O dodatnio określonych macierzach

Antoni Kościelski

21 czerwca 2023

1 Trochę o eliminacji Gaussa

Przypuśćmy, że mamy macierz

$$A = \begin{bmatrix} a_{1,1} & & a_{1,k} & & a_{1,n} \\ & \ddots & & & \\ & & a_{k,k} & & \\ a_{k+1,1} & & a_{k+1,i} & & a_{k+1,n} \\ & & & \ddots & \\ a_{n,1} & & a_{n,i} & & a_{n,n} \end{bmatrix},$$

a w niej niezerowy element $a_{k,k}$ (na przekątnej, ale to nie jest bardzo istotne). Chcemy wyzerować wszystkie elementy macierzy poniżej $a_{k,k}$ stosując wierszowe przekształcenia elementarne, czyli chcemy przekształcić daną macierz w macierz postaci

$$\begin{bmatrix} a_{1,1} & & a_{1,k} & & a_{1,n} \\ & \ddots & & & \\ & & a_{k,k} & & \\ a'_{k+1,1} & & 0 & & a'_{k+1,n} \\ & & & \ddots & \\ a'_{n,1} & & 0 & & a'_{n,n} \end{bmatrix}.$$

Możemy to zrobić wykonując następujący algorytm:
Algorytm 1.

- Mamy macierz A oraz k takie, że $a_{k,k} \neq 0$;
- Dla i od $k+1$ do n

  odejmij od i-tego wiersza macierzy A wiersz k-ty przemnożony przez $a_{i,k}/a_{k,k}$.
- Wynikiem obliczeń jest macierz otrzymana w wyniku zastosowanych przekształceń.

W ten sposób otrzymujemy macierz B, w której w i-tym wierszu dla $i > k$ mamy elementy

$$a'_{i,j} = a_{i,j} - (a_{i,k}/a_{k,k}) \cdot a_{k,j} = \frac{a_{k,k}a_{i,j} - a_{k,j}a_{i,k}}{a_{k,k}}.$$

Nietrudno zauważyć, że dla $i > k$ i $j = k$ mamy $a'_{i,j} = a'_{i,k} = 0$.

Ten banalny algorytm ma interesującą i ważną dla nas własność.

Minorem (z łac., mniejszy) macierzy M będziemy nazywać każdy jej fragment (podmacierz) pozostający po usunięciu kilku wierszy i kolumn (czasem minorem nazywa się od razu wyznacznik takiej macierzy). Szczególnie bedą nas interesowały minory M_i powstające przez wykreślenie w macierzy M wierszy i kolumn o numerach większych od i.

Fakt 1.1 Podczas wykonywania Algorytmu 1 są zachowywane wartości wyznaczników minorów danej macierzy, a więc dla wszystkich $i \leqslant n$ zachodzi równość $det(A_i) = det(B_i)$.

Dowód. Jest to oczywista konsekwencja własności wyznaczników: dodanie wielokrotności wiersza macierzy do innego wiersza tej macierzy nie zmienia wyznacznika. Dla $i \leqslant k$ tak jest, gdyż wyrazy minorów A_i nie ulegają zmianie, a dla pozostałych i jest to konsekwencja wspomnianej własności. □

Jest też znaną rzeczą, że operacje elementarne mogą zostać wyrażone za pomocą mnożenia macierzy. W szczególności, cały Algorytm 1 może zostać przedstawiony jako operacja wyliczenia iloczynu macierzy[1] P^T i A, gdzie

$$P^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & & 0 & & & 0 \\ 0 & 1 & & 0 & & & 0 \\ & & \ddots & & & & \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & & 0 & \frac{-a_{k+1,k}}{a_{k,k}} & 1 & & 0 \\ & & & & & \ddots & \\ 0 & & 0 & \frac{-a_{n,k}}{a_{k,k}} & 0 & & 1 \end{bmatrix}.$$

Po prostu, zamiast wykonywać przekształcenia elementarne zgodnie z Algorytmem 1, tworzymy macierz P^T i obliczamy iloczyn $P^T A$. Oczywiście, mamy $B = P^T A$.

