Poznámka k typům definitnosti matic

Tomáš Kalvoda & Štěpán Starosta, KAM FIT ČVUT, 7. listopadu 2024

Nejprve zafixujme notaci používanou v tomto dokumentu. Symbolem $\mathbb{R}^n$ máme na mysli vektorový prostor reálných n-tic se standardními operacemi sčítání a násobení reálným číslem. Prvky tohoto prostoru značíme $\vec{x}$ a jejich komponenty zapisujeme do sloupcového vektoru,

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n.$$

Transpozicí tohoto vektoru $\vec{x}$ máme na mysli řádkový vektor $\vec{x}^T = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$. Dále symbolem tečky označujeme standardní skalární součin mezi dvěma vektory $\vec{x}$ a $\vec{y}$, tj.

$$\vec{x} \cdot \vec{y} = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i.$$

Konečně, $\mathbb{R}^{n,n}$ označuje prostor všech čtvercových matic typu $n \times n$ s reálnými složkami. Jedná se tedy o reálný vektorový prostor dimenze n^2. Matici $M \in \mathbb{R}^{n,n}$ nazýváme *symetrickou*, právě když je shodná s maticí k ní transponovanou, tj. $M = M^T$.

Vektory standardní báze prostoru $\mathbb{R}^n$ značíme $\vec{e}_i$, $i = 1, 2, \ldots, n$. Přesněji[1]

$$\vec{e}_i^T = (0, \ldots, 0\,, 1, 0, \ldots, 0), \ i \in \{1, 2, \ldots, n\}$$

kde 1 je na i-té pozici.

Definice, příklady a poznámky jsou číslovány postupně. Symbolem ▲ zde označujeme konec poznámky či příkladu. Čtvereček označuje konec důkazu □.

Připomeňme nejprve definici probíraných pojmů.

Definice 1. Čtvercovou symetrickou matici $M \in \mathbb{R}^{n,n}$ nazýváme

(i) *pozitivně definitní*, právě když pro každé $\vec{x} \in \mathbb{R}^n \setminus \{\vec{0}\}$ platí $\vec{x}^T M \vec{x} > 0$,

(ii) *negativně definitní*, právě když pro každé $\vec{x} \in \mathbb{R}^n \setminus \{\vec{0}\}$ platí $\vec{x}^T M \vec{x} < 0$,

(iii) *pozitivně semidefinitní*, právě když pro každé $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$ platí $\vec{x}^T M \vec{x} \geq 0$,

(iv) *negativně semidefinitní*, právě když pro každé $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$ platí $\vec{x}^T M \vec{x} \leq 0$,

(v) *indefinitní*, právě když existují vektory $\vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{R}^n$ splňující $\vec{x}^T M \vec{x} > 0$ a $\vec{y}^T M \vec{y} < 0$.

Definice 2. Pro danou matici $M \in \mathbb{R}^{n,n}$ nazýváme funkci $q_M : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ definovanou předpisem

$$q_M(\vec{x}) := \vec{x}^T M \vec{x}, \quad \vec{x} \in \mathbb{R}^n,$$

kvadratickou formou příslušnou matici M.

Povšimněte si, že hodnotu kvadratické formy příslušející matici $M = (M_{ij})_{i,j=1}^n$ lze vyjádřit několika různými zápisy:

$$q_M(\vec{x}) = \vec{x}^T M \vec{x} = \vec{x} \cdot M \vec{x} = \sum_{i,j=1}^{n} M_{ij} x_i x_j.$$

[1] Alternativně lze říci, že složky vektoru $\vec{e}_i$ splňují $(\vec{e}_i)_j = \delta_{ij}$ pro každé $j \in \{1, 2, \ldots\}$. δ_{ij} je rovno 1 právě když indexy i a j jsou shodné, jinak je rovno 0 a nazývá se Kroneckerovým symbolem.

