国 防 科 技 大 学 学 报
JOURNAL OF NATIONAL UNIVERSITY OF DEFENSE TECHNOLOGY
第 18 卷第 3 期　1996 年 9 月　Vol. 18 No. 3

判断实对称矩阵为正定、半正定、负定、半负定或不定的一个算法*

胡庆军
（国防科技大学系统工程与数学系　长沙　410073）

摘　要　给出判别实对称矩阵为正定、半正定、负定、半负定或不定的一个算法；采用选最大对角元的方法，可使数值计算稳定性好。讨论了该算法的运算量，得到乘除法和加减法总次数分别至多为 $n(n-1)(n+4)/6$ 和 $n(n-1)(n+1)/6$ 的结论。最后给出运行该算法的数值例子。

关键词　实对称矩阵，类型，判别算法，运算量
分类号　O151.21

A Algorithm for Distinguishing a Real Symmetric Matrix into a Positive (Semi-) Definite, Negative (Semi-) Definite or Non-definite Matrix

Hu Qingjun
(Department of Systems Engineering and Mathematics, NUDT, Changsha, 410073)

Abstract　This paper presents a algorithm for distinguishing a real symmetric matrix into a positive definite, positive semidefinite, negative definite, negative semidefinite or non-definite matrix. With the technique of selecting maximum diagonal element, the stability of numerical computation for the algorithm is good. The operation numbers of the algorithm is given and the total number of operations of muitiplication or division and addition or subtraction of the algorithm are, respectively, at most $\frac{1}{6}n\ (n-1)\ (n+4)$ and $\frac{1}{6}n\ (n-1)\ (n+1)$. The numerical examples are given.

Key words　real symmetric matrix, type, distinguishing algorithm, operation numbers

---

* 1996 年 1 月 13 日收稿

实对称矩阵从二次型的角度来分，有五种类型[1]：正定、半正定、负定、半负定及不定。在数值分析与计算中，若已知矩阵为某一类型，则自然采用优良的计算方法。如线性方程组的求解，若已知矩阵正定，则有 Cholesky 分解法、松驰迭代法[2]等。又如最优化问题中的共扼梯度法[3]要求是正定矩阵。再如在二次型的讨论中，若已知矩阵的类型，则有利于分析二次型的有关性质。总之，判断一个实对称矩阵为上述的某种类型，这在实际工作中是很有必要的。

实对称矩阵的有定及不定的定义见文献[1]。下面五条是有关实对称矩阵 A 正定（半正定）的等价形式[1]。(1) A 是正定（半正定）矩阵；(2) 对于满秩矩阵 P，$P'AP$ 是正定（半正定）矩阵；(3) A 的一切主子式大于 0（一切主子式非负，且 $|A|=0$）；(4) 存在同阶矩阵 L，使 $A=LL'$，且 $|L|\neq 0$（$|L|=0$）；(5) A 的特征根均大于 0（均非负）。

注意到若 $-A$ 正定（半正定），则 A 负定（半负定）。因此，负定、半负定矩阵将有类似的等价形式。

从实用和计算量小的角度来讲，判定实对称矩阵类型的方法甚少。Cholesky 分解法[2]只能判断一个实对称矩阵是否为正定矩阵，而不能判断是否为半正定、半负定或不定。当矩阵（特别是大型矩阵）不是正定时，其数值计算可能不稳定。本文从上面的条件（2）出发，给出矩阵正定（半正定）的等价条件，提出判定实对称矩阵为正定、半正定、负定、半负定或不定的一个算法。

1 理论依据

引理 1 若实对称矩阵 A 正定（半正定），则 A 的对角元均大于 0（均非负）。

引理 2 设实对称矩阵 A 的对角元均为 0，若存在非对角元不为 0，则 A 必为不定矩阵。

引理 3 设 $A=(a_{ij})_{n\times n}=A'$，且 $a_{11}\neq 0$。记

$$B=(b_{kl})_{(n-1)\times(n-1)}$$

$$b_{kl}=a_{kl}-a_{k1}a_{1l}/a_{11};\ k、l=2,3,\cdots,n$$

则

$$\begin{pmatrix} 1 & & & \\ -\dfrac{a_{21}}{a_{11}} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ -\dfrac{a_{n1}}{a_{11}} & & & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & -\dfrac{a_{12}}{a_{11}} & \cdots & -\dfrac{a_{1n}}{a_{11}} \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{pmatrix}=\left(\begin{array}{c:c} a_{11} & 0 \\ \hdashline 0 & B \end{array}\right)$$

