城市交通数据分析 原创
2019/03/05 14:54

浅谈「正定矩阵」和「半正定矩阵」

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 n 的非零向量 $\boldsymbol{x}$ ，有 $\boldsymbol{x}^TA\boldsymbol{x}>0$ 恒成立，则矩阵 A 是一个正定矩阵。

【例1】单位矩阵 $I\in\mathbb{R}^{2\times 2}$ 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 $\boldsymbol{x}^TI\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x}=x_1^2+x_2^2$

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

> 单位矩阵是正定矩阵 (positive definite)。

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

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

【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

$$\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} = \left[(2x_1 - x_2) \quad (-x_1 + 2x_2 - x_3) \quad -x_2 + 2x_3 \right] \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}$$

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

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 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。

图1 正实数与负实数，图片来源于https://en.wikipedia.org/wiki/Real_number

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：

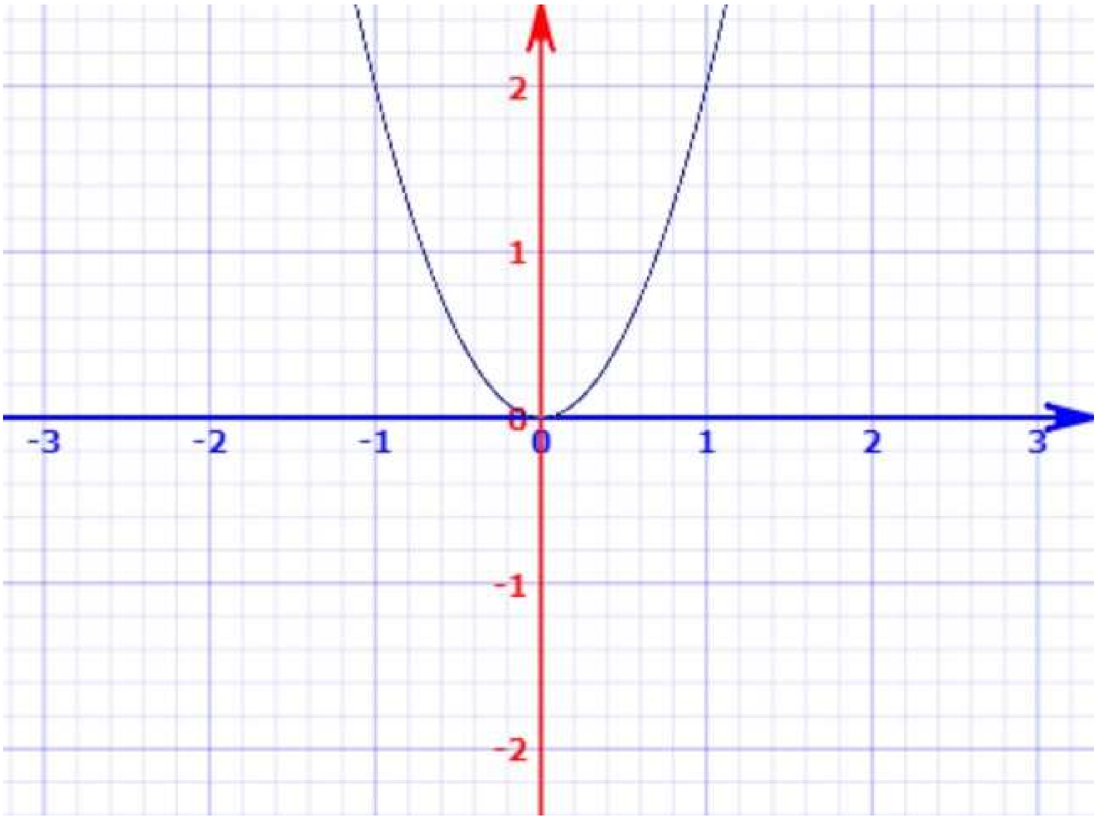


图2 二次函数曲线

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

当我们希望 $y = \boldsymbol{x}^T A\boldsymbol{x} \geq 0$ 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。

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 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 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 $\frac{\pi}{2}$. (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

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

$$= \frac{2 \times 2 + 1 \times 1}{\sqrt{2^2 + 1^2} \cdot \sqrt{2^2 + 1^2}}$$

$$= 1$$

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

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

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

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

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

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

$$= \mathbb{E}(s^2) = \sigma_s^2$$

其中，

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

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

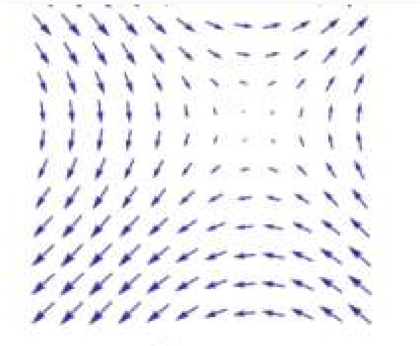
相关参考：

城市交通数据分析

Machine learning for urban traffic data analytics.

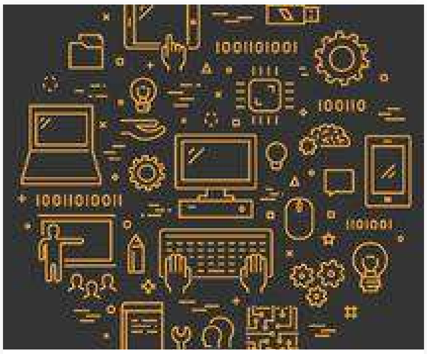
入门 4 2

推荐文章



基础入门：深度学习矩阵运算的概念和代码实现

思源 2



源自斯坦福CS229，机器学习备忘录在集结

机器之心 7

基于PaddlePaddle的词向量实战 | 深度学习基础任务...

PaddlePaddle 2

登录 后评论

Chris

你有一个错误，在举矩阵的例子时，错将半正定写成了正定，因为大于等于零是半正定的

cy69855522