11. Positivně definitní matice

Cv. 11.1 Otestujte positivní definitnost matic

$$A = \begin{pmatrix} 4 & -2 & 4 \\ -2 & 10 & 1 \\ 4 & 1 & 6 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -3 \\ 2 & 4 & 1 \\ -3 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

pomocí:

(a) rekuretního vzorce,

(b) Sylvestrova pravidla,

(c) Gaussovy eliminace.

Řešení:

(a) Rekurentní vzorec nám říká, že symetrická matice

$$A = \begin{pmatrix} \alpha & a^T \\ a & \widetilde{A} \end{pmatrix}$$

je positivně definitní právě tehdy, když $\alpha > 0$ a matice $\widetilde{A} - \frac{1}{\alpha} a a^T$ je positivně definitní. Aplikací dostáváme matici menší dimenze

$$\widetilde{A} - \frac{1}{\alpha} a a^T = \begin{pmatrix} 10 & 1 \\ 1 & 6 \end{pmatrix} - \frac{1}{4} \begin{pmatrix} -2 \\ 4 \end{pmatrix} (-2, 4) = \begin{pmatrix} 10 & 1 \\ 1 & 6 \end{pmatrix} - \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 4 & -8 \\ -8 & 16 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9 & 3 \\ 3 & 2 \end{pmatrix}.$$

K určení positivní definitnosti této matice aplikujme vzorec ještě jednou. Dostáváme $2 - \frac{1}{9} 3 \cdot 3^T = 1$. Pro matici v prostoru $\mathbb{R}^{1\times 1}$ víme, že je positivně definitní právě tehdy, když je kladná, což zřejmě hodnota 1 splňuje, matice A je proto positivně definitní.

Pro matici B postupujeme obdobně. Protože prvek $b_{11} = 1 > 0$, vede první krok rekurence na matici

$$\begin{pmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} - \frac{1}{1} \begin{pmatrix} 2 \\ -3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 4 & -6 \\ -6 & 9 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 7 \\ 7 & -7 \end{pmatrix}.$$

Dle rekurentního vzorečku tato matice není positivně definitní (prvek na pozici $(1,1)$ je 0), tedy ani B není positivně definitní.

(b) Stačí nám zkontrolovat, že determinanty všech hlavních vedoucích podmatic jsou kladné. To jsou matice, která vzniknou vyškrtnutím posledních $n - i$ řádků a sloupců pro $i = 1, \dots, n$.
Pro matici A se jedná o podmatice

$$(4), \quad \begin{pmatrix} 4 & -2 \\ -2 & 10 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 4 & -2 & 4 \\ -2 & 10 & 1 \\ 4 & 1 & 6 \end{pmatrix},$$

jejichž determinanty se rovnají hodnotám 4, 36 a 36. Tyto hodnoty jsou kladné, tedy matice A je positivně definitní.

Pro matici B se jedná o podmatice

$$(1)\,, \quad \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 2 & -3 \\ 2 & 4 & 1 \\ -3 & 1 & 2 \end{pmatrix},$$

jejichž determinanty jsou 1, 0, a -49. Hodnoty nejsou kladné, tedy matice B není positivně definitní.

(c) Při provádění Gaussovy eliminace musíme mít na paměti, že máme povolenou pouze operaci přičítání α násobku řádku k řádku pod ním. Důvod najdeme v důkazu příslušného tvrzení, ze kterého je zřejmé, že využíváme vlastnosti rekurentního vzorce.

Pokud u matice A nejprve odečteme příslušné násobky prvního řádku od ostatních a následně násobek druhého od třetího řádku, dostáváme matici

$$\begin{pmatrix} 4 & -2 & 4 \\ 0 & 9 & 3 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Ta má kladnou diagonálu, tedy se jedná o positivně definitní matici.

Postupujeme obdobně pro matici B. Po odečtení příslušného násobku prvního řádku od řádků pod ním dostáváme matici

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & -3 \\ 0 & 0 & 7 \\ 0 & 7 & -7 \end{pmatrix}.$$

Vidíme, že k tomu, abychom dokončili eliminaci potřebujeme prohodit 2. a 3. řádek, matice B tedy není positivně definitní.

Cv. 11.2 Otestujte positivní definitnost následujících matic pomocí vlastních čísel:

(a) $\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$,

(b) $\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$.

Řešení:

Positivní (semi-)definitnost můžeme otestovat na základě znaménka vlastních čísel. Pro výpočet vlastních čísel matice $A \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ využijeme vztahů $\lambda_1\lambda_2 = \det(A)$ a $\lambda_1 + \lambda_2 = \operatorname{trace}(A) = a_{11} + a_{22}$.

(a) Dostáváme $\lambda_1\lambda_2 = 0$ a $\lambda_1 + \lambda_2 = 2$. Řešením je tedy dvojice vlastních čísel 0 a 2. Protože jedno vlastní číslo je nulové, matice není positivně definitní (je pouze positivně semidefinitní).

(b) Dostáváme $\lambda_1\lambda_2 = 3$ a $\lambda_1 + \lambda_2 = 4$. Vlastní čísla jsou 3 a 1. Matice je tedy positivně definitní.