定理 1 设 $A=(a_{ij})_{n\times n}=A'$，且 $a_{11}>0$，则

(1) A 正定（半正定）的充要条件是 B 正定（半正定）；

(2) $rk(A)=1+rk(B)$. 其中 $rk(A)$表示 A 的秩。

引理 1～3 易证，略。定理 1 由引理 3 得。

记 $A^{(0)}=(a_{kl}^{(0)})_{n\times n}=A$，对于 $i=1,2,\cdots$，至多 $n-1$，找出最大对角元 $a_{j_ij_i}^{(i-1)}$，即

$$a_{j_ij_i}^{(i-1)}=\max_{i\leqslant j\leqslant n}a_{jj}^{(i-1)} \tag{1}$$

若 $a_{j_ij_i}^{(i-1)}>0$，将 $A^{(i-1)}$的第 i 行(列)分别与第 j_i 行(列)对调后(若 $j_i=i$，则此步略)记为 $\widetilde{A}^{(i-1)}=(\widetilde{a}_{kl}^{(i-1)})_{n\times n}$，令

$$A^{(i)} = (a_{kl}^{(i)})_{n\times n} \tag{2}$$

其中

$$a_{kl}^{(i)} = \begin{cases} \widetilde{a}_{kl}^{(i-1)} - \widetilde{a}_{ki}^{(i-1)} \cdot \widetilde{a}_{il}^{(i-1)}/\widetilde{a}_{ii}^{(i-1)}, & k、l = i+1,\cdots,n \\ \widetilde{a}_{kl}^{(i-1)}, & \text{其它} \end{cases} \tag{3}$$

记

$$B^{(i)} = (a_{kl}^{(i)})_{(n-i)\times(n-i)},\ k、l = i+1,\cdots,n \tag{4}$$

注意到若 $a_{j_ij_i}^{(i-1)}>0$，$i=1,2,\cdots$，则由 $A^{(i-1)}$可形成 $A^{(i)}$，且由 A 的对称性知由(2)、(3)式确定的 $A^{(i)}$均是对称矩阵。而由 $A^{(i-1)}$变换到 $A^{(i)}$实际只需$\frac{1}{2}(n-i)(n-i+3)$次乘或除法和$\frac{1}{2}(n-i)(n-i+1)$次加减法运算(这里用到矩阵对称性及运算技巧)。上面的 $B^{(i)}$类似于定理 1 中的矩阵 B(实际上 $B^{(1)}$是定理 1 中的 B)，$B^{(i)}$是 $n-i$ 阶对称矩阵。

定理 2 若 $a_{j_ij_i}^{(i-1)}>0$，$i=1,2,\cdots,n-1$，则由(2)、(3)式变换形成 $A^{(1)}$，$A^{(2)}$，…，$A^{(n-1)}$所需乘除法总次数 M_u 和加减法总次数 A_d 分别为

$$M_u = \frac{1}{6}n(n-1)(n+4),\ A_d = \frac{1}{6}n(n-1)(n+1)$$

证明 由上面分析知

$$M_u = \sum_{i=1}^{n-1}\frac{1}{2}(n-i)(n-i+3),\ A_d = \sum_{i=1}^{n-1}\frac{1}{2}(n-i)(n-i+1)$$

化简上面式子即得证。

定理 3 设 $B^{(i)}$由(4)式定义，若 $a_{j_ij_i}^{(i-1)}>0$，则

(1) $B^{(i-1)}$正定(半正定)的充要条件是 $B^{(i)}$正定（半正定)；

(2) $rk(B^{(i-1)})=1+rk(B^{(i)})$。

定理 4 矩阵 A 正定的充要条件是 $a_{j_ij_i}^{(i-1)}>0$，$i=1,2,\cdots,n$.

将定理 1 中的 A、B 分别换成 $B^{(i-1)}$、$B^{(i)}$，即得定理 3 的结论。再由定理 1 及 3 即得定理 4。

定理 5 矩阵 A 半正定的充要条件是存在非负整数 $r(<n)$，使 $a_{j_ij_i}^{(i-1)}>0$，$i=1,2,\cdots,r$，且 $B^{(r)}=0$. 这时有 $rk(A)=r$.

证明 由定理 1 和 3 即可证得该定理的充要条件成立。再由定理 1 及 3 知

$$rk(A) = 1 + rk(B) = 1 + rk(B^{(1)})$$

$$rk(B^{(i-1)}) = 1 + rk(B^{(i)}),\ i = 2,3,\cdots,r$$

$$rk(A) = 1 + rk(B^{(1)}) = 2 + rk(B^{(2)}) = \cdots = r + rk(B^{(r)}) = r$$。证毕。

2 算 法

根据(1)、(2)和(3)式及定理和引理，下面构造判定实对称矩阵为正定、半正定、负定、半负定及不定的算法。其算法步骤如下：

(1) 赋值 $A=(a_{st})_{n\times n}$(实对称)，$1\Rightarrow i$.

