Gramova matice

Věta: Nechť V je prostor se skalárním součinem a bází $B = (\boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_n)$. Potom takzvaná *Gramova matice* $\boldsymbol{A}$ definovaná $a_{ij} = \langle \boldsymbol{b}_i | \boldsymbol{b}_j \rangle$ splňuje: $\forall \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in V : \langle \boldsymbol{u} | \boldsymbol{v} \rangle = [\boldsymbol{v}]_B^{\mathsf{H}} \boldsymbol{A}^{\mathsf{T}} [\boldsymbol{u}]_B$

Všimněte si, že když B je ortonormální báze, pak $\boldsymbol{A} = \mathbf{I}_n$.

Důkaz: Označme $[\boldsymbol{u}]_B = (c_1, \ldots, c_n)^{\mathsf{T}}$, $[\boldsymbol{v}]_B = (d_1, \ldots, d_n)^{\mathsf{T}}$, t.j. $\boldsymbol{u} = \sum_{i=1}^{n} c_i \boldsymbol{b}_i$ a $\boldsymbol{v} = \sum_{j=1}^{n} d_j \boldsymbol{b}_j$. Dostáváme

$$\langle \boldsymbol{u} | \boldsymbol{v} \rangle = \left\langle \sum_{i=1}^{n} c_i \boldsymbol{b}_i \,\middle|\, \sum_{j=1}^{n} d_j \boldsymbol{b}_j \right\rangle = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} c_i \overline{d_j} \langle \boldsymbol{b}_i | \boldsymbol{b}_j \rangle = [\boldsymbol{v}]_B^{\mathsf{H}} \boldsymbol{A}^{\mathsf{T}} [\boldsymbol{u}]_B$$

Vlastnosti Gramovy matice:

- Z $\langle \boldsymbol{b}_i | \boldsymbol{b}_j \rangle = \overline{\langle \boldsymbol{b}_j | \boldsymbol{b}_i \rangle}$ máme $a_{ij} = \overline{a_{ji}}$, t.j. matice je *hermitovská*,
- Z $\langle \boldsymbol{v} | \boldsymbol{v} \rangle > 0$ pro $\boldsymbol{v} \neq \mathbf{0}$ máme $[\boldsymbol{v}]_B^{\mathsf{H}} \boldsymbol{A}^{\mathsf{T}} [\boldsymbol{v}]_B > 0$.

Pozitivně definitní matice

Definice: Hermitovská matice $\boldsymbol{A}$ řádu n se nazývá *pozitivně definitní*, pokud pro ni platí: $\forall \boldsymbol{v} \in \mathbb{C}^n \setminus \mathbf{0} : \boldsymbol{v}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{A} \boldsymbol{v} > 0$.

Aplikace:

- Hledání extrémů reálné funkce více proměnných — je-li (tzv. *Hessova*) matice získaná parciálními derivacemi druhého řádu pozitivně definitní, pak jde o lokální minimum.
- Rozšíření optimalizačních úloh (*semidefinitní programování*).

Ukázka: $\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 5 \end{pmatrix}$ … ale jak lze podmínku $\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{A} \boldsymbol{v} > 0$ ověřit pro všechna $\boldsymbol{v} \in \mathbb{C}^2 \setminus \mathbf{0}$?

Vlastnosti pozitivně definitních matic

Pozorování: Pokud $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ jsou pozitivně definitní stejného řádu, pak $\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}$ je také pozitivně definitní.

Důkaz: $\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v} + \boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{v} > 0$

Pozorování: Pokud $\boldsymbol{A}$ je pozitivně definitní a $\boldsymbol{R}$ je regulární, pak $\boldsymbol{R}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{R}$ je také pozitivně definitní.

Důkaz: Pro $\boldsymbol{v} \neq \mathbf{0}$ a $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{R}\boldsymbol{v} \neq \mathbf{0}$ platí: $\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{R}\boldsymbol{v} = \boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{u} > 0$.

Důsledek: Buď jsou pozitivně definitní $\boldsymbol{A}$ i $\boldsymbol{R}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{R}$ nebo ani jedna.

Pozorování: Pokud $\boldsymbol{A}$ je pozitivně definitní, pak je regulární a $\boldsymbol{A}^{-1}$ je také pozitivně definitní.

