> zhuanlan.zhihu.com

在众多的机器学习模型中，线性代数的身影无处不在，当然，我们也会时常碰到线性代数中的正定矩阵和半正定矩阵。例如，多元正态分布的协方差矩阵要求是半正定的。

1. 基本的定义

正定和半正定这两个词的英文分别是 positive definite 和 positive semi-definite，其中，definite 是一个形容词，表示 “明确的、确定的” 等意思。

初学线性代数的读者可能会被这两个词 “唬住”，但正定矩阵和半正定矩阵的定义实际上是很简单的(不考虑复数构成的矩阵)：

> 【定义 1】给定一个大小为 $n \times n$ 的实对称矩阵 A，若对于任意长度为 $\boldsymbol{n}$ 的非零向量 $\boldsymbol{x}$，有 $\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} > 0$ 恒成立，则矩阵 A 是一个正定矩阵。

【例 1】单位矩阵 $\boldsymbol{I} \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ 是否是正定矩阵?

解：设向量 $\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^2$ 为非零向量，则

$$\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{I} \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{x} = x_1^2 + x_2^2$$

由于 $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$，故 $\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{I} \boldsymbol{x} > 0$ 恒成立，即单位矩阵 $\boldsymbol{I} \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ 是正定矩阵。

> 单位矩阵是正定矩阵 (positive definite)。

【简单证明】对于任意单位矩阵 $\boldsymbol{I} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 而言，给定任意非零向量 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$，恒有

$$\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{I} \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{x}$$

$$= x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2 > 0$$

【例 2】实对称矩阵 $A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{3\times 3}$ 是否是正定矩阵?

解：设向量 $\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^3$ 为非零向量，则

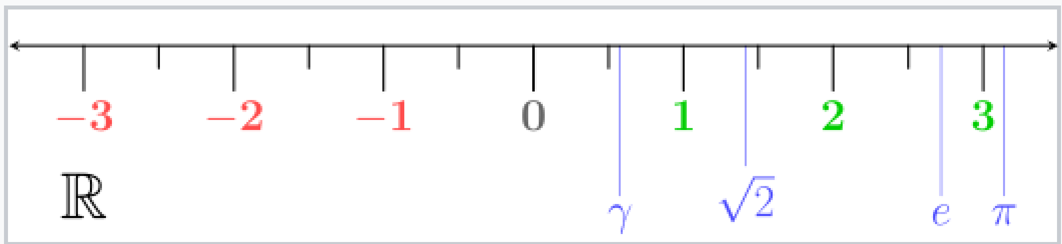
$$\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} (2x_1 - x_2) & (-x_1 + 2x_2 - x_3) & -x_2 + 2x_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}$$

$$= x_1^2 + (x_1 - x_2)^2 + (x_2 - x_3)^2 + x_3^2 > 0$$

因此，矩阵 A 是正定矩阵。

> 【定义 2】给定一个大小为 $n \times n$ 的实对称矩阵 A，若对于任意长度为 $\boldsymbol{n}$ 的向量 $\boldsymbol{x}$，有 $\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} \geq 0$ 恒成立，则矩阵 A 是一个半正定矩阵。

根据正定矩阵和半正定矩阵的定义，我们也会发现：半正定矩阵包括了正定矩阵，与非负实数 (non-negative real number) 和正实数 (positive real number) 之间的关系很像。