(2) 找 $j,k(i\leqslant j,\ k\leqslant n)$，使

$$a_{jj}=\max_{i\leqslant l\leqslant n}a_{ll},\ a_{kk}=\min_{i\leqslant l\leqslant n}a_{ll}.$$

(3) 若 $i=1$，则转向(4)；若 $1<i<n$，则转向(5)；若 $i=n$，则转向(8).

(4) 若 $a_{jj}>0$ 且 $a_{kk}\geqslant 0$，则转向(7)；若 $a_{jj}>0$ 且 $a_{kk}<0$，则算法结束(见注 1)；若 $a_{jj}=a_{kk}=0$，则转向(6)；否则，$-A\Rightarrow A$，转向(2)（见注 4)。

(5) 若 $a_{kk}<0$，则算法结束（见注 1)；若 $a_{kk}\geqslant 0$ 且 $a_{jj}=0$，则转向(6)；若 $a_{kk}\geqslant 0$ 且 $a_{jj}>0$，则转向(7)。

(6) 若存在非对角元 $a_{st}\neq 0$（$i\leqslant s<t\leqslant n$)，则算法结束（见注 1)；否则，算法结束(见注 2)。

(7) 将 A 的第 i 行（列）分别与第 j 行（列）对调，得

$$a_{st}-\frac{a_{is}\cdot a_{it}}{a_{ii}}\Rightarrow a_{st};\ s\leqslant t,\ s、t=i+1,\cdots,n$$

$i+1\Rightarrow i$，然后转向(2)。

(8) 若 $a_{jj}<0$，则算法结束（见注 1)；若 $a_{jj}=0$，则算法结束（见注 2)；若 $a_{jj}>0$，则算法结束（见注 3)。

注 1　A 为不定矩阵（引理 1、2 和定理 3)。

注 2　A 为半正定矩阵($A\geqslant 0$)，且 $rk(A)=i-1$（定理 5)。

注 3　A 为正定矩阵（定理 4)，即 $A>0$。

注 4　若经过此步，则所得结论相应为 A 是不定矩阵、半负定或负定矩阵。

注 5　本文算法简单，便于实施，运算量主要在步(7). 由定理 2 知，判定一个实对称矩阵的正定、半正定、负定或半负定性至多需 $\frac{1}{6}n(n-1)(n+4)$ 次乘除法，$\frac{1}{6}n(n-1)(n+1)$ 次加减法运算，另加上对角元中找最（大、小）值的运算量。步(2)的找最大值工作(若 A 的确为正定、半正定矩阵，则对角元中选最大值等价于全矩阵元素中选最大值）是以保证算法（步(7)）的数值计算稳定性好（即计算舍入误差小）为前提的，找最小值的目的是希望尽可能快地判出不定矩阵（若的确为不定矩阵）以减少计算量。同时该算法能指出半正定、半负定矩阵的秩。

3　数值例子

下面给出 4 个例子以验证本文算法的可行性和合理性。例 1～3 说明算法的实施过程和判断结论（可用主子式>0 或行列初等变换直接验证有关结论)。其中“*”部分表示在变换中不改变（即不作运算)，由于对称矩阵，故下三角部分也不作运算。带“～～”的元素为最大值元素。例 4 表示算法的计算时间。

例 1　对于矩阵 A，用本文算法，则

$$A^{(0)}=A=\begin{pmatrix}1&-2&2&-3&0\\-2&6&-6&4&-4\\2&-6&42&44&16\\-3&4&44&\underset{\sim}{87}&14\\0&-4&16&14&31\end{pmatrix}\rightarrow\widetilde{A}^{(0)}=\begin{pmatrix}\underset{\sim}{87}&4&44&-3&14\\ *&6&-6&-2&-4\\ *&*&42&2&16\\ *&*&*&1&0\\ *&*&*&*&31\end{pmatrix}$$

$$\rightarrow A^{(1)}=\begin{bmatrix} * & * & * & * & * \\ * & 5.816 & -8.023 & -1.862 & -4.644 \\ * & * & 19.747 & 3.517 & 8.920 \\ * & * & * & 0.897 & 0.483 \\ * & * & * & * & 28.747 \end{bmatrix}$$

$$\rightarrow \widetilde{A}^{(1)}=\begin{bmatrix} * & * & * & * & * \\ * & 28.747 & 8.920 & 0.483 & -4.644 \\ * & * & 19.747 & 3.517 & -8.023 \\ * & * & * & 0.897 & -1.862 \\ * & * & * & * & 5.816 \end{bmatrix}$$

$$\rightarrow A^{(2)}=\begin{bmatrix} * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ * & * & 16.979 & 3.367 & -6.582 \\ * & * & * & 0.889 & -1.784 \\ * & * & * & * & 5.066 \end{bmatrix}\rightarrow A^{(3)}=\begin{bmatrix} * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ * & * & * & 0.221 & -0.479 \\ * & * & * & * & 2.514 \end{bmatrix}$$

$$\rightarrow \widetilde{A}^{(3)}=\begin{bmatrix} * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ * & * & * & 2.514 & 0.479 \\ * & * & * & * & 0.221 \end{bmatrix}\rightarrow A^{(4)}=\begin{bmatrix} * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & 0.130 \end{bmatrix}$$