Důkaz: Pro singulární $\boldsymbol{A}$ existuje $\boldsymbol{v} \neq \mathbf{0}$, že: $\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}\mathbf{0} = 0$.
Inverzní k hermitovské je hermitovská: $\boldsymbol{A}^{-1} = (\boldsymbol{A}^{-1})^{\mathrm{H}}$, protože:
$(\boldsymbol{A}^{-1})^{\mathrm{H}} = (\boldsymbol{A}^{-1})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-1} = (\boldsymbol{A}^{-1})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{-1} = (\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-1})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{-1} = \boldsymbol{A}^{-1}$.
Podle předchozího pozorování: $\boldsymbol{A}^{-1} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-1} = (\boldsymbol{A}^{-1})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-1}$.

Vlastnosti pozitivně definitních matic

Tvrzení: Hermitovská bloková matice $\begin{pmatrix} \boldsymbol{A} & \mathbf{0}_{n,m} \\ \mathbf{0}_{m,n} & \boldsymbol{B} \end{pmatrix}$ je pozitivně definitní, právě když $\boldsymbol{A}$ i $\boldsymbol{B}$ jsou pozitivně definitní.

Důkaz: Pro $\boldsymbol{w} = (v_1, \ldots, v_n, u_1, \ldots, u_m)^\mathsf{T} \in \mathbb{C}^{n+m}$, platí:

$$\boldsymbol{w}^\mathsf{H} \begin{pmatrix} \boldsymbol{A} & \mathbf{0}_{n,m} \\ \mathbf{0}_{m,n} & \boldsymbol{B} \end{pmatrix} \boldsymbol{w} = \boldsymbol{v}^\mathsf{H}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v} + \boldsymbol{u}^\mathsf{H}\boldsymbol{B}\boldsymbol{u}$$

Oba sčítance pravé straně jsou nezáporné pro každé $\boldsymbol{w}$ a je-li $\boldsymbol{w}$ netriviální, pak alespoň jeden z nich je kladný.

Obráceně, pokud $\boldsymbol{v} \in \mathbb{C}^n \setminus \mathbf{0}$ doplníme nulami na $\boldsymbol{w} = (v_1, \ldots, v_n, 0, \ldots, 0)^\mathsf{T} \in \mathbb{C}^{n+m}$, pak dostaneme:

$$\boldsymbol{v}^\mathsf{H}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v} = \boldsymbol{w}^\mathsf{H} \begin{pmatrix} \boldsymbol{A} & \mathbf{0}_{n,m} \\ \mathbf{0}_{m,n} & \boldsymbol{B} \end{pmatrix} \boldsymbol{w} > 0$$

Pro matici $\boldsymbol{B}$ lze postupovat obdobně.

Charakteristika pozitivně definitních matic

Věta: Pro hermitovskou $\boldsymbol{A}$ jsou následující podmínky ekvivalentní:

1. Matice $\boldsymbol{A}$ je pozitivně definitní,
2. $\boldsymbol{A}$ má všechna vlastní čísla kladná,
3. existuje regulární matice $\boldsymbol{U}$ taková, že $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}$.

Důkaz: $1 \Rightarrow 2$: Protože $\boldsymbol{A}$ je hermitovská, má vlastní čísla reálná. Nechť $\boldsymbol{v}$ je netriviální vlastní vektor odpovídající vlastnímu číslu λ. Potom $0 < \boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v} = \lambda\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{v} = \lambda\langle\boldsymbol{v}|\boldsymbol{v}\rangle$. Z $\langle\boldsymbol{v}|\boldsymbol{v}\rangle > 0$ máme $\lambda > 0$.

$2 \Rightarrow 3$: Protože $\boldsymbol{A}$ je hermitovská, existují unitární $\boldsymbol{R}$ a diagonální $\boldsymbol{D}$ takové, že $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{R}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{D}\boldsymbol{R}$. Vezměme diagonální $\tilde{\boldsymbol{D}} : \tilde{d}_{ii} = \sqrt{d_{ii}}$ a $\boldsymbol{U} = \tilde{\boldsymbol{D}}\boldsymbol{R}$. Nyní $\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U} = (\tilde{\boldsymbol{D}}\boldsymbol{R})^{\mathrm{H}}\tilde{\boldsymbol{D}}\boldsymbol{R} = \boldsymbol{R}^{\mathrm{H}}\tilde{\boldsymbol{D}}^{\mathrm{H}}\tilde{\boldsymbol{D}}\boldsymbol{R} = \boldsymbol{R}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{D}\boldsymbol{R} = \boldsymbol{A}$. $\boldsymbol{U}$ je regulární, protože unitární i diagonální matice jsou regulární.

