

实对称五对角矩阵 Procrustes 问题

李姣芬, 张晓宁

(桂林电子科技大学数学与计算科学学院, 广西 桂林 541004)

摘要: 本文研究了实对称五对角矩阵 Procrustes. 利用矩阵的奇异值分解简化问题, 得到了实对称五对角矩阵 X 极小化, 最后给出数值算例说明方法的有效性.

关键词: 实对称五对角矩阵; Procrustes 问题

MR(2010) 主题分类号: 65F05; 65F30

中图分类号: O241.6

文献标识码: A

文章编号: 0255-7797(2015)02-0419-10

1 引言

本文讨论长方形矩阵约束最小二乘问题, 即考虑下列约束逼近问题

$$\begin{cases} \min & \|AX - B\|^2, \quad A, B \in \mathbb{R}^{m \times n}, \\ \text{s.t.} & X \in \mathcal{P}, \end{cases} \quad (1.1)$$

其中 $m > n$, $\mathcal{P} \subset \mathbb{R}^{m \times n}$ 是具有某种特定模式的矩阵构成的子空间. $\|A\|$ 表示实矩阵 A 的 Frobenius 范数, 定义为 $\|A\|^2 = \langle A, A \rangle = \sum_{i,j=1}^n (A_{ij})^2$, 其中的内积为 $\langle A, B \rangle = \text{trace}(A^T B)$.

对于问题 (1.1) 一系列的矩阵逼近问题已经被研究. 若对 X 没有任何约束限制 ($\mathcal{P} = \mathbb{R}^{m \times n}$), 文献 [1] 给出了标准的最小二乘研究, 得到了通解 $X = A^+ B$, 其中 A^+ 表示矩阵 A 的 Moore-penrose 逆. 若 $\mathcal{P}$ 为正交矩阵集合则生成正交 Procrustes 问题^[2,3]. 若 $\mathcal{P}$ 为对称矩阵集合则生成对称 Procrustes 问题, 此类问题起源于弹性结构的研究, 根据关系式 $X f_i = d_i$ 假设测量力向量函数 f_i 是与测量位移向量 d_i 有关的, 其中 X 是对称应变矩阵. Higham^[4] 通过奇异值分解分析了对称 Procrustes 问题并给出了稳定的算法. 当 $\mathcal{P}$ 为一些闭凸锥, 比如对称半正定锥和 (对称) 非负锥, 则生成相应约束的 Procrustes 问题, Andersson and Elfving^[5] 解决了此类问题, 得到了最优矩阵, 并给出了解决此类问题的投影类型算法.

在工程计算和微分方程求数值解时, 常会碰到实对称三对角或实对称五对角矩阵. 但是关于实对称五对角矩阵的最小二乘问题研究比较少, 相关结论也不多. 本文我们研究此类问题, 即实对称五对角矩阵 Procrustes 问题:

$$\begin{cases} \min & \|AX - B\|^2, \quad A, B \in \mathbb{R}^{m \times n}, \\ \text{s.t.} & X \in \mathcal{T}, \end{cases} \quad (1.2)$$

*收稿日期: 2013-01-02

接收日期: 2013-09-10

基金项目: 国家自然科学基金青年基金资助 (11301107); 国家自然科学基金天元基金资助 (11226323); 广西自然科学基金 (2013GXNSFBA019009).

作者简介: 李姣芬 (1984-), 男, 湖南湘潭, 博士, 副教授, 主要研究方向: 数值代数.

其中 $\mathcal{T} \subset \mathbb{R}^{n \times n}$ 为实对称五对角矩阵构成的子空间. 所谓实对称五对角矩阵即具有以下对称形式的矩阵

$$T = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & c_1 & & & \\ b_1 & a_2 & b_2 & c_2 & & \\ c_1 & b_2 & a_3 & b_3 & \ddots & \\ & c_2 & b_3 & a_4 & \ddots & \ddots \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & c_{n-2} \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & b_{n-1} \\ & & & & c_{n-2} & b_{n-1} & a_n \end{pmatrix}.$$

本文是对文献 [4–8] 的拓展研究, 然而是用一种完全不同并且相对简单的方法, 虽然实对称五对角是特殊的对称矩阵. 本文也是文 [9] 的推广研究, 文 [9] 研究了 Toeplitz 矩阵 Procrustes 问题, 本文将此方法应用于实对称五对角矩阵, 即首先通过矩阵的奇异值分解简化问题, 然后用分析方法和结合高等矩阵分析知识解决此类问题.

