矩阵极分解计算的一个注记

温朝涛, 陈小山*

(华南师范大学数学科学学院, 广州 510631)

摘要: 设 p 是大于 1 的偶数, 根据方程 $x^p-1=0$ 的 Newton 迭代公式, 给出一个计算矩阵极分解的新算法, 并证明其具有二次收敛特性. 数值例子表明该算法是有效的.

关键词: 矩阵极分解; Newton 迭代; 谱范数

中图分类号: O241.6

文献标志码: A

文章编号: 1000-5463(2018)01-0114-04

A Note on Computing the Polar Decomposition

WEN Chaotao, CHEN Xiaoshan*

(School of Mathematical Sciences, South China Normal University, Guangzhou 510631, China)

Abstract: Let p be an even number greater than 1. Based on the Newton iteration for solving the equation $x^p-1=0$, the new algorithm is proposed to compute the polar decomposition of a matrix and its quadratic convergence is proved. Numerical examples show that the new algorithm is efficient.

Key words: polar decomposition; Newton iteration; spectral norm

本文使用符号 $\mathbb{C}^{n \times n}$ 表示 $n \times n$ 复矩阵集合, $\mathbf{I}$ 表示适当维数的单位矩阵, $\mathbf{A}^H$ 表示矩阵 $\mathbf{A}$ 的共轭转置, $\|\cdot\|_F$ 和 $\|\cdot\|_2$ 分别表示矩阵的 Frobenius 范数和谱范数.

矩阵极分解是数值线性代数的一种基本分解, 在心理测量、航空航天计算、最优化和控制论等方面有广泛的应用. 例如: 心理测量中的正交 Procrustes 问题, 就是求如下的最优问题:

$$\min_{\mathbf{X}^T \mathbf{X} = \mathbf{I}} \|\mathbf{A} - \mathbf{B}\mathbf{X}\|_F,$$

其中 $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathbb{R}^{m \times n}$. 如果 $\mathbf{B}^T \mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{H}$ 是矩阵 $\mathbf{B}^T \mathbf{A}$ 的极分解, 那么 $\mathbf{X} = \mathbf{U}$ 就是这个问题的解^[1]. 矩阵极分解是复数极坐标表示的一种推广. 任意一个复数 z 都可以表示成: $z = re^{i\theta}$, 其中 r 是 z 的模, θ 是幅角. 类似地, 任意复矩阵 $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 可表示成^[2]

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{H}, \quad (1)$$

其中 $\mathbf{U} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 是酉矩阵, 即满足 $\mathbf{U}^H \mathbf{U} = \mathbf{I}$ 和 $\mathbf{H} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 是 Hermite 半正定矩阵. 称式(1)为矩阵 $\mathbf{A}$ 的极分解, $\mathbf{U}$ 和 $\mathbf{H}$ 分别称为 $\mathbf{A}$ 的酉极因子和半正定极因子.

矩阵极分解可以通过矩阵的奇异值分解得到. 设 $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 的奇异值分解为^[3]:

$$\mathbf{A} = \mathbf{P}\mathbf{\Sigma}\mathbf{Q}^H, \quad (2)$$

其中 $\mathbf{P}, \mathbf{Q} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 是酉矩阵,

$$\mathbf{\Sigma} = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n) \quad (\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n \geq 0),$$

则式(1)的酉极因子 $\mathbf{U}$ 和 Hermite 半正定极因子 $\mathbf{H}$ 分别为 $\mathbf{U} = \mathbf{P}\mathbf{Q}^H, \mathbf{H} = \mathbf{Q}\mathbf{\Sigma}\mathbf{Q}^H$.

对矩阵极分解的研究可见文献[4-7], 矩阵酉极因子的扰动界及其条件数的研究见文献[1, 3, 8], 矩阵极分解的数值方法的研究见文献[9-14]. 根据求方程 $x^2-1=0$ 的迭代算法, 得到相应的求解矩阵极分解的 Newton 迭代法^[1,13]、割线迭代法^[9]、Halley 迭代法^[10]和帕德迭代法^[7]等. 最近, 温朝涛和陈小山^[11]基于方程 $x^p-1=0$, 给出了求解矩阵极分解的 Newton 迭代法和 Halley 迭代方法. 本文基于方程 $x^p-1=0$, 给出计算非奇异矩阵酉极因子的 Newton 迭代公式并证明其具有二阶收敛性, 推广了基于 $x^2-1=0$ 求矩阵极分解的迭代法^[12], 避免

了求矩阵的逆. 最后通过数值例子说明新算法的有效性.

