

8.4 正定二次型

回忆. 设 A 是实对称矩阵, 则 A 是正定矩阵当且仅当对任意的非零列向量 $X \in \mathbb{R}^n$, 有 $X^T A X > 0$. 此时, 我们将之简记为 $A > 0$.

在这一节中, 我们所讨论的矩阵都约定为实矩阵.

定理 8.4.1. 设 A 为 n 阶实对称阵, 则以下几条等价:

- (1) $A > 0$;
- (2) A 的正惯性指数 $r = n$, 即 A 的相合标准形中主对角元全大于零;
- (3) A 的负惯性指数 $s = 0$ 且 $\text{rank}(A) = n$;
- (4) A 相合于单位方阵, 即存在 n 阶可逆矩阵 B 使得 $A = B^T B$;
- (5) 存在可逆上三角矩阵 R 使得 $A = R^T R$;^{*}
- (6) A 的所有特征值 (必为实数) 皆大于零;
- (7) 存在可逆上三角矩阵 R 使得 $A = R^T D R$, 其中 R 的对角线上的元素都是 1, 而 D 为对角矩阵, 其对角元素均为正的.

证明. 存在可逆阵 P 使得 $P^T A P = \begin{pmatrix} I_r & & \\ & -I_s & \\ & & O \end{pmatrix}$ 为 A 的规范形. 令 $Q(X) = X^T A X$.

“(1) \Leftarrow (2)”：若 $r = n$, 则 $P^T A P = I_n$. 考虑坐标变换 $X = P Y$, 则 $Q(X)|_{X=PY} = Y^T Y = \|Y\|^2$. 此时, 若 $X \neq 0$, 则 $Y \neq 0$, 从而 $\|Y\|^2 > 0$, 故 $Q(X) > 0$.

“(1) \Rightarrow (2)”：反设 $r \neq n$. 仍然令 $X = P Y$, 并选取 $Y_0 = (0, \dots, 0, 1)^T \neq 0$. 则 $X_0 = P Y_0 \neq 0$, 且

$$Q(X_0) = Q(X)|_{X=PY_0} = Y_0^T \begin{pmatrix} I_r & & \\ & -I_s & \\ & & O \end{pmatrix} Y_0.$$

^{*}这称为正定矩阵的**楚列斯基分解** (Cholesky decomposition).

由于对角阵 $\begin{pmatrix} I_r & & \\ & -I_s & \\ & & O \end{pmatrix}$ 的第 (n, n) 元素为 0 或 -1 , 从而相应地 $Q(\mathbf{X}_0) = 0$ 或 -1 , 故 \mathbf{A} 不是正定矩阵.

“(2) \Leftrightarrow (3)”：这是因为 $\text{rank}(\mathbf{A}) = r + s$.

“(2) \Leftrightarrow (4)”：利用 \mathbf{A} 的规范形.

“(4) \Leftrightarrow (5)”：我们只需要证明 “ \Rightarrow ”. 假定 $\mathbf{A} = \mathbf{B}^\top \mathbf{B}$, 其中 \mathbf{B} 为可逆矩阵. 由 QR 分解可知, 存在正交矩阵 \mathbf{Q} 与上三角矩阵 \mathbf{R} 使得 $\mathbf{B} = \mathbf{Q}\mathbf{R}$. 此时,

$$\mathbf{A} = \mathbf{B}^\top \mathbf{B} = (\mathbf{Q}\mathbf{R})^\top \mathbf{Q}\mathbf{R} = \mathbf{R}^\top \mathbf{Q}^\top \mathbf{Q}\mathbf{R} = \mathbf{R}^\top \mathbf{R}.$$

“(2) \Leftrightarrow (6)”：这是因为 r 是 \mathbf{A} 的特征值中正项的个数.

“(5) \Rightarrow (7)”：由条件, 存在可逆上三角矩阵 \mathbf{R}_0 使得 $\mathbf{A} = \mathbf{R}_0^\top \mathbf{R}_0$. 设 $\mathbf{R}_0 = (r_{ij})_{n \times n}$. 若取 $\mathbf{D} = \text{diag}(r_{11}^2, r_{22}^2, \dots, r_{nn}^2)$, 而 $\mathbf{R} = (q_{ij} := r_{ij}/r_{ii})_{n \times n}$, 不难直接验证, 这样的构造符合要求.