由此得到 $a_{j_ij_i}^{(i-1)}>0$，$i=1,2,3,4,5$，则由算法步(8)及注 3 知 A 为正定矩阵。

例 2 对如下的矩阵 A，若用本文算法，则($\widetilde{A}^{(i)}$省略不显示)

$$A^{(0)}=A=\begin{bmatrix} 1 & -2 & 3 & -3 & 0 \\ -2 & 4 & -4 & 6 & 0 \\ 2 & -4 & 40 & -18 & 12 \\ -3 & 6 & -18 & 13 & -4 \\ 0 & 0 & 12 & -4 & 20 \end{bmatrix}\rightarrow A^{(1)}=\begin{bmatrix} * & * & * & * & * \\ * & 3.6 & -1.8 & 4.2 & 1.2 \\ * & * & 0.9 & -2.1 & -0.6 \\ * & * & * & 4.9 & 1.4 \\ * & * & * & * & 16.4 \end{bmatrix}$$

$$\rightarrow A^{(2)}=\begin{bmatrix} * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ * & * & 0.878 & -2.049 & -1.756 \\ * & * & * & 4.780 & 4.098 \\ * & * & * & * & 3.512 \end{bmatrix}\rightarrow A^{(3)}=\begin{bmatrix} * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ * & * & * & 0.000 & 0.000 \\ * & * & * & 0.000 & 0.000 \end{bmatrix}$$

由此得 $a_{j_ij_i}^{(i-1)}>0$，$i=1,2,3$。由算法步(6)及注 2 知 $A\geqslant 0$，且 $rk(A)=3$。

例 3 矩阵 A 如下，用本文算法，则

$$A^{(0)}=A=\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1.5 & -1 \\ 1 & 2 & -2 & 0.3 \\ 1.5 & -2 & 2.5 & 0.5 \\ -1 & 0.3 & 0.5 & 1.5 \end{bmatrix}\rightarrow A^{(1)}=\begin{bmatrix} * & * & * & * \\ * & 0.4 & 2.2 & 0.7 \\ * & * & 0.1 & -1.3 \\ * & * & * & 1.4 \end{bmatrix}$$

(下转第 156 页)

$\simeq 0$。不难证明$({}^*X/\sim_s,\hat{s})$为完备度量空间，但$({}^*X/\sim_s,\hat{s})$一般不为 X 的完备化空间。

定理 5 若 X 是全有界的距离空间，则$({}^*X/\sim_s,\hat{s})$为 X 的紧扩张。

证明 由定理 2 知，$s\subset {}^*\tau$，故${}^*X$ 关于 s—拓扑是紧的，从而$({}^*X/\sim_{C_s},\hat{s})$为紧空间。由于任一 s—邻域中含有 X 中的点，故 X 在$({}^*X/\sim s,\hat{s})$中稠。

参 考 文 献

1 Luxembury W A J. A General theory of monads, in Applications of Model Theory to Algebra, Analysis and Probability. W A J Luxembury (ed.) Holt, Rinchart and Winston (New York), 1969: 18—86

2 Kelly J L. General Topology. Van Nostrand, 1995

3 冯汉桥（译）. 应用非标准分析. 西安：陕西师范大学出版社

4 Robinson A. Nonstandard Analysis. Norty-Holland, Amsterdam, 1974

（责任编辑　潘　生）

（上接第 146 页）

$$\rightarrow A^{(2)} = \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ * & * & -1.11 & 2.85 \\ * & * & * & 0.05 \end{pmatrix}$$

由此得 $a_{kk}^{(2)}=-1.11<0$。由算法步（5）及注 1 知 A 为不定矩阵。

例 4 对于 n 阶实对称矩阵 $A=(a_{ij})_{n\times n}$，其中

$$a_{ij}=i(n-i+1)(n-j+1),\ i\leqslant j.$$

用 Cholesky 分解法可知 $A>0$。今对不同的 n，在 486 微机上用本文算法（用 FORTRAN 语言编程）判得 A 为正定矩阵。运行时间见表 1。

表 1 运算时间

n	50	100	200	250	300	400	500
秒	0.5	2.0	2.9	4.1	7.8	22.8	54.9

致谢：蒋增荣教授对本文提出了诚恳的意见，在此表示感谢。

参 考 文 献

1 张远达. 线性代数原理. 上海教育出版社，1980

2 李庆扬等编. 数值分析. 华中理工大学出版社，1989

3 谢如彪，姜培庆. 非线性数值分析. 上海交通大学出版社，1984

（责任编辑　卢天贶）