11. Positivně (semi-)definitní matice

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 $\widetilde{A} - \frac{1}{\alpha}aa^T$ je positivně definitní. Aplikací dostáváme matici menší dimenze

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

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 $i = 1, \ldots, n$.

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 semidefinitnost resp. positivní definitnost následujících matic pomocí vlastních čísel:

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

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

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

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 jsou vlastní čísla nezáporná, matice je positivně semidefinitní.

(b) Dostáváme $\lambda_1\lambda_2 = -3$ a $\lambda_1 + \lambda_2 = 2$. Vlastní čísla tedy jsou -1 a 3. Matice je tzv. indefinitní, to znamená, že není ani positivně semidefinitní, ani negativně semidefinitní.

(c) 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 Buď A blokově diagonální symetrická matice. Ukažte, že A je positivně definitní právě tehdy, když všechny bloky jsou positivně definitní.

Jak to bude s positivní semidefinitností?

Řešení:
První způsob. Vyjádříme matici A blokově jako

$$A = \begin{pmatrix} A_1 & & \\ & \ddots & \\ & & A_k \end{pmatrix}.$$

Poté součin $x^T Ax$ můžeme vyjádřit jako

$$x^T Ax = \begin{pmatrix} x_1^T & \dots & x_k^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 & & \\ & \ddots & \\ & & A_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1^T & \dots & x_k^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1x_1 \\ \vdots \\ A_kx_k \end{pmatrix} =$$
$$= \sum_{i=1}^{k} x_i^T A_i x_i.$$

Pokud jsou všechny bloky positivně definitní, potom $x_i^T A_i x_i \geq 0$ pro všechna $i = 1, \dots, k$. Protože je vektor x nenulový, musí být nenulový aspoň jeden podvektor x_j, pro něhož platí $x_j^T A_j x_j > 0$. Tím pádem $x^T Ax = \sum_{i=1}^{k} x_i^T A_i x_i > 0$.

Předpokládejme naopak, že existuje blok A_j, který není positivně definitní. To znamená, že $x_j^T A_j x_j \leq 0$ pro určité nenulové x_j. Definujme $x_i \coloneqq o$ pro $i \neq j$. Potom vektor $x = (x_1^T, \dots, x_k^T)^T$ je nenulový a platí

$$x^T Ax = \sum_{i=1}^{k} x_i^T A_i x_i = x_j^T A_j x_j \leq 0.$$

Matice A proto není positivně definitní.

Z postupu je patrné, že tvrzení platí analogicky i pro positivní semidefinitnost.

Druhý způsob. Využijeme cvičení 7.8, které říká, že množina vlastních čísel matice A je rovna sjednocení vlastních čísel jednotlivých bloků. Pokud jsou všechny bloky positivně definitní, mají kladná vlastní čísla, a tím pádem i matice A má kladná vlastní čísla. Pokud aspoň jeden blok není positivně definitní, pak má nějaké vlastní číslo nekladné, a tedy i matice A má aspoň jedno vlastní číslo nekladné.

Cv. 11.4 Najděte příklad matice ilustrující, že nefunguje přímočaré zobecnění na testování positivní semidefinitnosti pomocí rekurentního vzorečku, Sylvestrova kritéria pro positivní definitnost a Choleského rozkladu.

Řešení:
Uvažme matici
$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$
která je positivně semidefinitní, ale ne positivně definitní.

Rekurentní vzoreček na tuto matici aplikovat nelze, protože prvek vlevo nahoře je nulový, $a_{11} = 0$, a proto jím nelze dělit. Není ani jasné, jak by se měl rekurentní vzoreček adaptovat pro testování positivní semidefinitnosti.

Varianta Choleského rozkladu existuje i pro positivně semidefinitní matice, to znamená, že je umíme přepsat do tvaru LL^T, kde L je dolní trojúhelníková matice. Narozdíl od Choleského rozkladu nyní matice L může mít na diagonále nulové prvky a navíc rozklad není jednoznačný. Například matice A má různé rozklady:
$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0.6 & 0.8 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0.6 \\ 0 & 0.8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sin\varphi \\ 0 & \cos\varphi \end{pmatrix}.$$
Uvažme nyní matici
$$B = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$
která není positivně semidefinitní. Sylvestrovo kritérium pro positivní definitnost říká, že všechny hlavní vedoucí podmatice mají mít kladný determinant. To zde není splněno, ale všechny hlavní vedoucí podmatice mají nezáporný determinant. Názorně tak vidíme, že pro testování positivní semidefinitnosti nestačí probírat pouze hlavní vedoucí podmatice, ale musíme spočítat determinanty všech hlavních podmatic (pro matici B už všechny nezáporné nejsou).

Positivně semidefinitní matice

Cv. 11.5 Ověřte positivní semidefinitnost matice
$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix},$$
a to všemi třemi způsoby (na základě tří ekvivalentních definic).

Řešení:
Nejprve ukážeme, že platí základní definice, tedy že $x^TAx \geq 0$ platí $\forall x \in \mathbb{R}^2$. Rozepíšeme
$$x^TAx = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = x_1^2 + 2x_1x_2 + x_2^2 = (x_1 + x_2)^2 \geq 0.$$

Podle druhé ekvivalentní definice je matice A positivně semidefinitní, pokud má nezáporná vlastní čísla. Charakteristický polynom A můžeme vyjádřit jako
$$p_A(\lambda) = (1-\lambda)^2 - 1 = \lambda^2 - 2\lambda = \lambda(\lambda - 2).$$

Vidíme, že vlastní čísla jsou 0 a 2, matice A je tedy positivně semidefinitní.