“(7) \Rightarrow (2)”：这是因为 \mathbf{A} 的正惯性指数与 \mathbf{D} 的正惯性指数一致, 皆为 n . □

在第七章中, 我们曾提到: 有限维欧氏空间的内积在任何一组基下的矩阵都是实对称的正定矩阵; 反过来, 给定一个 n 维实线性空间 V 和一个 n 阶的实对称正定矩阵 \mathbf{A} , 那么我们可以赋予 V 以内积结构, 使得该内积在某组基下的矩阵为指定的 \mathbf{A} . 下面, 我们再给一个相关的结果.

推论 8.4.2. 设 V 为 n 维欧氏空间, $\mathbf{G} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 为正定矩阵. 那么存在 V 的基 $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n$ 使得内积在这组基下的度量矩阵为 \mathbf{G} .

证明. 任取 V 的一组基 $\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_n$, 并设内积在这组基下的度量矩阵为 \mathbf{G}' . 由于 \mathbf{G} 和 \mathbf{G}' 都是正定的, 从而都相合于单位阵 \mathbf{I}_n . 于是, \mathbf{G} 相合于 \mathbf{G}' , 从而存在可逆矩阵 \mathbf{P} 使得 $\mathbf{P}^\top \mathbf{G}' \mathbf{P} = \mathbf{G}$. 此时, 不妨设 $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n$ 为 V 的一组基, 满足 $\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_n$ 到 $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n$ 的过渡矩阵为 \mathbf{P} . 不难看出, 内积在 $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n$ 下的度量矩阵为 \mathbf{G} . □

定理 8.4.3. 设 \mathbf{A} 为 n 阶实对称阵.

(1) 设 \mathbf{P} 为 n 阶可逆方阵, $\mathbf{B} = \mathbf{P}^\top \mathbf{A} \mathbf{P}$, 则 $\mathbf{A} > 0$ 当且仅当 $\mathbf{B} > 0$.

(2) 若 $\mathbf{A} > 0$, 则 $\det(\mathbf{A}) > 0$ 且 $\text{tr}(\mathbf{A}) > 0$.

(3) 若 $\mathbf{A} > 0$, 则 \mathbf{A} 可逆, 且 \mathbf{A}^{-1} 也是实对称的正定方阵.

证明. (1) \mathbf{A} 与 \mathbf{B} 相合等价, 从而有相同的正、负惯性指数.

(2) 一方面, $\det(\mathbf{A})$ 是 \mathbf{A} 的特征值之积, $\operatorname{tr}(\mathbf{A})$ 是 \mathbf{A} 的特征值之和. 另一方面, 由定理 8.4.1 已知, \mathbf{A} 的所有特征值都是正数.

(3) 由上, $\det(\mathbf{A}) \neq 0$, 从而 \mathbf{A} 可逆, 并且 $(\mathbf{A}^{-1})^{\top} = (\mathbf{A}^{\top})^{-1} = \mathbf{A}^{-1}$ 是实对称阵. \mathbf{A}^{-1} 的所有特征值是 \mathbf{A} 的相应特征值的逆, 皆为大于零的实数. 故 \mathbf{A}^{-1} 也是正定的. \square

例 8.4.4. 设 \mathbf{A} 是 n 阶可逆实对称矩阵. 证明: \mathbf{A} 是正定的充要条件是对于任意的同阶正定矩阵 \mathbf{B} , 有 $\operatorname{tr}(\mathbf{AB}) > 0$.

证明. 必要性. 设 \mathbf{A} 是一个正定矩阵. 任取一个同阶正定矩阵 \mathbf{B} , 则存在同阶可逆矩阵 \mathbf{C} 使得 $\mathbf{B} = \mathbf{C}^{\top}\mathbf{C}$. 此时,

$$\operatorname{tr}(\mathbf{AB}) = \operatorname{tr}(\mathbf{AC}^{\top}\mathbf{C}) = \operatorname{tr}(\mathbf{CAC}^{\top}).$$

由于 \mathbf{A} 是正定的, \mathbf{CAC}^{\top} 也是正定的, 从而 $\operatorname{tr}(\mathbf{CAC}^{\top}) > 0$.