Widać, że macierz P^T jest dolnie trójkątna, a więc P jest górnie trójkątna. Zauważmy jeszcze, że są to macierze odwracalne. Jest to związane z tym, że operacje elementarne są odwracalne. Jeżeli przekształcając macierz odjęliśmy od pewnego wiersza pewną wielokrotność innego, to powrócimy do stanu wyjściowego dodając do tego wiersza tę wielokrotność. Zresztą łatwo sprawdzić bezpośrednim rachunkiem, że macierzą odwrotną do P^T jest

$$(P^T)^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & & 0 & & & 0 \\ 0 & 1 & & 0 & & & 0 \\ & & \ddots & & & & \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & & 0 & \frac{a_{k+1,k}}{a_{k,k}} & 1 & & 0 \\ & & & & & \ddots & \\ 0 & & 0 & \frac{a_{n,k}}{a_{k,k}} & 0 & & 1 \end{bmatrix}.$$

[1] To, że mnożymy przez macierz transponowaną P^T, a nie przez P, nie ma istotnego znaczenia, ma spowodować, że w odpowiednim momencie otrzymamy standardowe wzory w zwyklej postaci.

2 Funkcjonały dwuliniowe i formy kwadratowe

Niech M będzie macierzą o wymiarach $n \times n$. Funkcjonałem dwuliniowym nazywamy dwuargumentową funkcję $f : R^n \times R^n \to R$ zdefiniowaną wzorem

$$f(X,Y) = X^T MY$$

gdzie X i Y to odpowiednie wektory, utożsamiamy je z jednokolumnowymi macierzami, $f(X,Y)$ uważamy za skalar, który jest jedynym elementem macierzy $X^T MY$ o wymiarach 1×1. Formy kwadratowe to funkcje g takie, że

$$g(X) = f(X,X) = X^T MX.$$

Każda macierz wyznacza funkcjonał dwuliniowy, z kolei funkcjonały wyznaczają formy kwadratowe. Każda forma kwadratowa jest wyznaczona przez wiele macierzy, w tym dokładnie jedną symetryczną (taką, że $M^T = M$).

Mając formę kwadratową $g(X) = X^T MX$ możemy zdefiniować funkcjonał

$$f(X,Y) = g(X+Y, X+Y) - g(X,X) - g(Y,Y) = X^T \left(\frac{1}{2}M^T + \frac{1}{2}M\right) X.$$

Jest to funkcjonał dwuliniowy definiowany symetryczną macierzą $1/2(M^T + M)$, wyznaczający formą g, a więc spełniający $f(X,X) = g(X)$. Dodatkowo, jest on symetryczny, czyli spełnia równości $f(X,Y) = f(Y,X)$.

W dalszym ciągu będziemy zakładać, że macierze definiujące funkcjonały dwuliniowe i formy kwadratowe są symetryczne.

Symetryczne funkcjonały dwuliniowe są nam potrzebne wtedy, gdy zajmujemy się iloczynami skalarnymi. Są to funkcjonały, które dodatkowo są dodatnio określone (niektórzy matematycy nazywają je istotnie dodatnio określonymi). Odpowiadające im formy kwadratowe są w takiej sytuacji definiują długość wektora.

Formy kwadratowe występują też w definicjach różnych ważnych krzywy (tzw. stożkowych) lub powierzchni i także z tego powodu były (są) analizowane. Na przykład, forma $g(x,y,z) = x^2 + y^2 - z^2$ określona w przestrzeni R^3 pojawia się w równaniu $g(x,y,z) = 0$ powierzchni bocznej dwóch stożków powstających przez obrót prostej o kierunku $(1,0,1)$ wokół osi Z-tów. Przecinając te stożki różnymi płaszczyznami otrzymujemy rozmaite krzywe stożkowe, a więc elipsy (także okręgi), hiperbole i parabole.

Przecinając ten stożek płaszczyzną o równaniu $z = c$ otrzymujemy na tej płaszczyźnie okrąg o równaniu $x^2 + y^2 = c^2$. Przekrój z płaszczyzną o równaniu $y = c$ to dwie hiperbole o równaniu $z^2 - x^2 = c^2$. Te hiperbole można otrzymać obracając wykres funkcji $z = c^2/x$ o 45 stopni przeciwnie do ruchu wskazówek zegara. Przecięciem stożka z płaszczyzną o równaniu $z = y + 1$ (rtównoległą do tworzącej stożka) jest parabola $y = (x^2 - 1)/2$.

Ponieważ będziemy zajmować się dodatnią określonością, ustalmy związaną z tym terminologię. Niech M będzie macierzą symetryczną. Będziemy M, a także funkcjonał dwuliniowy $f_M(X,Y) = X^T MY$ oraz formę kwadratową $g_M(X) = X^T MX$ nazywać określonymi dodatnio, jeżeli dla wszystkich niezerowych wektorów X zachodzi nierówność $X^T MX > 0$. (dokładniej: jeżeli dodatnim jest jedyny element tej macierzy).

