12. Positivně definitní matice – Choleského rozklad

Cv. 12.1 Otestujte positivní definitnost matice A pomocí Choleského rozkladu.

$$A = \begin{pmatrix} 4 & -2 & 4 \\ -2 & 10 & 1 \\ 4 & 1 & 6 \end{pmatrix}$$

Řešení:

Pro každou positivně definitní matici existuje jediná dolní trojúhelníková matice $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$ s kladnou diagonálou taková, že $A = LL^T$ (Choleského rozklad). K dokázání positivní definitnosti matice A nám tedy stačí nalézt takovou matici L.

Protože je L dolní trojúhelníková matice, víme, že část prvků tvoří nuly.

$$A = \begin{pmatrix} 4 & -2 & 4 \\ -2 & 10 & 1 \\ 4 & 1 & 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bullet & 0 & 0 \\ \bullet & \bullet & 0 \\ \bullet & \bullet & \bullet \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & \bullet & \bullet \\ 0 & 0 & \bullet \end{pmatrix} = LL^T.$$

Určíme nejprve prvek ℓ_{11}. Protože prvek a_{11} je dán maticovým násobením prvního řádku matice L s prvním sloupcem matice L^T (který odpovídá prvnímu řádku), můžeme zapsat $a_{11} = \ell_{11}^2 + \ell_{12}^2 + \ell_{13}^2$. Prvky ℓ_{12}, ℓ_{13} se nicméně rovnají nule, tedy platí $4 = a_{11} = \ell_{11}^2$ a proto $\ell_{11} = 2$ (fakticky máme dvě možnosti: 2 a -2, ale hodnotu 2 volíme proto, že L musí mít kladnou diagonálu).

$$\begin{pmatrix} 4 & -2 & 4 \\ -2 & 10 & 1 \\ 4 & 1 & 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ \bullet & \bullet & 0 \\ \bullet & \bullet & \bullet \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & \bullet & \bullet \\ 0 & \bullet & \bullet \\ 0 & 0 & \bullet \end{pmatrix}.$$

Všimněme si, že když budeme pokračovat v násobení prvního řádku matice L se zbylými sloupci L^T, kvůli nulám v prvním řádku dostáváme rovnici $a_{1k} = (L)_{11}(L^T)_{1k} = 2\ell_{k1}$. Díky té snadno určíme prvky v prvním sloupci matice L jako $\ell_{k1} = \frac{1}{2}a_{1k}$.

$$\begin{pmatrix} 4 & -2 & 4 \\ -2 & 10 & 1 \\ 4 & 1 & 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ -1 & \bullet & 0 \\ 2 & \bullet & \bullet \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 \\ 0 & \bullet & \bullet \\ 0 & 0 & \bullet \end{pmatrix}.$$

Pokračujeme výpočtem ℓ_{22}. Podobně jako při určování předchozího diagonálního prvku, dostáváme vynásobením druhého řádku matice L a druhého sloupce matice L^T rovnici $10 = a_{22} = \ell_{21}^2 + \ell_{22}^2 + \ell_{23}^2 = (-1)^2 + \ell_{22}^2 + 0^2$. Po úpravě dostáváme $l_{22}^2 = 9$ a tedy $\ell_{22} = 3$ kvůli positivitě diagonály.

$$\begin{pmatrix} 4 & -2 & 4 \\ -2 & 10 & 1 \\ 4 & 1 & 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ -1 & 3 & 0 \\ 2 & \bullet & \bullet \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 \\ 0 & 3 & \bullet \\ 0 & 0 & \bullet \end{pmatrix}.$$

Díky tomu, že druhý řádek matice L je kompletní, můžeme dopočítat podobně jako předtím i druhý sloupec L, a to z rovnice $a_{23} = (L)_{2*}(L^T)_{*3}$.

$$\begin{pmatrix} 4 & -2 & 4 \\ -2 & 10 & 1 \\ 4 & 1 & 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ -1 & 3 & 0 \\ 2 & 1 & \bullet \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 \\ 0 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & \bullet \end{pmatrix}.$$

Celý postup opakujeme ještě jednou pro třetí sloupec matice L. Nejprve z rovnice $a_{33} = \ell_{31}^2 + \ell_{32}^2 + \ell_{33}^2$ spočítáme diagonální prvek $\ell_{33} = 1$ a poté i ostatní prvky v třetím sloupci (žádné už nejsou). Dostáváme rozklad

$$A = \begin{pmatrix} 4 & -2 & 4 \\ -2 & 10 & 1 \\ 4 & 1 & 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ -1 & 3 & 0 \\ 2 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 \\ 0 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = LL^T.$$

Matice A je tudíž positivně definitní.