$3 \Rightarrow 1$: Pokud $\boldsymbol{v} \in \mathbb{C}^n \setminus \mathbf{0}$, pak $\boldsymbol{U}\boldsymbol{v} \neq \mathbf{0}$, protože $\boldsymbol{U}$ je regulární. Nyní: $\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}\boldsymbol{v} = (\boldsymbol{U}\boldsymbol{v})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}\boldsymbol{v} = \langle\boldsymbol{U}\boldsymbol{v}|\boldsymbol{U}\boldsymbol{v}\rangle > 0$.

Choleského rozklad

Věta: Pro každou pozitivně definitní matici $\boldsymbol{A}$ existuje *jednoznačná* horní trojúhelníková matice $\boldsymbol{U}$ s kladnou diagonálou taková, že $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}$. Matice $\boldsymbol{U}$ se nazývá *Choleského rozklad*.

Input: Hermitovská matice $\boldsymbol{A}$
Output: Choleského rozklad $\boldsymbol{U}$, pokud je $\boldsymbol{A}$ pozitivně definitní
for $i = 1, \ldots, n$ **do**

$$u_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} \overline{u_{ki}} u_{ki}}$$

if $u_{ii} \notin \mathbb{R}^+$ **then** STOP, $\boldsymbol{A}$ není pozitivně definitní;
for $j = i+1, \ldots, n$ **do**

$$u_{ij} = \frac{1}{u_{ii}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} \overline{u_{ki}} u_{kj} \right)$$

end
end

Pozorování: Výpočet vyžaduje $O(n^3)$ aritmetických operací.

Ukázka — Choleského rozklad

Pro danou hermitovskou matici $\boldsymbol{A}$ určete horní trojúhelníkovou matici $\boldsymbol{U}$ s kladnou diagonálou splňující: $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}$

$$
\begin{array}{c|c}
 & \boldsymbol{U} \\
\hline
\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} & \boldsymbol{A}
\end{array}
\qquad
\begin{array}{cccc|cccc}
 & & & & 2 & 1 & 0 & -1 \\
 & & & & 0 & 1 & 2 & 3 \\
 & & & & 0 & 0 & 1 & 1 \\
 & & & & 0 & 0 & 0 & 3 \\
\hline
2 & 0 & 0 & 0 & 4 & 2 & 0 & -2 \\
1 & 1 & 0 & 0 & 2 & 2 & 2 & 2 \\
0 & 2 & 1 & 0 & 0 & 2 & 5 & 7 \\
-1 & 3 & 1 & 3 & -2 & 2 & 7 & 20
\end{array}
$$

$$
\begin{array}{cccc|cccc}
\multicolumn{4}{c|}{u_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} \overline{u_{ki}}\, u_{ki}}} & 2 & 1 & 0 & -1 \\
 & & & & 0 & 1 & 2 & 3 \\
 & & & & 0 & 0 & ? & . \\
 & & & & 0 & 0 & 0 & . \\
\hline
2 & 0 & 0 & 0 & 4 & 2 & 0 & -2 \\
1 & 1 & 0 & 0 & 2 & 2 & 2 & 2 \\
0 & 2 & ? & 0 & 0 & 2 & 5 & 7 \\
-1 & 3 & . & . & -2 & 2 & 7 & 20
\end{array}
\qquad
\begin{array}{cccc|cccc}
\multicolumn{4}{c|}{u_{ij} = \frac{1}{u_{ii}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} \overline{u_{ki}}\, u_{kj} \right)} & 2 & 1 & 0 & -1 \\
 & & & & 0 & 1 & 2 & 3 \\
 & & & & 0 & 0 & 1 & ? \\
 & & & & 0 & 0 & 0 & . \\
\hline
2 & 0 & 0 & 0 & 4 & 2 & 0 & -2 \\
1 & 1 & 0 & 0 & 2 & 2 & 2 & 2 \\
0 & 2 & 1 & 0 & 0 & 2 & 5 & 7 \\
-1 & 3 & . & . & -2 & 2 & 7 & 20
\end{array}
$$

Správnost výpočtu Choleského rozkladu

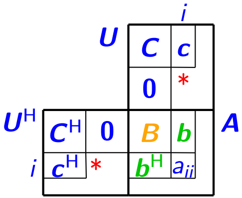
$\Leftarrow$: Pokud algoritmus uspěje, pak součin $\boldsymbol{U}^H\boldsymbol{U}$ ověřuje rozklad.