3 Inny algorytm

Przyjmijmy, że $k = 1$ i skomplikujmy nieco Algorytm 1 tak, aby zerował nie tylko pierwszą kolumną, ale także pierwszy wiersz (oprócz elementu $a_{1,1}$).

Algorytm 2.

- Mamy daną symetryczną macierz A taką, że $a_{1,1} \neq 0$;
- Dwukrotnie

  wyzeruj Algorytmem 1 pierwszą kolumnę A i transponuj otrzymaną macierz;
- Zwróć otrzymaną macierz.

Oczywiście, także ten algorytm ma wersję wykorzystującą mnożenie macierzy.
Algorytm 2'.

- Mamy daną symetryczną macierz A taką, że $a_{1,1} \neq 0$;
- Utwórz macierz P (patrz str.2);
- Dwukrotnie

  macierz A zastąp przez $(P^T A)^T$;
- Zwróć wyliczoną macierz.

Skomplikowane obliczenia w ostatnim algorytmie można jeszcze trochę skrócić w następujący sposób:
Algorytm 2".

- Mamy daną symetryczną macierz A taką, że $a_{1,1} \neq 0$;
- Utwórz macierz P (patrz str.2);
- Zwróć macierz $P^T AP$.

Dwa ostatnie algorytmy wyliczają tę samą macierz. Wynika to z oczywistych równości

$$(P^T (P^T A)^T)^T = ((P^T AP)^T)^T = P^T AP.$$

Przeanalizujmy dokładniej te algorytmy.

3.1 Własności Algorytmu 2.

Chyba będzie trudno wykorzystać ten algorytm do zrobienia czegoś sensownego, ale jego analiza pozwala ustalić kilka interesujących faktów. Aby je sformułować powinniśmy wprowadzić niezbędne oznaczenia. Tak więc mamy daną symetryczną macierz A. W jej lewym, górnym rogu znajduje się niezerowy element $a_{1,1}$. Algorytm 2 przekształca tę macierz w macierz $B = P^T AP$ postaci

$$B = \begin{bmatrix} a_{1,1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & & & \\ \vdots & & B^0 & \\ 0 & & & \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{1,1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & & & \\ \vdots & & 0 & \\ 0 & & & \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & & & \\ \vdots & & B^0 & \\ 0 & & & \end{bmatrix} = B^1 + B^2.$$

Oczywiście, B^0 oznacza tutaj to, co zostało z macierzy B po usunięciu pierwszego wiersza i pierwszej kolumny, a B^1 i B^2 to odpowiednie składniki przeostatniego wyrazenia w powyższym wzorze. Poprawność tych definicji wynika z analizy algorytmu 2 podsumowanej w następującym fakcie:

Fakt 3.1 W lewym górnym rogu macierzy B znajduje się $a_{1,1}$. Pozostałe wyrazy pierwszego wiersza i pierwszej kolumny macierzy B są równe 0. Macierze B oraz B^0 są symetryczne. □

Przypomnijmy, że symbole A_i, B_i^0 i podobne oznaczają główne minory wskazanych macierzy. Z faktu 1.1 wynikają nastepujące własności wyznaczników takich minorów.

Fakt 3.2 Zachodzą następujące równości:

$$det(A_1) = det(B_1) \text{ oraz } det(A_{i+1}) = det(B_{i+1}) = a_{1,1} \cdot det(B_i^0). \ \Box$$

3.2 Dalsze własności związane z określonością

Fakt 3.3 Macierz A jest dodatnio określona wtedy i tylko wtedy, gdy macierz B jest dodatnio określona.

Dowód. Macierz P jest odwracalne, a więc przekształcenie przyporządkowujące X wektor PX jest permutacją zbioru niezerowych wektorów. Teza jest konsekwencją równości $X^TAX = X^TP^TBPX = (PX)^TB(PX)$. □

Fakt 3.4 Macierz B jest określona dodatnio wtedy i tylko wtedy, gdy $a_{1,1} > 0$ i macierz B^0 jest określona dodatnio.