充分性. 由于 \mathbf{A} 是实对称矩阵, 存在同阶正交矩阵 \mathbf{T} 使得

$$\mathbf{A} = \mathbf{T}^{-1} \operatorname{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) \mathbf{T},$$

其中 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n \in \mathbb{R}$ 为 \mathbf{A} 的全部特征值. 对于任意固定的 $i = 1, 2, \dots, n$, 考虑矩阵

$$\mathbf{B}_t = \mathbf{T}^{-1} \operatorname{diag}(t, \dots, t, 1, t, \dots, t) \mathbf{T},$$

其中的 1 在第 i 个位置上. 则对于任意的 $t > 0$, \mathbf{B}_t 是正定矩阵, 从而由条件知

$$0 < \operatorname{tr}(\mathbf{AB}_t) = \operatorname{tr}(\mathbf{T}^{-1} \operatorname{diag}(t\lambda_1, \dots, t\lambda_{i-1}, \lambda_i, t\lambda_{i+1}, \dots, t\lambda_n) \mathbf{T}) = \lambda_i + t \sum_{j \neq i} \lambda_j.$$

令 $t \rightarrow 0^+$, 我们得到 $\lambda_i \geq 0$. 又由于 \mathbf{A} 可逆, 故 $\lambda_i \neq 0$, 从而有 $\lambda_i > 0$. 再由 i 的任意性可知 \mathbf{A} 的所有特征值都严格大于零, 从而实对称阵 \mathbf{A} 是正定的. \square

定理 8.4.5. 设 \mathbf{A} 和 \mathbf{B} 是两个 n 阶实对称矩阵, 其中 \mathbf{A} 正定. 则存在可逆矩阵 \mathbf{P} 使得 $\mathbf{P}^{\top}\mathbf{AP} = \mathbf{I}_n$, 而 $\mathbf{P}^{\top}\mathbf{BP} = \mathbf{D}$ 为对角阵. 特别地, \mathbf{A} 和 \mathbf{B} 可以同时相合对角化.

证明. 由于 \mathbf{A} 正定, 存在可逆矩阵 \mathbf{P}_1 使得 $\mathbf{P}_1^{\top}\mathbf{AP}_1 = \mathbf{I}_n$. 此时, $\mathbf{B}_1 := \mathbf{P}_1^{\top}\mathbf{BP}_1$ 仍然为实对称阵, 故存在正交阵 \mathbf{P}_2 , 使得 \mathbf{B}_1 相似 (相合) 于对角阵: $\mathbf{D} := \mathbf{P}_2^{\top}\mathbf{B}_1\mathbf{P}_2$ 为对角阵. 若令 $\mathbf{P} = \mathbf{P}_1\mathbf{P}_2$, 则 $\mathbf{P}^{\top}\mathbf{AP} = \mathbf{I}$ 且 $\mathbf{P}^{\top}\mathbf{BP} = \mathbf{D}$. \square

例 8.4.6. 设 \mathbf{A}, \mathbf{B} 均为 n 阶实对称的正定阵, 若 $\mathbf{A} - \mathbf{B}$ 正定, 证明: $\mathbf{B}^{-1} - \mathbf{A}^{-1}$ 也是正定阵.

证明. 因为 A 为正定阵, 由定理 8.4.5 可知, 存在可逆方阵 P 使得 $P^TAP = I_n$, 而 $D := P^TBP = \text{diag}(\mu_1, \dots, \mu_n)$ 为对角阵. 又由于 B 是正定的, 故其中每个 $\mu_i > 0$. 由于 $A - B$ 为正定阵, 故 $P^T(A - B)P = I - D = \text{diag}(1 - \mu_1, 1 - \mu_2, \dots, 1 - \mu_n)$ 也是正定阵, 这说明每个 $\mu_i < 1$. 此时, $P^{-1}(B^{-1} - A^{-1})(P^{-1})^T = D^{-1} - I = \text{diag}(\mu_1^{-1} - 1, \mu_2^{-1} - 1, \dots, \mu_n^{-1} - 1)$. 由于每个 $\mu_i^{-1} - 1 > 0$, 该实对称阵正定, 从而在相合变换后, $B^{-1} - A^{-1}$ 也是正定的. \square

例 8.4.7. 设 A, B 均为 n 阶实对称阵, 且 A 正定. 证明: 当实数 t 充分大时, $tA + B$ 也是正定阵.

