> zhuanlan.zhihu.com

这部分我们关注有正特征值的对称矩阵。如果对称性使得一个矩阵重要，那么所有特征值大于零这个额外属性则让这个矩阵真正特殊。但我们这里的特殊并不是稀少，事实上在各种应用中具有正特征值的对称矩阵非常常见，它们被称作**正定矩阵**。

我们可以通过检查特征值是否大于零来识别正定矩阵，但计算特征值是一项工作，当我们真正需要它们的时候我们可以进行计算，而如果我们仅仅想知道它们是否是正的，我们有更快的方式。

1. 正定矩阵的判断

首先，由于矩阵是对称的，所有的特征值自然都是实数。让我们以一个 2×2 的矩阵开始，

$$A=\begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix}$$

> A 的特征值是正的当且仅当 $a>0$ 并且 $ac-b^2>0$。

$$A_1=\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \text{ is \textit{not} positive definite because } ac-b^2=1-4<0$$

$$A_2=\begin{bmatrix} 1 & -2 \\ -2 & 6 \end{bmatrix} \text{ is positive definite because } a=1 \text{ and } ac-b^2=6-4>0$$

$$A_3=\begin{bmatrix} -1 & 2 \\ 2 & -6 \end{bmatrix} \text{ is \textit{not} positive definite (even with } \det A=+2\text{) because } a=-1$$

如果 2×2 矩阵的特征值 $\lambda_1>0$，$\lambda_2>0$，那么它们的乘积等于行列式，$\lambda_1\lambda_2=|A|=ac-b^2>0$，它们的和等于矩阵的迹，$\lambda_1+\lambda_2=a+c>0$，所以 a 和 c都必须是正的。

> A 的特征值是正的当且仅当主元是正的。

$$\begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} \xrightarrow[\text{The multiplier is } b/a]{\text{The first pivot is } a} \begin{bmatrix} a & b \\ 0 & c-\frac{b}{a}b \end{bmatrix} \quad \textbf{\textit{The second pivot is}} \; c-\frac{b^2}{a}=\frac{ac-b^2}{a}$$

这连接了线性代数的两大部分，**正的特征值意味着正的主元，反之亦然**。而且，主元往往比特征值计算得更快。

- 基于能量的定义

$$Ax = \lambda x \rightarrow x^T Ax = \lambda x^T x = \lambda ||x||^2 > 0$$

所以，如果特征值大于零，$x^T Ax$ 对于所有的特征向量也大于零。事实上，不仅仅是特征向量，针对任意非零向量 x，上式也同样成立。

> A 是正定的，如果有 $x^T Ax > 0$ 对任意非零向量都成立。

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} A \boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x & y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = ax^2 + 2bxy + cy^2 > 0$$

从这个定义中我们可以得出，**如果 A, B 是对称的正定矩阵，那么 $A + B$ 也是.**

> 如果 R 的列是不相关的，那么 $A = R^T R$ 是正定的。

$$x^T Ax = x^T R^T Rx = (Rx)^T Rx = ||Rx||^2$$

因为 R 的列是不相关的，所以针对任意非零向量 x，$Rx \neq \mathbf{0}$。

当一个对称的矩阵具有下列五个属性之一，那么它一定满足所有的属性。

1. 所有的 n 个主元是正的。
2. 所有的 n 个左上行列式是正的，也就是 $1 \times 1, 2 \times 2 \cdots n \times n$ 的行列式。
3. 所有的 n 个特征值是正的。
4. $x^T Ax > 0$ 除了零向量。
5. $A = R^T R$ 对于一个有着不相关列的矩阵 R。

2. 半正定矩阵

经常情况我们会在正定的边缘，行列式为零，最小的特征值为零，这些在边缘的矩阵被称为半正定矩阵。

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \end{bmatrix} \text{ and } B = \begin{bmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \end{bmatrix} \text{ are positive semidefinite.}$$

A 的特征值为 5 和 0，左上行列式为 1 和 0，它的秩为 1，可以被分解为具有相关列的矩阵 $R^T R$。

Dependent columns
Positive semidefinite

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = R^{\mathrm{T}} R.$$

如果将元素 4 增加一个任意小的数字，那么矩阵将会变成正定的。同样地，B 也可以写成 R^TR 的形式，但是 R 的列肯定是相关的。

Second differences A
from first differences $R^{\mathrm{T}}R$
Cyclic A from cyclic R