$\Rightarrow$: Předpokládejme, že algoritmus selže během při výpočtu u_{ii} $*$.

Prvních $i-1$ řádků a sloupců $\boldsymbol{A}$ označme $\boldsymbol{B}$,
prvních $i-1$ prvků i-tého sloupce $\boldsymbol{A}$ zas $\boldsymbol{b}$.
Podobně $\boldsymbol{C}$ a $\boldsymbol{c}$ pro dosud spočtenou část $\boldsymbol{U}$.

Tyto objekty splňují: $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{C}^{\mathsf{H}}\boldsymbol{C}$ a $\boldsymbol{b} = \boldsymbol{C}^{\mathsf{H}}\boldsymbol{c}$.

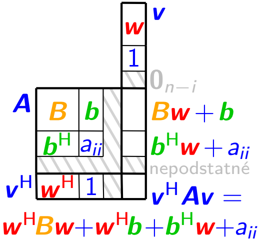
$*$ Protože nelze určit u_{ii}, máme $a_{ii} \le \boldsymbol{c}^{\mathsf{H}}\boldsymbol{c}$.



Položme $\boldsymbol{v}^{\mathsf{T}} = \boxed{\boldsymbol{w}^{\mathsf{T}} \mid 1 \mid 0^{\mathsf{T}}_{n-i}} \in \mathbb{C}^n$, kde $\boldsymbol{w} = -\boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{c}$.

Nyní dostáváme: $\boldsymbol{v}^{\mathsf{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v} =$

$$
\begin{aligned}
&= \boldsymbol{w}^{\mathsf{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{w} + \boldsymbol{w}^{\mathsf{H}}\boldsymbol{b} + \boldsymbol{b}^{\mathsf{H}}\boldsymbol{w} + a_{ii}\\
&= (-\boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{c})^{\mathsf{H}}(\boldsymbol{C}^{\mathsf{H}}\boldsymbol{C})(-\boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{c}) +\\
&\quad (-\boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{c})^{\mathsf{H}}(\boldsymbol{C}^{\mathsf{H}}\boldsymbol{c}) + (\boldsymbol{C}^{\mathsf{H}}\boldsymbol{c})^{\mathsf{H}}(-\boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{c}) + a_{ii}\\
&= \boldsymbol{c}^{\mathsf{H}}\boldsymbol{c} - \boldsymbol{c}^{\mathsf{H}}\boldsymbol{c} - \boldsymbol{c}^{\mathsf{H}}\boldsymbol{c} + a_{ii} = a_{ii} - \boldsymbol{c}^{\mathsf{H}}\boldsymbol{c} \le 0
\end{aligned}
$$



Proto $\boldsymbol{A}$ není pozitivně definitní.

Kvíz — řešení

Je-li u některých otázek více možností správných, vyberte všechny.

1. Je-li $\boldsymbol{A}$ Hermitovská, pak $\boldsymbol{BAB}^{\mathsf{H}}$ je Hermitovská
   a) vždy b) jen pro čtvercové $\boldsymbol{B}$ c) jen pro Hermitovské $\boldsymbol{B}$
   d) jen pro regulární $\boldsymbol{B}$ e) jen pro unitární $\boldsymbol{B}$ f) nikdy
2. Kolik má pozitivně definitní matice řádu 4 rozkladů $\boldsymbol{U}^{\mathsf{H}}\boldsymbol{U}$ s horní trojúhelníkovou maticí $\boldsymbol{U}$?
   a) 1 b) 2 c) 4 d) 16 e) nekonečně mnoho
3. Je-li $\boldsymbol{v} \in \mathbb{C}^n$, jaký je rozdíl mezi $\boldsymbol{v}^{\mathsf{H}}\boldsymbol{v}$ a $\boldsymbol{v}\boldsymbol{v}^{\mathsf{H}}$
   a) žádný, jde o výpočet standardního skalárního součinu
   b) první je komplexní číslo, druhý je Hermitovská matice
   c) první je Hermitovská matice, druhý je komplexní číslo
4. Pozitivně definitní matice jsou uzavřeny na operace:
   a) součty, b) rozdíly, c) skalární násobky,
   d) součiny, e) transpozice, f) inverze.