证明. 因为 A 为正定阵, 存在可逆方阵 P 使得 $P^TAP = I_n$, 而 $P^TBP = D = \text{diag}(\mu_1, \dots, \mu_n)$. 此时, $P^T(tA + B)P = tI_n + D = \text{diag}(t + \mu_1, t + \mu_2, \dots, t + \mu_n)$. 显然, 当 $t > \max\{-\mu_1, -\mu_2, \dots, -\mu_n\}$ 时, $tA + B$ 是正定的. \square

定义 8.4.8. 对于二次型 $Q(x_1, \dots, x_n) = \sum_{i,j=1}^n a_{ij}x_ix_j = X^TAX$, 若 A 为正定阵, 则称 Q 为正定的 (positive definite).

例 8.4.9. $Q_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2$ 是正定的二次型, 而当 $r < n$ 时, $Q_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_r^2$ 不是正定的二次型, 这是因为 $Q(0, 0, \dots, 0, 1) = 0$.

推论 8.4.10. 二次型经过可逆的线性变换, 其正定性不变.

证明. 这是因为二次型经过可逆的线性变换得到的矩阵与原矩阵是相合的. \square

研究二次型的正定性就是研究其对应矩阵的正定性, 与之相关的最实用的条件是以下的定理.

定理 8.4.11. n 阶实对称阵 A 是正定阵的充要条件是 A 的各阶顺序主子式均大于零, 即对任意的 $r = 1, 2, \dots, n$ 有

$$\begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1r} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{r1} & \cdots & a_{rr} \end{vmatrix} > 0.$$

(注意: 这儿只需验证 n 个子阵的行列式, 不是所有的主子式.)

证明. 必要性. 对于任意的 $r = 1, 2, \dots, n$, 我们考察 r 个变元的二次型

$$Q_r(x_1, \dots, x_r) := Q(x_1, \dots, x_r, 0, \dots, 0) = \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^r a_{ij}x_ix_j.$$

显然, 若 x_1, \dots, x_r 不全为零, 则 $(x_1, \dots, x_r, 0, \dots, 0) \neq \mathbf{0}$, 故

$$Q_r(x_1, \dots, x_r) = Q(x_1, \dots, x_r, 0, \dots, 0) > 0.$$

这等价于说 Q_r 是变元 x_1, \dots, x_r 上的正定实二次型. 它对应的方阵

$$\mathbf{A}_r = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1r} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{r1} & \cdots & a_{rr} \end{pmatrix}$$

是 r 阶实正定方阵, 故由定理 8.4.3 可知 $|\mathbf{A}_r| > 0$.

充分性. 我们关于阶数 n 作归纳. $n = 1$ 时显然成立. 接下来假设 $n - 1$ 时结论成立, 考虑 n 时的情形.

$$\mathbf{A} = \left(\begin{array}{ccc|c} a_{1,1} & \cdots & a_{1,n-1} & a_{1,n} \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{n-1,1} & \cdots & a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \\ \hline a_{n,1} & \cdots & a_{n,n-1} & a_{n,n} \end{array} \right) = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{n-1} & \mathbf{c} \\ \mathbf{c}^\top & a_{n,n} \end{pmatrix}.$$