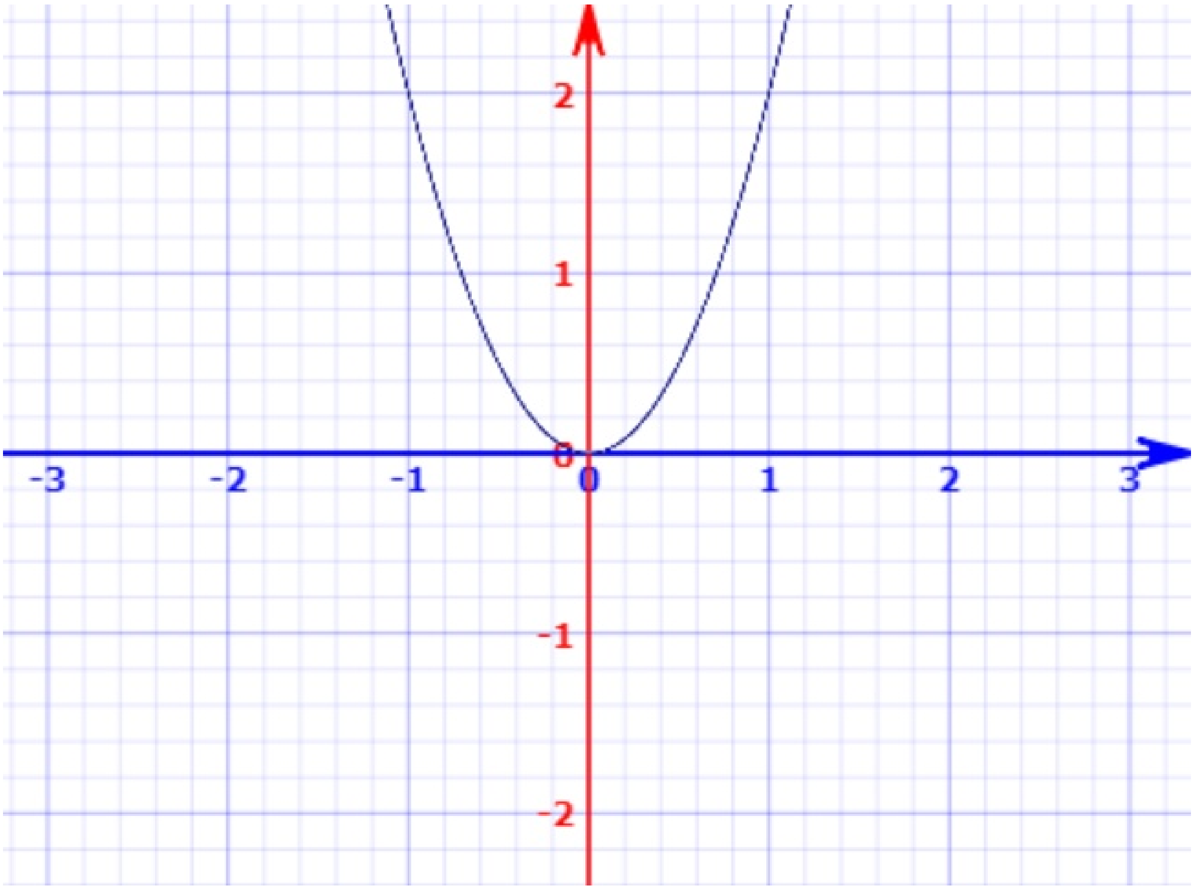


Real numbers can be thought of as points on an infinitely long number line

2. 从二次函数到正定 / 半正定矩阵

在初中数学中，我们学习了二次函数 $y = ax^2$，该函数的曲线会经过坐标原点，当参数 $a > 0$ 时，曲线的 “开口” 向上，参数 $a < 0$ 时，曲线的 “开口” 向下。

以 $y = 2x^2$ 为例，曲线如下：



实际上，我们可以将 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 视作 $y=ax^2$ 的多维表达式。

当我们希望 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\geq 0$ 对于任意向量 $\boldsymbol{x}$ 都恒成立，就要求矩阵 A 是一个半正定矩阵，对应于二次函数， $y=ax^2>0,\forall x$ 需要使得 $a\geq 0$.

另外，在 $y=ax^2$ 中，我们还知道：若 $a>0$ ，则对于任意 $x\neq 0$ ，有 $y>0$ 恒成立。

这在 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 也有契合之处，当矩阵 A 是正定矩阵时，对于任意 $\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}$， $y>0$ 恒成立。

3. 正定矩阵和半正定矩阵的直观解释

> 若给定任意一个正定矩阵 $A\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 和一个非零向量 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$ ，则两者相乘得到的向量 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$ 与向量 $\boldsymbol{x}$ 的夹角恒小于 $\dfrac{\pi}{2}$. (等价于： $\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}>0$.)

【例 3】给定向量 $\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}2\\1\end{bmatrix}\in\mathbb{R}^2$ ，对于单位矩阵 $\boldsymbol{I}=\begin{bmatrix}1&0\\0&1\end{bmatrix}\in\mathbb{R}^{2\times 2}$ ，则

$$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{I}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}2\\1\end{bmatrix}$$

向量 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^2$ 之间的夹角为

$$
\begin{aligned}
\cos\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle &= \frac{\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{y}}{||\boldsymbol{x}|| \cdot ||\boldsymbol{y}||} \\
&= \frac{2 \times 2 + 1 \times 1}{\sqrt{2^2 + 1^2} \cdot \sqrt{2^2 + 1^2}} \\
&= 1
\end{aligned}
$$

即两个向量之间的夹角为 0°.

【例 4】给定向量 $\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^3$ ，对于实对称矩阵
$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ ，则

$$
\boldsymbol{y} = A\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \end{bmatrix}
$$

向量 $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^2$ 之间的夹角为

$$
\cos\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle = \frac{\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{y}}{||\boldsymbol{x}|| \cdot ||\boldsymbol{y}||} = \frac{\sqrt{6}}{3}
$$

即两个向量之间的夹角小于 $\frac{\pi}{2}$.

> 若给定任意一个半正定矩阵 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 和一个向量 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ ，则两者相乘得到的向量 $\boldsymbol{y} = A\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ 与向量 $\boldsymbol{x}$ 的夹角恒小于或等于 $\frac{\pi}{2}$. (等价于： $\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} \geq 0$.)

3. 为什么协方差矩阵要是半正定的?

在概率论与数理统计中，我们都学习的协方差矩阵的定义：

> 对于任意多元随机变量 $\boldsymbol{t}$，协方差矩阵为
> $C = \mathbb{E}\left[(\boldsymbol{t} - \bar{\boldsymbol{t}})(\boldsymbol{t} - \bar{\boldsymbol{t}})^T\right]$

现给定任意一个向量 $\boldsymbol{x}$ ，则

$$\boldsymbol{x}^T C \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^T \mathbb{E}\left[(\boldsymbol{t}-\bar{\boldsymbol{t}})(\boldsymbol{t}-\bar{\boldsymbol{t}})^T\right]\boldsymbol{x}$$

$$= \mathbb{E}\left[\boldsymbol{x}^T(\boldsymbol{t}-\bar{\boldsymbol{t}})(\boldsymbol{t}-\bar{\boldsymbol{t}})^T\boldsymbol{x}\right]$$

$$= \mathbb{E}(\boldsymbol{s}^2) = \boldsymbol{\sigma}_s^2$$

其中，

$$\boldsymbol{\sigma}_s = \boldsymbol{x}^T(\boldsymbol{t}-\bar{\boldsymbol{t}}) = (\boldsymbol{t}-\bar{\boldsymbol{t}})^T\boldsymbol{x}$$

由于 $\boldsymbol{\sigma}_s^2 \geq 0$，因此，$\boldsymbol{x}^T C \boldsymbol{x} \geq 0$，协方差矩阵 C 是半正定的。

相关参考：

Positive-definite matrixen.wikipedia.org