Komentář k řešení kvízu

1. Stačí ověřit: $(\boldsymbol{BAB}^{\mathsf{H}})^{\mathsf{H}} = (\boldsymbol{B}^{\mathsf{H}})^{\mathsf{H}}\boldsymbol{A}^{\mathsf{H}}\boldsymbol{B}^{\mathsf{H}} = \boldsymbol{BAB}^{\mathsf{H}}$.
2. U rozkladu lze volit znaménko prvku na diagonále, ostatní hodnoty jsou pak jednoznačně dány. To je 2^4 možností.
3. Nahlížíme-li na vektor $\boldsymbol{v} \in \mathbb{C}^n$ jako na matici $\boldsymbol{v} \in \mathbb{C}^{n\times 1}$, je $\boldsymbol{v}^{\mathsf{H}} \in \mathbb{C}^{1\times n}$, a potom $\boldsymbol{v}^{\mathsf{H}}\boldsymbol{v} \in \mathbb{C}^{1\times 1}$ a $\boldsymbol{v}\boldsymbol{v}^{\mathsf{H}} \in \mathbb{C}^{n\times n}$.
4. a, f) bylo v pozorování; e) $\boldsymbol{v}^{\mathsf{H}}\boldsymbol{A}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{v} = (\boldsymbol{v}^{\mathsf{H}}\boldsymbol{A}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{v})^{\mathsf{T}} = \boldsymbol{u}^{\mathsf{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{u} > \mathbf{0}$ pro $\boldsymbol{u} = (\boldsymbol{v}^{\mathsf{H}})^{\mathsf{T}} \neq \mathbf{0}$. Vektor $\boldsymbol{u}$ má komplexně sdružené složky oproti $\boldsymbol{v}$, čili $u_i = \overline{v_i}$; b, c) např. $\mathbf{I} - 2\mathbf{I} = (-1)\mathbf{I} = -\mathbf{I}$ není pozitivně definitní; d) součin hermitovských nemusí být ani hermitovská, např. $\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 6 & 5 \end{pmatrix}$.

Otázky k porozumění tématu přednášky

- Může být nějaká obdélníková matice pozitivně definitní?
- Jak souvisí pozitivní definitnost matic $\boldsymbol{A}$ a $\boldsymbol{R}^{\mathsf{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{R}$ s jejich Choleského rozklady?
- Lze provést Choleského rozklad matic, které nejsou hermitovské?
- Čím je zaručena existence matice $\boldsymbol{C}^{-1}$ z argumentu o správnosti výpočtu Choleského rozkladu?
- Pokud do rozkladu pozitivně definitní matice $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}^{\mathsf{H}}\boldsymbol{U}$, kde $\boldsymbol{U}$ je regulární, ale ne nutně trojúhelníková, dosadíme za $\boldsymbol{U}$ její QR-rozklad, jaké vyjádření dostaneme?

Poznámky k pojmosloví a značení

A.-L. Cholesky byl geodet a kartograf. Před první světovou válkou se podílel na vyměřování Kréty a severní Afriky. Choleského rozklad vyvinul právě pro svou geodetickou práci. Sloužil ve francouzské armádě jako dělostřelecký důstojník a na konci první světové války padl v boji.

André-Louis Cholesky
1875 – 1918
[Obrázek: MacTutor]

Kromě pozitivně definitních jsou definovány i *negativně definitní matice*, t.j. hermitovské řádu n splňující $\forall \boldsymbol{v} \in \mathbb{C}^n \setminus \mathbf{0} \colon \boldsymbol{v}^{\mathsf{H}} \boldsymbol{A} \boldsymbol{v} < 0$. Pozitivně či negativně *semidefinitní* matice mají v definici neostrou nerovnost místo ostré. Zbylé hermitovské matice jsou *indefinitní*.

Definitnost lze převést z matic i na jistá zobrazení, na tzv. *formy*.