1 Newton 迭代法

本节给出一个新的计算非奇异矩阵酉极因子的迭代公式并证明算法的二阶收敛性. 设 p 是一个大于 1 的偶数, 则方程 $x^p - 1 = 0$ 的 Newton 迭代公式为^[15]:

$$x_{k+1} = \frac{1}{p} [(p+1)x_k - x_k^{1+p}] \quad (k=0, 1, 2, \dots). \quad (3)$$

由文献[15]可知: 当 $0 < x_0 < \sqrt[p]{p+1}$ 时, 式(3)产生的序列 $\{x_k\}$ 收敛到 1. 设 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 是非奇异矩阵, 则由式(3)可得计算矩阵 A 的酉极因子的 Newton 迭代公式:

$$X_{k+1} = \frac{1}{p} [(p+1)X_k - (X_k X_k^H)^{p/2} X_k] \quad (k=0, 1, 2, \dots, X_0 = A, \|A\|_2 < \sqrt[p]{p+1}). \quad (4)$$

注 1 值得注意的是, $\|A\|_2 < \sqrt[p]{p+1}$ 的限制不是本质的. 因为对于任意给定的非奇异矩阵 A , 可以令 $X_0 = A / \|A\|_2$, 则 X_0 与 A 有相同的酉极因子且 $\|X_0\|_2 = 1 < \sqrt[p]{p+1}$.

接下来证明式(4)产生的序列 $\{X_k\}$ 是二阶收敛到矩阵 A 的酉极因子. 这需要以下引理.

引理 1 设 p 是大于 1 的整数, d 是大于 0 的实数, 则

$$\frac{1}{p} [(p+1)d - d^{1+p}] - 1 = (d-1)^2 \left(-\frac{1}{p}\right) \sum_{j=1}^p j d^{p-j}. \quad (5)$$

证明 用数学归纳法来证明. 当 $p=2$ 时, 有

$$\frac{1}{2} [3d - d^3] - 1 = -\frac{1}{2} (d-1)^2 (d+2),$$

式(5)成立. 假设当 $p=k$ 时, 式(5)成立, 则当 $p=k+1$ 时, 有

$$\begin{aligned} & \frac{1}{k+1} [(k+2)d - d^{k+2}] - 1 = \\ & \frac{-d^k}{k+1} [d^2 - (k+2)d^{1-k} + (k+1)d^{-k}] = \\ & \frac{-d^k}{k+1} \left[\frac{k+1}{d^k} \left(\frac{1}{k+1} d^{k+2} - \frac{k+2}{k+1} d + 1 \right) \right] = \\ & \frac{-d^k}{k+1} \left[\frac{k+1}{d^k} \left(d^2 - 2d + 1 - d^2 + 2d - 1 + \frac{d^{k+2}}{k+1} - \frac{k+2}{k+1} d + 1 \right) \right] = \\ & \frac{-d^k}{k+1} \left\{ \frac{k+1}{d^k} \left[(d-1)^2 - d^2 + 2d - 1 + \frac{d^{k+2}}{k+1} - \frac{k+2}{k+1} d + 1 \right] \right\} = \\ & \frac{-d^k}{k+1} \left\{ \frac{k+1}{d^k} \left[(d-1)^2 - d^2 + \frac{d^{k+2}}{k+1} + \frac{k}{k+1} d \right] \right\} = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{-d^k}{k+1} \left\{ \frac{k+1}{d^k} \left[(d-1)^2 - \frac{k}{k+1} d \left(\frac{1}{k} ((k+1)d - d^{k+1}) - 1 \right) \right] \right\} = \\ & \frac{-d^k}{k+1} \left\{ \frac{k+1}{d^k} \left[(d-1)^2 - \frac{k}{k+1} d \left(-\frac{(d-1)^2}{k} \sum_{j=1}^k j d^{k-j} \right) \right] \right\} = \\ & (d-1)^2 \left(-\frac{1}{k+1} \right) \sum_{j=1}^{k+1} j d^{k+1-j}. \end{aligned}$$

证毕.