Dowód. Najpierw zauważmy, że jeżeli $X = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$ oraz $Y = (x_2, \ldots, x_n)$, to

$$X^TBX = X^T(B_1 + B_2)X = X^TB_1X + X^TB_2X = a_{1,1} \cdot x_1 + Y^TB^0Y.$$

Przypuśćmy, że B jest określona dodatnio. Weźmy wektor niezerowy wektor e_1. Wtedy $e_1^TBe_1 = a_{1,1} > 0$. Pozostało zająć się drugą częścią tezy. Macierz B^0 ma wymiar o 1 mniejszy niż B. Weźmy więc niezerowy wektor Y o rozmiarze macierzy B^0 i utwórzmy wektor X dopisując na początku wektora Y dodatkową współrzędną równą 0. Wtedy $X \neq 0$ oraz

$$Y^TB^0Y = a_{1,1} \cdot 0^2 + Y^TB^0Y = X^TBX > 0.$$

Dla dowodu implikacji odwrotnej załóżmy, że $a_{1,1} > 0$ i macierz B^0 jest określona dodatnio. weźmy też niezerowy wektor X i utwórzmy – jak wyżej – wektor Y. Są możliwe dwa przypadki. Jeżeli $x_1 \neq 0$, to $Y^TB^0Y \geqslant 0$ oraz

$$X^TBX = a_{1,1} \cdot x_1 + Y^TB^0Y > 0.$$

Jeżeli $x_1 = 0$, to Y jest niezerowy i

$$X^TBX = a_{1,1} \cdot x_1 + Y^TB^0Y = Y^TB^0Y > 0.$$

W obu przypadkach $X^TBX > 0$, a to dowodzi, że macierz B jest określona dodatnio. □

3.3 Trochę o kryterium Silvestera

Poczynione spostrzeżenia pozwalają łatwo dowieść pierwszą część tzw. kryterium Silvestera.

Twierdzenie 3.5 (Silvester) *Jeżeli macierz A jest określona dodatnio, to wszystkie jej minory główne A_i mają dodatnie wyznaczniki.*

Dowód. Przez indukcję ze względu na rozmiar macierzy A. Twierdzenie jest oczywiste dla macierzy o rozmiarze 1.

Przypuśćmy, że A jest macierzą określoną dodatnio o wymiarach $(n+1) \times (n+1)$. Z faktu 3.3 wynika, że także macierz B jest określona dodatnio, a stąd i z faktu 3.4 – że liczba $a_{1,1}$ jest dodatnia. Jest jasne, że ta liczba jest wyznacznikiem minora $A_1 = [a_{1,1}]$.

Zajmijmy się więc minorami o większych indeksach. Z faktu 3.2 otrzymujemy, że $\det(A_{i+1}) = a_{1,1} \cdot det(B_i^0)$. Ten ostatni wyznacznik jest dodatni, ponieważ B^0 jest określoną dodatnio macierzą o wymiarach $n \times n$ i możemy dla niej skorzystać z założenia indukcyjnego. Tak więc wyznacznik minora A_{i+1} jest dodatni i to dla wszystkich możliwych i. □

4 Jeszcze bardziej skomplikowany algorytm

Algorytm 1 wykorzystamy teraz (podobnie jak w Algorytmie 2) do wyzerowania prawie całej danej macierzy i będziemy wykonywać go dla różnych wartości parametru k. W związku z tym macierz P ze strony 2 będziemy oznaczać symbolem P_k uwzględniając jej zależność od wartości k.
Algorytm 3.

Dana jest (symetryczna) macierz A o wymiarach $n \times n$.

- Niech Q będzie macierzą jednostkową i $k = 1$;
- Dopóki $k < n$ oraz $A[k,k] > 0$

  pod P podstaw macierz P_k zdefiniowaną na stronie 2;

  zastąp macierz A przez $P^T AP$, a macierz Q przez QP;

  zwiększ k o 1;

- Wynikami obliczeń są macierze A i Q oraz liczba k. Jeżeli $A[k,k] > 0$, to dana macierz jest dodatnio określona, w przeciwnym razie – nie jest.

Warunek $A[k,k] > 0$ w instrukcji *dopóki* w Algorytmie 3 jest dostosowany do przewidywanych zastosowań. Otrzymamy sensowne algorytmy, jeżeli zastąpimy go przez $A[k,k] \neq 0$ lub określimy jakoś działanie algorytmu wtedy, gdy $A[k,k] = 0$ (na przykład polecając przeniesienie k-tego wiersza i k-tej kolumny na koniec macierzy).

