

Positivně (semi-)definitní matice a Choleského rozklad

Př. 1. Otestujte pozitivní definitnost matice

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

pomocí:

- (a) rekurentního vzorce,
- (b) Sylvestrova pravidla,
- (c) Gaussovy eliminace.

Řešení:

- (a) Rekurentní vzorec nám říká, že symetrická matice

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

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

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

Označme $B = \tilde{A} - \frac{1}{\alpha}aa^T$ a aplikujme vzorec ještě jednou. Dostáváme $\tilde{B} - \frac{1}{\beta}bb^T = 2 - \frac{1}{9}3 \cdot 3^T = 1$. Pro matici v prostoru $\mathbb{R}^{1 \times 1}$ víme, že je positivně definitní právě tehdy, když je kladná, což zřejmě hodnota 4 splňuje.

- (b) Stačí nám zkontrolovat, že determinanty všech hlavních vedoucích podmatic jsou kladné. To jsou matice, která vzniknout z matice A vyškrtnutím posledních $n-i$ řádků a sloupců pro $i = 1, \dots, n$. Musíme proto spočítat determinanty následujících matic, které odpovídají hlavním vedoucím podmaticím:

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

Těm odpovídají popořadě kladné hodnoty 4, 36, 36, tedy matice A je positivně definitní.

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

Př. 2. Necht' $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ jsou pozitivně definitní matice. Rozhodněte, zda je pozitivně definitní také součet $A + B$, inverzní matice A^{-1} a mocnina A^k pro $k \in \mathbb{N}$.

Řešení:

- (a) Součet $A + B$ je pozitivně definitní matice. Pro pozitivně definitní matice A, B platí z definice $x^T A x > 0$ a $x^T B x > 0$ pro všechna $x \neq 0$. Pro jejich součet pak dostaneme $x^T (A + B)x = x^T A x + x^T B x > 0$ pro $x \neq 0$.
- (b) Inverzní matice A^{-1} je pozitivně definitní. Z předpokladu pozitivní definitnosti je matice A regulární a má kladná vlastní čísla $\lambda_1, \dots, \lambda_n$. Matice A^{-1} má potom také kladná vlastní čísla $\lambda_1^{-1}, \dots, \lambda_n^{-1}$.
- (c) Matice A^k pro $k \in \mathbb{N}$ je také pozitivně definitní.

První způsob:

Pro k sudé: Pro $x \neq 0$ dostaneme $x^T A^k x = x^T A^{\frac{k}{2}} I A^{\frac{k}{2}} x = y^T I y > 0$ (platí $y \neq 0$).

Pro k liché: Pro $x \neq 0$ dostaneme $x^T A^k x = x^T A^{\frac{k-1}{2}} A A^{\frac{k-1}{2}} x = y^T A y > 0$ (opět $y \neq 0$).

Druhý způsob:

Protože matice A je pozitivně definitní, má kladná vlastní čísla $\lambda_1, \dots, \lambda_n$. Matice A^k má vlastní čísla jejich k -té mocniny $\lambda_1^k, \dots, \lambda_n^k$, které jsou taky kladné. Tudíž A^k je pozitivně definitní.

Př. 3. Nad symetrickými maticemi z $\mathbb{R}^{n \times n}$ definujeme relaci $\preccurlyeq$ předpisem $A \preccurlyeq B$ pokud $B - A$ je pozitivně semidefinitní. Ukažte, že $\preccurlyeq$ je relace částečného uspořádání (splňuje reflexivitu, antisymetrii a tranzitivitu).

Řešení:

Ukážeme postupně, že $\preccurlyeq$ splňuje reflexivitu, antisymetrii a tranzitivitu.

- Pro každou matici A je výraz $A \preccurlyeq A$ ekvivalentní tomu, že $A - A = 0_n$ je pozitivně semidefinitní. Pro každé $x \in \mathbb{R}^n$ je $x^T 0_n x = 0$, tedy 0_n je pozitivně semidefinitní a $\preccurlyeq$ je reflexivní.
- Pokud pro dvojici matic A, B platí, že $A \preccurlyeq B$ a zároveň $B \preccurlyeq A$, znamená to, že obě matice $B - A$ i $A - B$ jsou pozitivně semidefinitní matice. Tedy pro libovolný vektor x platí, že $x^T (B - A)x \geq 0$ a také $x^T (A - B)x \geq 0$, neboli $x^T B x - x^T A x \geq 0$ a $x^T A x - x^T B x \geq 0$. To můžeme upravit na $x^T B x \geq x^T A x$ a zároveň $x^T A x \geq x^T B x$, z čehož plyne, že $x^T A x = x^T B x$. Protože jsme zvolili libovolné x , platí to pro všechny vektory, čímž dostáváme rovnost $A = B$. Relace $\preccurlyeq$ je tedy antisymetrická.
- Mějme matice A, B, C takové, že $A \preccurlyeq B$ a $B \preccurlyeq C$. Tedy $M = B - A$ a $N = C - B$ jsou pozitivně semidefinitní matice. Všimněme si, že $M + N = (B - A) + (C - B) = C - A$. Pokud je tedy $M + N$ pozitivně semidefinitní, potom platí, že $A \preccurlyeq C$. Protože ale pro každé x platí $x^T M x \geq 0$ a $x^T N x \geq 0$, také $x^T (M + N)x = x^T M x + x^T N x \geq 0$. Relace $\preccurlyeq$ je tedy tranzitivní.

Př. 4. Otestujte pozitivní definitnost matice A pomocí Choleského rozkladu.

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

Řešení:

Pro každou pozitivně 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 pozitivní definitnosti matice A nám tedy stačí nalézt takovou matici L .

Při konstrukci postupujeme podle algoritmu. Protože je L dolní trojúhelníková, 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 sloupцем 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 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 L jako $\ell_{k1} = \frac{a_{1k}}{2}$.

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

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

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

Celý cyklus opakujeme ještě jednou pro třetí sloupec matice L . Nejprve 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 pozitivně definitní.

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

Př. 5. Pomocí Choleského rozkladu invertujte matici

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

Řešení:

Protože je matice A pozitivně 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.

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad L^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad A^{-1} = \begin{pmatrix} 6 & -2 & 1 \\ -2 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Takovýto postup může být někdy výpočetně méně náročný, než počítat inverzi matice E přímo.

Př. 6. Pomocí Choleského rozkladu vyřešte soustavu $Ax = b$.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 5 & 0 \\ -2 & 13 & -13 & 9 \\ 5 & -13 & 42 & -11 \\ 0 & 9 & -11 & 14 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} -3 \\ 15 \\ -10 \\ 4 \end{pmatrix}.$$

Řešení:

Choleského rozklad matice je $A = LL^T$, kde

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 3 & 0 & 0 \\ 5 & -1 & 4 & 0 \\ 0 & 3 & -2 & 1 \end{pmatrix}.$$

Dále vyřešíme zpětnou substitucí soustavu $Ly = b$ a následně soustavu $L^Tx = y$, dostaneme řešení $x = (1, 2, 0, -1)^T$.