Příklad 3. Uvažme matici

$$M = \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 3 & 1 \end{pmatrix}.$$

Potom

$$q_M(\vec{x}) = (x_1,\, x_2) \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = (x_1,\, x_2) \begin{pmatrix} 2x_1 + 3x_2 \\ 3x_1 + x_2 \end{pmatrix} = 2x_1^2 + 6x_1x_2 + x_2^2.$$

V tomto příkladě je q_M reálná funkce dvou proměnných jistého speciálního tvaru. ▲

Vyšetřování lokálních extrému funkce více proměnných vede na úlohu rozhodnout o typu definitnosti Hessovy[2] matice. Pokud jde o určení pozitivní (negativní) definitnosti matice, pak můžeme použít následující větu:

Věta 4 (Sylvestrovo kritérium)**.** Buď $M \in \mathbb{R}^{n,n}$ *symetrická* matice a označme $M_1,\, M_2, \ldots, M_n$ tak, že M_k je čtvercová matice typu $k \times k$ ležící v levém horním rohu matice M. Potom M je

(i) pozitivně definitní, právě když determinanty všech $M_1,\, M_2, \ldots, M_n$ jsou ostře větší než nula.

(ii) negativně definitní, právě když všechny determinanty matic M_k jsou nenulové, střídají znaménko a první je záporný.

V případě, že nám tato věta nedá odpověď na otázku definitnosti matice M, pak stále ještě matice M může být pozitivně či negativně semidefinitní, nebo indefinitní. K rozřešení této otázky je pak třeba použít přímo definici definitnosti a zkoumat příslušnou kvadratickou formu pomocí tzv. *úpravy na čtverce.*

Příklad 5. Vyšetřete definitnost matice

$$M = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}.$$

V našem značení je $M_1 = (2)$ a $M_2 = M$. Pro determinanty platí $\det M_1 = 2 > 0$ a $\det M_2 = 2 > 0$. Matice M je navíc symetrická a proto podle Sylvestrova kriteria (Věta 4) se tedy jedná o pozitivně definitní matici.

Tento fakt ovšem můžeme získat přímo z definice pozitivně definitní matice, tedy následující úpravou na čtverce:

$$\begin{aligned} q_M(\vec{x}) = (x_1, x_2) M \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} &= 2x_1^2 + 4x_1x_2 + 3x_2^2 = 2\Big(x_1^2 + 2x_1x_2 + x_2^2\Big) + x_2^2 = \\ &= 2\Big(x_1 + x_2\Big)^2 + x_2^2. \end{aligned}$$

Z pravé strany vidíme, že tento výraz je nezáporný (souřadnice x_1 a x_2 jsou reálné!) a rovný nule právě v případě $(x_1, x_2)^T = \vec{0}$. ▲

Příklad 6. Vyšetřete definitnost matice

$$M = \begin{pmatrix} -1 & 2 & 0 \\ 2 & -5 & 2 \\ 0 & 2 & -7 \end{pmatrix}.$$

Spočteme postupně determinanty

$$\det M_1 = \det(-1) = -1, \quad \det M_2 = \det \begin{pmatrix} -1 & 2 \\ 2 & -5 \end{pmatrix} = 1, \quad \det M_3 = \det M = -3.$$

Matice M je navíc symetrická a proto podle druhého bodu Sylvestrova kritéria (Věta 4) vidíme, že se jedná o negativně definitní matici. ▲

[2]Ludwig Otto Hesse, 22. dubna 1811 – 4 srpen 1874, německý matematik.

Příklad 7. Rozhodněte o definitnosti matice

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

Napočteme-li determinanty „podmatic“ dostaneme $\det M_1 = 5 > 0$, $\det M_2 = 1 > 0$ a $\det M_3 = -1 < 0$. Sylvestrovo kritérium nám tedy říká, že matice není definitní. Úpravou na čtverce dostáváme

$$\begin{aligned} q_M(\vec{x}) &= 5x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + 4x_1x_2 - 2x_1x_3 - 2x_2x_3 = \\ &= x_3^2 - 2x_3(x_1 + x_2) + (x_1 + x_2)^2 - (x_1 + x_2)^2 + 5x_1^2 + x_2^2 + 4x_1x_2 = \\ &= (x_3 - x_1 - x_2)^2 + 4x_1^2 + 2x_1x_2 = \\ &= (x_3 - x_1 - x_2)^2 + \left(2x_1 + \frac{1}{2}x_2\right)^2 - \frac{1}{4}x_2^2. \end{aligned}$$

V tomto případě se tedy jedná o indefinitní formu. Hodnoty různého znaménka dostaneme například na vektorech $(1, 0, 0)^T$ a $(-1, 4, 3)^T$.