Uvědomme si dále, že jsme v průběhu konstrukce nikdy neměli na vybranou z více možností, jaký prvek pro libovolné ℓ_{ij} zvolit. Jediná situace byla, když jsme určovali diagonální prvky, ale protože diagonála musí být kladná, měli jsme stejně jen jedno řešení. Tedy matice L je skutečně dána jednoznačně.

Cv. 12.2 Nalezněte Choleského rozklad následujících matic, nebo zdůvodněte, že nejsou positivně definitní.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -3 & 2 \\ -3 & 13 & 2 \\ 2 & 2 & 21 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} I_n & I_n \\ I_n & 5I_n \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -3 \\ 2 & 4 & 1 \\ -3 & 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Řešení:

Matice A a B jsou positivně definitní a jejich Choleského rozklad je

$$A = L_A L_A^T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -3 & 2 & 0 \\ 2 & 4 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -3 & 2 \\ 0 & 2 & 4 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$B = L_B L_B^T = \begin{pmatrix} I_n & 0 \\ I_n & 2I_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_n & I_n \\ 0 & 2I_n \end{pmatrix}.$$

Pro matici B jsme postupovali stejným způsobem, jenom místo s čísly jsme pracovali s maticovými bloky.

Matice C naopak není positivně definitní. Nahlédnout to můžeme z toho, že konstrukce Choleského rozkladu selže. Postupujeme až do okamžiku, kdy máme

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -3 \\ 2 & 4 & 1 \\ -3 & 1 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & \bullet & 0 \\ -3 & \bullet & \bullet \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & -3 \\ 0 & \bullet & \bullet \\ 0 & 0 & \bullet \end{pmatrix}.$$

Pro výpočet prvku $(L_C)_{22}$ totiž platí, že $4 = 2 \cdot 2 + (L_C)_{22}^2$, tedy $(L_C)_{22}$ by měl odpovídat hodnotě 0, což není kladná hodnota, jak je požadováno po diagonálních prvcích matice L_C.

Cv. 12.3 Pomocí Choleského rozkladu invertujte matici

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 2 & 5 & -2 \\ -1 & -2 & 2 \end{pmatrix}.$$

Řešení:

Protože matice A je positivně definitní, lze rozložit do tvaru $A = LL^T$. Pro její inverzi tedy platí $A^{-1} = (LL^T)^{-1} = L^{-T}L^{-1}$. Místo počítání inverze přímo tedy můžeme spočítat nejprve Choleského rozklad, následně inverzi dolní trojúhelníkové matice L a na závěr vzniklou inverzi L^{-1} vynásobíme s její transpozicí.

Choleského rozkladem spočítáme

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Potom invertujeme matici L klasickým způsobem:

$$L^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Nakonec vyjádříme hledanou inverzi

$$A^{-1} = (L^{-1})^T L^{-1} = \begin{pmatrix} 6 & -2 & 1 \\ -2 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Cv. 12.4 Pomocí Choleského rozkladu vyřešte soustavu $Ax = b$, kde

$$A = \begin{pmatrix} 4 & -2 & 2 \\ -2 & 2 & -3 \\ 2 & -3 & 6 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 2 \\ -2 \\ 5 \end{pmatrix}.$$

Řešení:

Pokud vyjádříme matici $A = LL^T$ pomocí Choleského rozkladu, můžeme vyřešit soustavu $Ax = b$ ve dvou krocích. Nejprve vyřešíme soustavu $Ly = b$, a následně soustavu $L^T x = y$. Výhodou tohoto postupu je, že matice L a L^T jsou trojúhelníkové, takže pro vyřešení soustav nemusíme provádět Gaussovu eliminaci, ale rovnou provedeme zpětnou resp. dopřednou substituci (u dopředné substituce, tj. v případě matice L, postupujeme od první proměnné po poslední). Dostáváme

$$A = \begin{pmatrix} 4 & -2 & 2 \\ -2 & 2 & -3 \\ 2 & -3 & 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 1 & -2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & -2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = LL^T.$$

Soustava $Ly = b$ je tvaru

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 2 & 0 & 0 & 2 \\ -1 & 1 & 0 & -2 \\ 1 & -2 & 1 & 5 \end{array}\right)$$

a má řešení $y = (1, -1, 2)^T$. Po dosazení do $L^T x = y$ dostáváme soustavu

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 2 & -1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & -2 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \end{array}\right),$$

která má řešení $x = (1, 3, 2)^T$.