Třetí ekvivalentní charakterizace tvrdí, že existuje matice $U \in \mathbb{R}^{m\times 2}$ taková, že $A = U^T U$. Obecný postup pro faktorizaci uvidíme později, ale pro tuto jednoduchou matici není těžké rozklad uhádnout. Navíc matici U můžeme volit jako čtvercovou nebo jako matici s jedním řádkem (protože matice A má hodnost 1). Možné rozklady jsou například

$$A = U^T U = \begin{pmatrix} \sqrt{0.5} & \sqrt{0.5} \\ \sqrt{0.5} & \sqrt{0.5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{0.5} & \sqrt{0.5} \\ \sqrt{0.5} & \sqrt{0.5} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Cv. 11.6 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 součtem positivně semidefinitních matic?
(c) Jak to bude se součtem positivně semidefinitní a positivně definitní matice?
(d) Jak to bude s násobkem positivně definitních matic?

Řešení:

(a) Protože matice A, B jsou positivně definitní, platí pro každé $x \in \mathbb{R}^n$ nerovnost $x^T Ax \geq 0$ a $x^T Bx \geq 0$. Rovnost $x^T Ax = 0$ a $x^T Bx = 0$ nastane pouze pro $x = o$. Rozepišme

$$x^T (A + B)x = x^T Ax + x^T Bx \geq 0.$$

Rovnost $x^T (A + B)x = 0$ nastane pouze, pokud jsou oba sčítance $x^T Ax$, $x^T Bx$ nulové. Tato situace ale nastane pouze pro $x = o$.

(b) Vidíme, že v první části důkazu předchozí podúlohy jsme si vystačili pouze s positivní semidefinitností A a B. Platí tedy, že positivní semidefinitnost dvojice matic implikuje positivní semidefinitnost jejich součtu.

(c) Z předchozích podúloh již víme, že součet bude positivně semidefinitní. Aby byl positivně definitní, musí se nabýt $x^T (A + B)x = 0$ pouze pro $x = o$. Protože $x^T Ax \geq 0$ a $x^T Bx \geq 0$, tak rovnost $x^T (A+B)x = 0$ nastává pouze, pokud $x^T Ax = 0$ a zároveň $x^T Bx = 0$. Protože B je positivně definitní, tato situace nastane pouze pro $x = o$. Součet positivně semidefinitní a positivně definitní matice je tedy positivně definitní.

(d) 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 $\alpha > 0$. Pro $\alpha = 0$ se vynuluje, a bude tedy pouze positivně semidefinitní. Pro $\alpha < 0$ už nebude ani positivně semidefinitní.

Cv. 11.7 Najděte regulární matici, která je positivně semidefinitní, ale ne positivně definitní.

Řešení:

Positivně semidefinitní matice A musí mít nezáporná vlastní čísla. Pokud navíc víme, že je regulární, tak musí mít nenulová vlastní čísla. Tím pádem vlastní čísla jsou kladná a matice je nutně positivně definitní. Hledaná matice proto neexistuje.

Cv. 11.8 Ukažte, že libovolná mocnina positivně semidefinitní matice je positivně semidefinitní matice.

Řešení:

Protože matice A je positivně semidefinitní, má nezáporná 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 nezáporné. Tudíž A^k je positivně semidefinitní.

Cv. 11.9 Nad symetrickými maticemi z $\mathbb{R}^{n\times n}$ definujme relaci $\preccurlyeq$ předpisem $A \preccurlyeq B$ pokud $B - A$ je positivně semidefinitní. Ukažte, že $\preccurlyeq$ je relace částečného uspořádání.

Řešení:

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

Reflexivita. Pro každou matici A je $A \preccurlyeq A$ ekvivalentní tomu, že $A - A = 0_n$ je positivně semidefinitní. Pro každé $x \in \mathbb{R}^n$ je $x^T 0_n x = 0$, tedy 0_n je positivně semidefinitní, a tím pádem $\preccurlyeq$ je reflexivní relace.

Symetrie. Pokud $A \preccurlyeq B$ a zároveň $B \preccurlyeq A$, potom obě matice $B - A$ i $A - B$ jsou positivně semidefinitní. Pokud má matice $A - B$ kladné vlastní číslo λ, potom má matice $B - A$ vlastní číslo $-\lambda < 0$, a tudíž není positivně semidefinitní. Proto má matice $A - B$ pouze nulová vlastní čísla. Tím pádem je matice $A - B$ nulová (nahlédneme ze spektrálního rozkladu symetrické matice $A - B = Q\Lambda Q^T = Q0Q^T = 0$). Proto $A = B$ a relace $\preccurlyeq$ je tedy antisymetrická.

Tranzitivita. Mějme matice A, B, C takové, že $A \preccurlyeq B$ a $B \preccurlyeq C$. Tedy $M = B - A$ a $N = C - B$ jsou positivně semidefinitní matice. Všimněme si, že $M + N = (B - A) + (C - B) = C - A$. Protože $M + N$ je součet positivně semidefinitních matic, platí ze cvičení 11.6, že je opět positivně semidefinitní, a tudíž $A \preccurlyeq C$.

Cv. 11.10 Buď A positivně semidefinitní. Ukažte, že pokud $x^T Ax = 0$ platí pro nějaké $x \neq o$, potom $Ax = o$.

Řešení:

Matice A má (symetrickou) positivně semidefinitní odmocninu B, tj. $A = B^2$. Můžeme tedy psát $x^T Ax = x^T B^T Bx = y^T y$ pro $Bx = y$. Z předpokladu je $y^T y = 0$, z čehož $y = 0$ a tedy $Bx = 0$. Pokud obě strany vynásobíme maticí B, dostaneme $Ax = B^2 x = 0$.