Shrňme metodu doplňování na čtverce, kterou jsme ukázali na příkladech výše. Mějme matici $M \in \mathbb{R}^{n,n}$. V každém kroku upravujeme výraz $q_M(\vec{x})$ tak, abychom se zcela „zbavili“ jedné souřadnice tím, že ji dostaneme do nějakého čtverce. Maximálně po n krocích dostaneme výraz, který je součtem maximálně n čterců s nějakými koeficienty. Jsou-li všechny tyto koeficienty kladné, pak M je pozitivně semidefinitní. Je-li navíc koeficientů (a tedy čtverců) právě n, je matice pozitivně definitní. (Pozor, je nutné dodržet pravidlo o zbavování se proměnných v každém kroku doplňování na čtverec.) Jsou-li všechny koeficienty záporné, pak M je negativně semidefinitní. Je-li navíc koeficientů (a tedy čtverců) právě n, je matice negativně definitní. Ve zbylém případě, tedy máme-li alespoň jeden koeficient kladný a alespoň jeden záporný, je matice M indefinitní.

Poznámka 8. S pomocí Sylvestrova kritéria nelze usuzovat na semidefinitnost nebo indefinitnost. Přesněji, studenti často činí závěr, že pokud $\det M_k \geq 0$ pro každé $k = 1, 2, \ldots, n$, pak je M pozitivně semidefinitní.

Jako protipříklad k tomuto omylu uvažme symetrickou matici

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

Zde $\det M_1 = 1$, $\det M_2 = 0$ a $\det M_3 = 0$, avšak jedná se o indefinitní matici, neboť

$$q_M(\vec{x}) = x_1^2 + x_3^2 + 4x_1x_3 = x_1^2 + 4x_1x_3 + 4x_3^2 - 3x_3^2 = (x_1 + 2x_3)^2 - 3x_3^2.$$

Zřejmě $q_M\Big((1, 0, 0)^T\Big) = 1$ a $q_M\Big((-2, 0, 1)^T\Big) = -3$. ▲

Na druhou stranu ovšem lze zformulovat jedno užitečné kritérium pro indefinitnost:

Věta 9. Pokud má matice $M \in \mathbb{R}^{n,n}$ na diagonále dva prvky s různým znaménkem (jeden kladný a druhý záporný), pak je indefinitní.

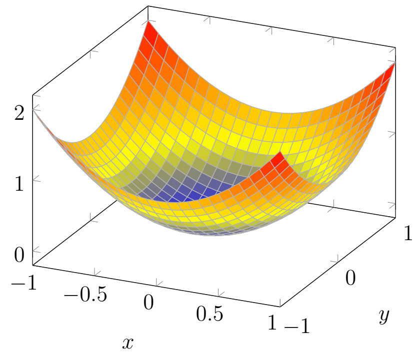
Důkaz. Důkaz je snadný. Nechť máme $M \in \mathbb{R}^{n,n}$ a $i, j \in \{1, 2, \ldots, n\}$ tak, že $M_{ii} > 0$ a $M_{jj} < 0$. Pak například pro vektor $\vec{e}_i$ platí

$$q_M(\vec{e}_i) = \vec{e}_i^T M \vec{e}_i = \vec{e}_i^T \begin{pmatrix} M_{1i} \\ M_{2i} \\ \vdots \\ M_{ni} \end{pmatrix} = M_{ii} > 0.$$

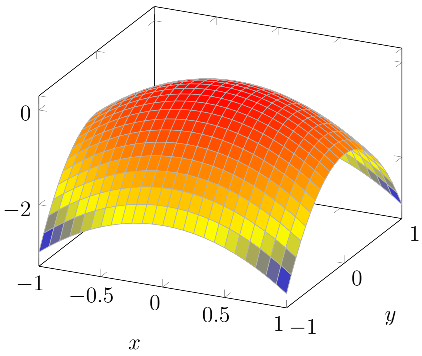
Na vektoru $\vec{e}_j$ pak dostaneme naopak zápornou hodnotu. □

Výklad uzavřeme uvedením základních typů matic z $\mathbb{R}^{2,2}$ a znázorněním grafů jejich kvadratických forem.