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}.$$

3. 第一个应用：椭圆 $ax^2+2bxy+cy^2=1$

1. 倾斜的椭圆和矩阵 A 联系在一起，$x^TAx=1$。
2. 排好的椭圆和矩阵 Λ 联系在一起，$X^T\Lambda X=1$。
3. 将椭圆排好的旋转矩阵则是特征向量矩阵 Q。

针对椭圆方程 $5x^2+8xy+5y^2=1$，我们有：

$$\begin{bmatrix} x & y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5 & 4 \\ 4 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = 1 \quad A = \begin{bmatrix} 5 & 4 \\ 4 & 5 \end{bmatrix}$$

将 A 分解为 $Q\Lambda Q^T$ 我们得到：

$$\begin{bmatrix} 5 & 4 \\ 4 & 5 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{9} & 0 \\ 0 & \mathbf{1} \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$$

椭圆方程则也可以重写为：

$$5x^2+8xy+5y^2=1=9*(\frac{x+y}{\sqrt{2}})^2+1*(\frac{x-y}{\sqrt{2}})^2$$

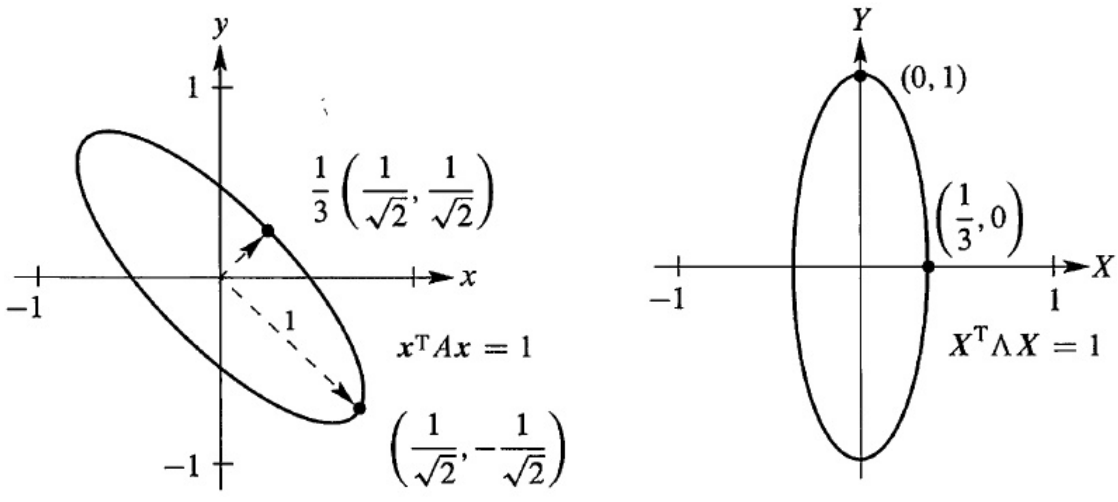

Figure 6.7: The tilted ellipse $5x^2+8xy+5y^2=1$. Lined up it is $9X^2+Y^2=1$.

可以看到，方程的系数是两个特征值 9 和 0，而在平方内部则是两个特征向量 $(1,1)/\sqrt{2}$ 和 $(1,-1)/\sqrt{2}$。椭圆的坐标轴是沿着特征向量的方向，这也就是为什么 $A=Q\Lambda Q^T$ 被称作**主轴定理**，特征向量指出了坐标轴的方向，特征值则指出了长度。

$$\textbf{Lined up} \quad \frac{x+y}{\sqrt{2}}=X \quad \text{and} \quad \frac{x-y}{\sqrt{2}}=Y \quad \text{and} \quad 9X^2+Y^2=1.$$

将椭圆排好后，较大的特征值 9 给出了短半轴的长度 $1/\sqrt{\lambda_1}=1/3$，较小的特征值 1 给出了长半轴的长度 $1/\sqrt{\lambda_2}=1$。在 xy 系统中，坐标轴沿着 A 的特征向量的方向，而在 XY 系统中，坐标轴沿着 Λ 的特征向量的方向。