定理 1 设 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 是非奇异矩阵且有极分解 (1). 如果 $\|A\|_2 < \sqrt[p]{p+1}$, 那么式(4)产生的迭代序列 $\{X_k\}$ 满足

$$\lim_{k \rightarrow \infty} X_k = U \quad (6)$$

和

$$\|X_{k+1} - U\|_2 \leq \frac{1}{p} \|X_k - U\|_2^2 \sum_{j=1}^p j \|X_k\|_2^{p-j}. \quad (7)$$

证明 A 的奇异值分解如式(2), 定义 $D_k = P^H X_k Q \quad (k=0, 1, 2, \dots).$ (8)

式(4)左右分别乘以 P^H 和 Q , 得到

$$P^H X_0 Q = P^H A Q = P^H P \Sigma Q^H Q = \Sigma \quad (9)$$

和

$$\begin{aligned} P^H X_{k+1} Q &= \frac{1}{p} [(p+1)P^H X_k Q - P^H (X_k X_k^H)^{p/2} P P^H X_k Q] = \\ & \frac{1}{p} [(p+1)P^H X_k Q - (P^H X_k Q Q^H X_k P)^{p/2} P^H X_k Q]. \end{aligned} \quad (10)$$

把式(8)代入式(9)、(10), 则式(4)可写成

$$D_{k+1} = \frac{1}{p} [(p+1)D_k - (D_k D_k^H)^{p/2} D_k], \quad D_0 = \Sigma. \quad (11)$$

因为 $D_0 = \Sigma$ 是对角元都为正数的对角阵, 所以由式(11)可知 D_{k+1} 是对角元为正数的对角矩阵. 记

$$D_k^H = D_k = \text{diag}(d_1^{(k)}, d_2^{(k)}, \dots, d_n^{(k)}) \quad (d_i^{(k)} > 0, i=1, 2, \dots, n). \quad (12)$$

于是式(11)转化为 n 个纯量的 Newton 迭代公式:

$$d_i^{(k+1)} = \frac{1}{p} [(p+1)d_i^{(k)} - (d_i^{(k)})^{1+p}] \quad (d_i^{(0)} = \sigma_i, i=1, \dots, n). \quad (13)$$

由文献[15]可知

$$\lim_{k \rightarrow \infty} d_i^{(k)} = 1 \quad (i=1, 2, \dots, n). \quad (14)$$

由式(8)和式(14)可得

$$\lim_{k \rightarrow \infty} X_k = \lim_{k \rightarrow \infty} (P D_k Q^H) = P \left[\lim_{k \rightarrow \infty} D_k \right] Q^H = P Q^H = U.$$

因而式(6)成立. 接下来证明式(7).

由引理 1 和式(13)可得

$$d_i^{(k+1)} - 1 = \frac{1}{p} [(p+1)d_i^{(k)} - (d_i^{(k)})^{1+p}] - 1 = -\frac{1}{p} (d_i^{(k)} - 1)^2 \sum_{j=1}^p j (d_i^{(k)})^{p-j} \quad (i=1, 2, \dots, n). \quad (15)$$

结合式(12)和式(15),有

$$D_{k+1} - I = -\frac{1}{p} (D_k - I)^2 \sum_{j=1}^p j (D_k)^{p-j}. \quad (16)$$

式(16)两边取谱范数得

$$\|D_{k+1} - I\|_2 \leq \frac{1}{p} \|D_k - I\|_2^2 \sum_{j=1}^p j \|D_k\|_2^{p-j}. \quad (17)$$

注意到

$$\|D_k - I\|_2 = \|P(D_k - I)Q^H\|_2 = \|PD_kQ^H - PQ^H\|_2 = \|X_k - U\|_2 \quad (18)$$

和

$$\|D_k\|_2 = \|PD_kQ^H\|_2 = \|X_k\|_2. \quad (19)$$

把式(18)、(19)代入式(17)可得式(7). 证毕.

注 2 定理 1 说明式(4)产生的矩阵序列 X_k 二阶收敛到矩阵 A 的酉极因子. 特别地,当 $p=2$ 时,式(4)简化为求矩阵酉极因子的 Newton-Schulz 迭代公式^[7]:

$$X_{k+1} = \frac{1}{2} (3X_k - X_k X_k^H X_k), X_0 = A. \quad (20)$$

文献[7]给出式(20)的误差估计:

$$\|X_{k+1} - U\|_2 \leq \frac{1}{2} \|X_k - U\|_2^2 \|2U + X_k\|_2. \quad (21)$$

由于 $\|2U + X_k\|_2 \leq 2 + \|X_k\|_2$,所以由式(21)得

$$\|X_{k+1} - U\|_2 \leq \frac{1}{2} \|X_k - U\|_2^2 (2 + \|X_k\|_2),$$

这就是当 $p=2$ 时式(7)的结果.