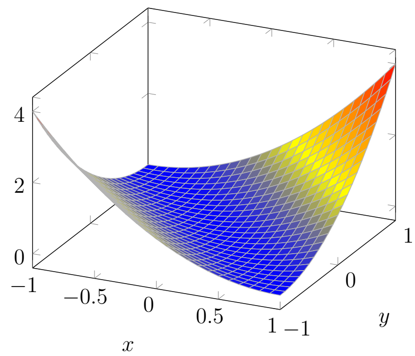
pozitivně definitní
$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$
$$q_M(\vec{x}) = x_1^2 + x_2^2$$



negativně definitní
$$M = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix}$$
$$q_M(\vec{x}) = -x_1^2 - 2x_2^2$$



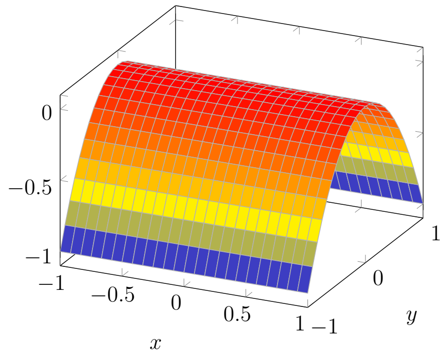
pozitivně semidefinitní
$$M = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$
$$q_M(\vec{x}) = (x_1 + x_2)^2$$



negativně semidefinitní

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

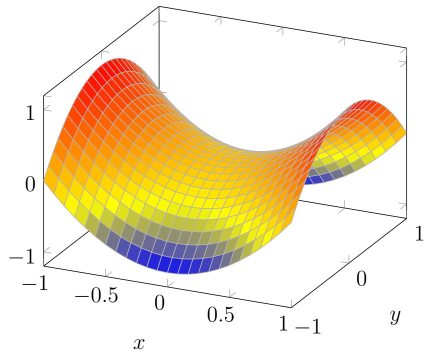
$$q_M(\vec{x}) = -x_2^2$$



indefinitní

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$q_M(\vec{x}) = x_1^2 - x_2^2$$



Poznámky k determinantům

Připomeňme znovu, co již bylo uvedeno v Poznámce 8: Sylvestrovo kritérium *nelze* použít k rozhodnutí o semidefinitnosti či indefinitnosti. Podrobněji, pomocí čísel $\det M_i$ lze rozhodnout pouze o definitnosti matice M.

Pro úplnost v tomto dodatku bez důkazu uvádíme vyčerpávající charakterizaci symetrických matic. Zmíníme též, jak jedině lze determinanty $\det M_i$ ze Sylvestrova kritéria použít pro rozhodnutí o indefinitnosti.

Pro matici $M \in \mathbb{R}^{n,n}$ definujeme její submatici M_I, kde $I \subsetneq \{1, \dots n\}$, takto: M_I vznikne vymazáním všech řádku a sloupců majících index v množině I.

Příklad 10. Je-li například

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 \\ -1 & 0 & 2 \\ \pi & 3 & -3 \end{pmatrix}$$

a $J = \{2\}$, pak

$$M_J = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ \pi & -3 \end{pmatrix}.$$

Pokud $J = \emptyset$, máme $M_J = M$.