其中 \mathbf{A}_{n-1} 是 $n - 1$ 阶实对称方阵. 由条件, \mathbf{A}_{n-1} 的各阶顺序主子式也都大于 0, 故由归纳假设可知, $\mathbf{A}_{n-1} > 0$. 此时, 由定理 8.4.1 可知, 存在可逆矩阵 \mathbf{P}_{n-1} 使得 $\mathbf{P}_{n-1}^\top \mathbf{A}_{n-1} \mathbf{P}_{n-1} = \mathbf{I}_{n-1}$. 此时, 对于 \mathbf{A} 我们有相合变换

$$\begin{pmatrix} \mathbf{P}_{n-1} & \\ & 1 \end{pmatrix}^\top \underbrace{\begin{pmatrix} \mathbf{A}_{n-1} & \mathbf{c} \\ \mathbf{c}^\top & a_{n,n} \end{pmatrix}}_{\mathbf{A}} \begin{pmatrix} \mathbf{P}_{n-1} & \\ & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{P}_{n-1}^\top \mathbf{A}_{n-1} \mathbf{P}_{n-1} & \mathbf{P}_{n-1}^\top \mathbf{c} \\ \mathbf{c}^\top \mathbf{P}_{n-1} & a_{n,n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_{n-1} & \mathbf{P}_{n-1}^\top \mathbf{c} \\ \mathbf{c}^\top \mathbf{P}_{n-1} & a_{n,n} \end{pmatrix}.$$

接下来, 我们继续操作相合变换, 利用左上角的 \mathbf{I}_{n-1} 将右上角的 $\mathbf{P}_{n-1}^\top \mathbf{c}$ 消去, 这等价于说整个 n 阶方阵首先右乘 $\begin{pmatrix} \mathbf{I}_{n-1} & -\mathbf{P}_{n-1}^\top \mathbf{c} \\ \mathbf{0} & 1 \end{pmatrix}$. 从而整个相合变换为

$$\begin{pmatrix} \mathbf{I}_{n-1} & -\mathbf{P}_{n-1}^\top \mathbf{c} \\ \mathbf{0} & 1 \end{pmatrix}^\top \begin{pmatrix} \mathbf{I}_{n-1} & \mathbf{P}_{n-1}^\top \mathbf{c} \\ \mathbf{c}^\top \mathbf{P}_{n-1} & a_{n,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I}_{n-1} & -\mathbf{P}_{n-1}^\top \mathbf{c} \\ \mathbf{0} & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_{n-1} & \\ & \underbrace{a_{n,n} - \mathbf{c}^\top \mathbf{P}_{n-1} \mathbf{P}_{n-1}^\top \mathbf{c}}_{\text{记作 } a} \end{pmatrix}.$$

接下来, 利用

- 条件: $|\mathbf{A}| > 0$;
- 事实: 相合变换不改变实矩阵的行列式的正负号.

因此, 最后得到的方阵的行列式 $\begin{vmatrix} \mathbf{I}_{n-1} & \\ & a \end{vmatrix} = a > 0$. 由于 $\begin{pmatrix} \mathbf{I}_{n-1} & \\ & a \end{pmatrix}$ 是 \mathbf{A} 的一个标准形, 这说明 \mathbf{A} 的正惯性指数为 n , 从而 $\mathbf{A} > 0$. \square

例 8.4.12. 判断二次型 $Q(x_1, x_2, x_3) = 2x_1^2 + 2x_2^2 + x_3^2 - 2x_1x_2 - 2x_1x_3 - 2x_2x_3$ 是否正定.

解. 二次型的矩阵为 $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$. 由于各阶顺序主子式依次为 $2 > 0$, $\begin{vmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{vmatrix} = 3 > 0$, $|\mathbf{A}| = -3 < 0$, \mathbf{A} 不是正定的, 从而二次型 Q 不是正定的. \square

对上面的定理 8.4.11 的必要性部分的证明稍作修改, 我们不难看出如下的结果.

推论 8.4.13. 设 \mathbf{A} 是一个 n 阶正定的实对称矩阵, $1 \leq i_1 < i_2 < \cdots < i_r \leq n$, 那么由 \mathbf{A} 的第 i_1, i_2, \dots, i_r 行第 i_1, i_2, \dots, i_r 列元素构成的 r 阶主子阵 $\mathbf{A} \begin{pmatrix} i_1 & i_2 & \cdots & i_r \\ i_1 & i_2 & \cdots & i_r \end{pmatrix}$ 是一个 r 阶的正定矩阵. 特别地, 它的行列式是正的.