2 数值例子

本节给出数值例子说明式(4)的有效性. 所有计算使用 Matlab 7.8, 相对的机器精度为 $2.220 4 \times 10^{-16}$. 对非奇异矩阵 A , 取 $X_0 = A / \|A\|_2$ 作为迭代公式(4)的初始值, 每步迭代产生近似酉极因子 X_k , 再用 $H_k = (X_k^* A + A^* X_k) / 2$ 作为 A 的近似正定极因子. 定义残量 $R_k = A - X_k H_k$. 如果 R_k 很小, 那么近似酉极因子 X_k 就接近 A 的酉极因子 U .

例 1^[7] 取几乎正交矩阵 $A = \text{orth}(\text{gallery}('moler', 16)) + \text{ones}(16) \times 10^{-3}$, 其中 orth 是生成 16×16 正交矩阵的 Matlab 函数. 对不同的 p , 利用式(4)产生的残量 R_k 的 Frobenius 范数见表 1.

例 2^[9] 设矩阵

$$A = \begin{pmatrix} 0.1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

对不同的 p , 利用式(4)产生的残量 R_k 的 Frobenius 范数见表 2.

表 1 例 1 中 Newton 迭代公式(4)的 $\|R_k\|_F$

Table 1 $\|R_k\|_F$ in Newton iteration (4) in Example 1

p	$k=1$	$k=2$	$k=3$	$k=4$	$k=5$
$p=2$	$1.333 9 \times 10^{-3}$	$4.863 5 \times 10^{-7}$	$1.333 4 \times 10^{-13}$	$8.360 1 \times 10^{-16}$	$7.958 5 \times 10^{-16}$
$p=4$	$2.205 7 \times 10^{-3}$	$2.208 1 \times 10^{-6}$	$4.556 5 \times 10^{-12}$	$8.213 8 \times 10^{-16}$	$7.588 8 \times 10^{-16}$
$p=6$	$3.063 7 \times 10^{-3}$	$5.941 1 \times 10^{-6}$	$4.599 1 \times 10^{-11}$	$9.124 9 \times 10^{-16}$	$9.269 9 \times 10^{-16}$
$p=8$	$3.908 3 \times 10^{-3}$	$1.237 9 \times 10^{-5}$	$2.556 6 \times 10^{-10}$	$6.774 9 \times 10^{-16}$	$6.806 1 \times 10^{-16}$
$p=10$	$4.739 7 \times 10^{-3}$	$2.215 6 \times 10^{-5}$	$9.965 8 \times 10^{-10}$	$9.109 0 \times 10^{-16}$	$9.489 4 \times 10^{-16}$

表 2 例 2 中 Newton 迭代公式(4)的 $\|R_k\|_F$

Table 2 $\|R_k\|_F$ in Newton iteration (4) in Example 2

p	$k=1$	$k=2$	$k=3$	$k=4$	$k=5$
$p=2$	$2.703 5 \times 10^{-2}$	$5.171 7 \times 10^{-4}$	$1.996 2 \times 10^{-7}$	$2.993 4 \times 10^{-14}$	$4.710 3 \times 10^{-16}$
$p=4$	$4.225 3 \times 10^{-2}$	$2.077 7 \times 10^{-3}$	$5.364 3 \times 10^{-6}$	$3.596 8 \times 10^{-11}$	$3.141 7 \times 10^{-16}$
$p=6$	$5.561 0 \times 10^{-2}$	$4.925 9 \times 10^{-3}$	$4.210 5 \times 10^{-5}$	$3.102 3 \times 10^{-9}$	$1.573 2 \times 10^{-16}$
$p=8$	$6.737 7 \times 10^{-2}$	$9.021 9 \times 10^{-3}$	$1.806 0 \times 10^{-4}$	$7.336 9 \times 10^{-8}$	$1.189 7 \times 10^{-14}$
$p=10$	$7.777 8 \times 10^{-2}$	$1.417 7 \times 10^{-2}$	$5.398 9 \times 10^{-4}$	$8.010 7 \times 10^{-7}$	$1.764 8 \times 10^{-12}$

例 3 设矩阵 $A = \text{diag}([\text{rand}(1, 30) \times 10, 10^{-8}])$, 分别用迭代公式(4)与用文献[11]的 Newton 迭代公式

$$\begin{aligned} X_{k+1} &= \frac{1}{p} [(p-1)X_k + (X_k X_k^H)^{(2-p)/2} X_k^{-H}] \\ (k=0, 1, 2, \dots), X_0 &= A \end{aligned} \quad (22)$$

计算 A 的酉极因子. 程序的终止标准为 $\|R_k\|_F \leq 10^{-15}$. 对不同的 p , 表 3 列出了这 2 个公式所花费的 CPU 时间(t_{CPU})和所需的迭代步数.