Cv. 11.3 Nechť $A, B \in \mathbb{R}^{n\times n}$ jsou positivně definitní.

(a) Ukažte, že $A + B$ jsou také positivně definitní.

(b) Jak to bude se skalárním násobkem positivně definitní matice?

Řešení:

(a) Protože matice A, B jsou positivně definitní, platí pro každé $x \in \mathbb{R}^n, x \neq o$ nerovnost $x^T Ax > 0$ a $x^T Bx > 0$. Tedy i $x^T(A+B)x = x^T Ax + x^T Bx > 0$.

(b) Využijeme toho, že $x^T(\alpha A)x = \alpha x^T Ax$, a dále také, že platí $x^T Ax > 0$ pro všechna $x \neq o$. Matice αA tedy bude positivně definitní pro všechna $\alpha > 0$.

Cv. 11.4 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** horní trojúhelníková matice $R \in \mathbb{R}^{n\times n}$ s kladnou diagonálou taková, že $A = R^T R$ (Choleského rozklad). K dokázání positivní definitnosti matice A nám tedy stačí nalézt takovou matici R. Protože je R dolní trojúhelníková matice, víme, že část prvků tvoří nuly.

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

Určíme nejprve prvek r_{11}. Protože prvek a_{11} je dán maticovým násobením prvního řádku matice R^T s prvním sloupcem matice R, můžeme zapsat $a_{11} = r_{11}^2 + r_{21}^2 + r_{31}^2$. Prvky r_{21}, r_{31} se nicméně rovnají nule, tedy platí $4 = a_{11} = r_{11}^2$ a proto $r_{11} = 2$ (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 R^T se zbylými sloupci R, kvůli nulám v prvním řádku dostáváme rovnici $a_{1k} = (R^T)_{11}(R)_{1k} = 2r_{1k}$. Díky té snadno určíme prvky v prvním sloupci matice R^T jako $R^T_{k1} = \frac{1}{2}a_{1k}$.

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

Pokračujeme výpočtem r_{22}. Podobně jako při určování předchozího diagonálního prvku, dostáváme vynásobením druhého řádku matice R^T a druhého sloupce matice R rovnici $10 = a_{22} = r_{12}^2 + r_{22}^2 + r_{32}^2 = (-1)^2 + r_{22}^2 + 0^2$. Po úpravě dostáváme $r_{22}^2 = 9$ a tedy $r_{22} = 3$ 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 R^T je kompletní, můžeme dopočítat podobně jako předtím i druhý sloupec R^T, a to z rovnice $a_{23} = (R^T)_{2*}(R)_{*3}$.

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

Celý postup opakujeme ještě jednou pro třetí sloupec matice R. Nejprve z rovnice $a_{33} = r_{13}^2 + r_{23}^2 + r_{33}^2$ spočítáme diagonální prvek $r_{33} = 1$. Dostáváme rozklad

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

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

Cv. 11.5 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

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

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

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

Cv. 11.6 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 ji rozložit do tvaru $A = R^T R$. Pro její inverzi tedy platí $A^{-1} = (R^T R)^{-1} = R^{-1}(R^T)^{-1}$. Místo počítání inverze přímo tedy můžeme spočítat nejprve Choleského rozklad, následně inverzi horní trojúhelníkové matice R a na závěr vzniklou inverzi R^{-1} vynásobíme s její transpozicí, neboť $(R^T)^{-1} = (R^{-1})^T$.

Choleského rozkladem spočítáme

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

Potom invertujeme matici R klasickým způsobem:

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

Nakonec vyjádříme hledanou inverzi

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

Cv. 11.7 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 $A = R^T R$ pomocí Choleského rozkladu, můžeme vyřešit soustavu $Ax = b$ ve dvou krocích. Nejprve vyřešíme soustavu $R^T y = b$, a následně soustavu $Rx = y$. Výhodou tohoto postupu je, že matice R a R^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 R^T, postupujeme od první proměnné po poslední). Dostáváme

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

Soustava $R^T y = b$ 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 $Rx = y$ 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 $x = (1, 3, 2)^T$.

Cv. 11.8 Ukažte, že každá symetrická matice A se dá zapsat jako rozdíl dvou postivně definitních matic, tedy $A = P - R$, kde P, R jsou positivně definitní.

Řešení:
Každá reálná symetrická matice má spektrální rozklad $A = Q^\top D Q$, kde Q je ortogonální matice a D je diagonální matice s vlastními čísly $\lambda_i, i = 1, \ldots, n$, na hlavní diagonále. Označme $\rho = \max_{i=1,\ldots,n} |\lambda_i|$ a definujme $\bar{D} := (1 + \rho)I$.

Matice $P := Q^\top (D + \bar{D}) Q$ je positivně definitní, neboť je symetrická a má všechna vlastní čísla kladná, stejně tak i matice $R := Q^\top \bar{D} Q$.
Zároveň dostáváme $P - R = Q^\top (D + \bar{D} - \bar{D}) Q$, díky distributivitě maticového násobení. Tedy $P - R = Q^\top D Q = A$.