân tử Larange

Xét bài toán tối ưu thương Rayleigh suy rộng:

$$\max_{\mathbf{x} \neq \mathbf{0}} \frac{\mathbf{x}^{\top} \mathbf{A} \mathbf{x}}{\mathbf{x}^{\top} \mathbf{B}}$$

Bài toán trên tương đương với bài toán tối ưu có ràng buộc sau

$$\max_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \mathbf{x}^{\top} \mathbf{A} \mathbf{x}$$
 subject to $\mathbf{x}^{\top} \mathbf{B} \mathbf{x} = 1$

Ta có hàm Larange như sau:

$$L(\mathbf{x}, \lambda) = \mathbf{x}^{\top} \mathbf{A} \mathbf{x} - \lambda \left(\mathbf{x}^{\top} \mathbf{B} \mathbf{x} - 1 \right)$$

Phần chứng minh còn lại xem như bài tập về nhà.