表 3 Newton 迭代公式(4)与(22)的 CPU 时间与迭代步数
Table 3 CPU times and iterations in Newton iterations (4) and (22)

p 的取值	Newton 迭代公式	t_{CPU}/s	迭代步数
$p=2$	(4)	0.005 6	50
	(22)	0.004 9	30
$p=4$	(4)	0.005 7	86
	(22)	0.031 9	191
$p=6$	(4)	0.008 8	123
	(22)	0.093 7	499
$p=8$	(4)	0.013 2	160
	(22)	0.194 7	952

表 1 和表 2 显示计算酉极因子的 Newton 迭代公式(4)具有二阶收敛特性. 对于不同的偶数 p , Newton 迭代公式(4)的收敛速度相差不大. 由表 3 可知当 $p=4, 6, 8$ 时, 式(4)花费的 CPU 时间更少, 迭代步数也更少.

3 结束语

本文基于方程 $x^{-p}-1=0$ 的 Newton 迭代求根公式获得求解非奇异矩阵酉极因子的新迭代算法, 并证明了新算法具有二阶收敛特性. 这推广了求非奇异矩阵酉极因子的 Newton-Schulz 迭代公式. 新迭代算法只需要矩阵的加法与乘法运算, 避免了求矩阵的逆, 数值例子表明该算法是有效的.

参考文献:

[1] HIGHAM N J. Computing the polar decomposition—with applications[J]. SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, 1986, 7(4): 1160–1174.
[2] HORN R A, JOHNSON C R. Matrix analysis[M]. New York: Cambridge University Press, 2012.

[3] 陈小山. 矩阵酉极因子的扰动界[J]. 华南师范大学学报(自然科学版), 2002(2): 79–83.
CHEN X S. Perturbation bounds for the unitary polar factor[J]. Journal of South China Normal University (Natural Science Edition), 2002(2): 79–83.
[4] 张贤达. 矩阵分析与应用[M]. 北京: 清华大学出版社, 2004.
[5] GOLUB G H, VAN LOAN C F. Matrix computations[M]. Baltimore: JHU Press, 2012.
[6] MARCUS M, MINC H. Introduction to linear algebra[M]. New York: Dover, 1988.
[7] HIGHAM N J. Functions of matrices: theory and computation[M]. Philadelphia: SIAM, 2008.
[8] 孙继广, 陈春晖. 广义极分解[J]. 计算数学, 1989, 11(3): 262–273.
SUN J G, CHEN C H. Generalized polar decomposition[J]. Mathematica Numerica Sinica, 1989, 11(3): 262–273.
[9] 邹财盛, 陈小山. 用割线法求矩阵的极分解[J]. 计算数学, 2014, 36(3): 225–230.
ZOU C S, CHEN X S. Computing the polar decomposition with the secant method[J]. Mathematica Numerica Sinica, 2014, 36(3): 225–230.
[10] NAKATSUKASA Y, BAI Z, GYGI F. Optimizing Halley's iteration for computing the matrix polar decomposition [J]. SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, 2010, 31(5): 2700–2720.
[11] 温朝涛, 陈小山. 矩阵极分解新的数值方法[J]. 计算数学, 2017, 39(1): 23–32.
WEN C T, CHEN X S. New numerical methods for computing the polar decomposition[J]. Mathematica Numerica Sinica, 2017, 39(1): 23–32.
[12] BJORCK A, BOWIE C. An iterative algorithm for computing the best estimate of an orthogonal matrix[J]. SIAM Journal on Numerical Analysis, 1971, 8(2): 358–364.
[13] HIGHAM N J, SCHREIBER R S. Fast polar decomposition of an arbitrary matrix[J]. SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, 1990, 11(4): 648–655.
[14] GANDER W. Algorithms for the polar decomposition[J]. SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, 1990, 11(6): 1102–1115.
[15] BINI D A, HIGHAM N J, MEINI B. Algorithms for the matrix pth root[J]. Numerical Algorithms, 2005, 39(4): 349–378.