Pętla *dopóki* z podanego algorytmu ma sporo niezmienników. Należą do nich następujące stwierdzenia:

1) Zarówno w wierszach, jak i w kolumnach o indeksach $< k$, wszystkie elementy $A[i,j]$ o różnych indeksach (a więc poza przekątną), są równe 0;

2) Dla $i < k$ elementy $A[i, i]$ są dodatnie;

3) Macierz Q jest górnie trójkątna i odwracalna, a jej wyznacznik jest równy 1;

4) $A = Q^T A^0 Q$, gdzie A^0 oznacza początkową wartość macierzy (zmiennej) A;

5) Dla wszystkich $i \leqslant n$ wyznaczniki minorów A_i^0 oraz A_i mają równe wartości.

Niezmienniki te są prawdziwe w momencie uruchomienia Algorytmu 3, są zachowywane przez instrukcje wykonywane w pętli *dopóki* i w związku z tym, są prawdziwe po wykonaniu programu. Mam nadzieję, że nie sprawi kłopotu sprawdzenie, że rzeczywiście są to niezmienniki.

Lemat 4.1 *Jeżeli wyznaczniki wszystkich minorów głównych pewnej macierzy $n \times n$ są dodatnie, to Algorytm 3 uruchomiony z tą macierzą zatrzymuje się, gdy $k = n$ i A jest macierzą przekątniową z dodatnimi liczbami na przekątnej.*

Dowód. Przyjmijmy, że początkową wartością zmiennej A jest macierz A^0, zakładamy, że jej minory mają dodatnie wyznaczniki (a więc $det(A_i^0) > 0$ dla wszystkich $i \leqslant n$). Umówmy się także, że symbole A i k oznaczają zarówno zmienne, jak i końcowe wartości tych zmiennych.

W przypadku Algorytmu 3 po zakończeniu pętli nic więcej się nie dzieje i pozostają prawdziwe wszystkie wymienione wyżej niezmienniki pętli. Tak więc minor A_k jest macierzą przekątniową (na mocy niezmiennika 1). Jego wyznacznik jest iloczynem $\prod_{i=1}^{k} A[i, i] = A[k, k] \cdot \prod_{i=1}^{k-1} A[i, i]$. Z założenia i niezmiennika 5 wynika, że ten iloczyn jest dodatni, a z niezmiennika 2 – że dodatnim jest także iloczyn $\prod_{i=1}^{k-1} A[i, i]$. Stąd otrzymujemy, że $A[k, k] > 0$.

Algorytmu 3 kończy pracę, jeżeli albo $A[k, k] \leqslant 0$, albo $k = n$. W rozważanej sytuacji nie może zatrzymać się z pierwszego powodu. Tak więc końcową wartość k jest n, a końcową wartością A – jak to zostało wyżej ustalone – jest macierz diagonalna z dodatnimi wyrazami na przekątnej. $\square$

Wniosek 4.2 *Przy tych samych założeniach i oznaczeniach, z poprzedniego lematu otrzymujemy, że macierz A^0 jest postaci $Q^T AQ$, gdzie A jest macierzą przekątniową z dodatnimi wyrazami na przekątnej, a Q jest macierzą górnie trójkątną, odwracalną, o wyznaczniku 1, a także jest postaci $Q^T Q$ dla pewnej górnie trójkątnej macierzy odwracalnej Q.*

Dowód. Pierwsza część tezy wynika z poprzedniego lematu i z niezmiennika 4. Jeżeli $A = Q^T A^0 Q$ dla odwracalnej macierzy Q, to $A^0 = (Q^{-1})^T A Q^{-1}$. Druga część wynika z wzoru

$$\begin{bmatrix} a_{1,1} & & 0 \\ & a_{2,2} & \\ 0 & & \ddots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{a_{1,1}} & & 0 \\ & \sqrt{a_{2,2}} & \\ 0 & & \ddots \end{bmatrix}^2$$

słusznego dla macierzy przekątniowych z dodatnimi wyrazami na przekątnej. $\square$

Teraz możemy dowieść drugą część kryterium Silvestera.

Twierdzenie 4.3 (Kryterium Silvestera, druga implikacja) *Jeżeli wyznaczniki wszystkich minorów głównych macierzy są dodatnie, to macierz jest dodatnio określona.*

Dowód. Wynika to z powyższego wniosku. Wystarczy zauważyć, że jeżeli macierz Q jest odwracalna, to macierz $Q^T Q$ jest dodatnio określona ($X^T Q^T Q X = ||\, QX \,||^2$). $\square$

Twierdzenie 4.4 *Macierz A jest dodatnio określona wtedy i tylko wtedy, gdy istnieje górnie trójkątna macierz odwracalna Q taka, że $A = Q^T Q$.*