Věta 11. Buď *symetrická* matice $M \in \mathbb{R}^{n,n}$. Matice M je

(i) pozitivně definitní, právě když $\det M_{\{k+1,\dots,n\}} > 0$ pro všechna k, $0 < k \leq n$;

(ii) negativně definitní, právě když $(-1)^k \det M_{\{k+1,\dots,n\}} > 0$ pro všechna k, $0 < k \leq n$;

(iii) pozitivně semidefinitní, právě když $\det M_I \geq 0$ pro všechna $I \subsetneq \{1, \dots n\}$;

(iv) negativně semidefinitní, právě když $(-1)^{n-\#I} \det M_I \geq 0$ pro všechna $I \subsetneq \{1, \dots n\}$;

(v) indefinitní, právě když $\det M_I < 0$ pro nějaké $I \subsetneq \{1, \dots n\}$, kde $n - \#I$ je sudé, nebo $\det M_I < 0$ a $\det M_J > 0$ pro nějaké $I, J \subsetneq \{1, \dots n\}$, kde $n - \#I$ a $n - \#J$ jsou lichá.

Všimněme si, že první dva body jsou Sylvestrovo kritérium. Z posledního bodu lze odvodit avizované kritérium pro indefinitnost pomocí determinantů $\det M_k$.

Důsledek 12. Buď *symetrická* matice $M \in \mathbb{R}^{n,n}$. Pokud existuje sudé k takové, že $\det M_k < 0$, nebo pokud existují lichá k, ℓ taková, že $\det M_k < 0$ a $\det M_\ell > 0$, pak matice M je indefinitní.

Z bodů (iii) a (iv) plyne, že pro semidefinitní matici vždy nalezneme k takové, že $\det M_k = 0$. Díky tomu odvodíme druhé kritérium pro indefinitnost:

Důsledek 13. Buď *symetrická* $M \in \mathbb{R}^{n,n}$ matice, která není ani pozitivně definitní a ani negativně definitní. Pokud pro všechna k platí $\det M_k \neq 0$, pak matice M je indefinitní.

Dvourozměrný případ

V různých zdrojích (zejména na některých www stránkách) lze najít jakési „návody“ na vyšetření extrému. Mnoho z těchto návodu je ovšem omezeno na funkce dvou[3] proměnných, kdy je situace o poznání jenodudušší než pro více než 2 proměnné. Následující příklad uvádí, jak lze případ $n = 2$ rychle řešit.

Příklad 14 (Dvourozměrný případ)**.** Nechť $M \in \mathbb{R}^{2,2}$ je symetrická. Označme $\alpha = M_{1,1}$, $\beta = \det M$ a $\gamma = M_{2,2}$. Z Věty 11 plyne:

1. M je pozitivně definitní právě, když $\alpha > 0$ a $\beta > 0$;
2. M je negativně definitní právě, když $\alpha < 0$ a $\beta > 0$;
3. M je pozitivně semidefinitní právě, když $\alpha > 0$, $\beta = 0$ a $\gamma \geq 0$ NEBO $\alpha = 0$, $\beta \geq 0$ a $\gamma \geq 0$;
4. M je negativně semidefinitní právě, když $\alpha < 0$, $\beta = 0$ a $\gamma \leq 0$ NEBO $\alpha = 0$, $\beta \geq 0$ a $\gamma \leq 0$;
5. M je indefinitní právě, když $\beta < 0$ NEBO $\alpha\gamma < 0$.

Předchozí případ dává kuchařku, kde lze porozumění problému odstranit na druhou kolej. Doporučujeme tuto kuchařku používat pouze pokud je jasné, odkud přišla a jak je třeba řešit vícerozměrné příklady.

Na závěr dodatku poznamenejme, že v některých zdrojích lze nalézt definici semidefinitnosti, která se lehce liší od naší: je ve formě, že zahrnuje i definintost, která je v naší definici vyloučena, aby nenulová matice spadala právě do jedné z možností a aby semidefinitnost neobsahovala definitnost.

Semidefinitnost

Velmi častým jevem je úvaha, že pozitivně semidefinitní Hessova matice v nějakém bodě znamená, že tento bod je bod neostrého lokálního minima. Tato úvaha je **špatná** a neplyne z žádného tvrzení z přednášky. Semidefinitnost znamené, že nevíme nic. Tomu lze náhlednout pomocí následujících příkladů, které jsou jednoduché na prozkoumání:

1. $f(x, y) = x^4 + y^2$;
2. $f(x, y) = x^3 + y^2$;
3. $f(x, y) = y^2$.

[3]Dvou, ne tří, atd.