2 问题的解

在这一节中我们描述问题 (1.2) 中可行集 $\mathcal{T}$.

给定矩阵 $A, B \in \mathbb{R}^{m \times n}$, 子空间 $\mathcal{T}$ 可以表述成

$$\mathcal{T} = \left\{ X \in \mathbb{R}^{n \times n} : X = \sum_{g=1}^n a_g G_g + \sum_{r=1}^{n-1} b_r R_r + \sum_{s=1}^{n-2} c_s S_s \right\},$$

其中 $a_g, b_r, c_s \in \mathbb{R}$, 矩阵 $G_g, P_r, S_s \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 定义如下

$$(G_g)_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j = g, \\ 0, & \text{其它}, \end{cases} \quad (R_r)_{ij} = \begin{cases} 1, & i = r, j = r + 1, \\ 1, & i = r + 1, j = r, \\ 0, & \text{其它}, \end{cases}$$

$$(S_s)_{ij} = \begin{cases} 1, & i = s, j = s + 2, \\ 1, & i = s + 2, j = s, \\ 0, & \text{其它}. \end{cases}$$

显然, G_g, P_r, S_s 构成子空间 $\mathcal{T}$ 的一组基.

2.1 问题的转换

首先把问题 (1.2) 转化为一个较简单的问题. 假设矩阵 A 具有下列形式的奇异值分解

$$A = P \begin{bmatrix} \Sigma \\ 0 \end{bmatrix} Q^T, \quad (2.1)$$

其中 $P \in \mathbb{R}^{m \times m}$ 和 $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 是正交矩阵, $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n), \sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_n \geq 0$.

因为 Frobenius 范数的正交不变性, 我们得到

$$\begin{aligned}\|AX - B\|^2 &= \|P \begin{bmatrix} \Sigma \\ 0 \end{bmatrix} Q^T X - B\|^2 = \left\| \begin{bmatrix} \Sigma \\ 0 \end{bmatrix} Q^T X - P^T B \right\|^2 = \left\| \begin{bmatrix} \Sigma \\ 0 \end{bmatrix} Q^T X - C \right\|^2 \\ &= \|(\Sigma Q^T)X - C_1\|^2 + \|C_2\|^2 = \|T - C_1\|^2 + \|C_2\|^2,\end{aligned}$$

其中 $T = \Sigma Q^T X \in R^{n \times n}$, $C = \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix} = P^T B$, $C_1 \in R^{n \times n}$, 则问题 (1.2) 等价于

$$\begin{cases} \min & \|T - C_1\|^2, \\ \text{s.t.} & T \in \mathcal{T}', \end{cases} \quad (2.2)$$

其中 $\mathcal{T}'$ 是下列子空间

$$\mathcal{T}' = \{T \in R^{n \times n} : T = \Sigma Q^T (\sum_{g=1}^n a_g G_g + \sum_{r=1}^{n-1} b_r R_r + \sum_{s=1}^{n-2} c_s S_s)\}.$$

2.2 描述子空间 $\mathcal{T}'$ 上的解

我们引入符号 $P_{\mathcal{U}}(A)$ 表示矩阵 A 在集合 $\mathcal{U}$ 上的投影. 下列定理描述了矩阵 C_1 在子空间 $\mathcal{T}'$ 上的投影.

定理 2.1 如果 $C_1 \in R^{n \times n}$, 那么问题 (1.2) 的通解为

$$\begin{aligned}P_{\mathcal{T}'}(C_1) &= \Sigma Q^T (\sum_{g=1}^n a_g^* G_g + \sum_{r=1}^{n-1} b_r^* R_r + \sum_{s=1}^{n-2} c_s^* S_s), \\ a_p^* &= \begin{cases} \frac{\sum_{i=1}^n \sigma_i Q_{p,i}(C_1)_{i,p}}{\sum_{i=1}^n \sigma_i^2 Q_{p,i}^2}, & \sum_{i=1}^n \sigma_i^2 Q_{p,i}^2 \neq 0, \quad (1 \leq p \leq n), \\ \text{任意}, & \text{其它} \end{cases} \\ b_q^* &= \begin{cases} \frac{\sum_{i=1}^n \sigma_i [Q_{q+1,i}(C_1)_{i,q} + Q_{q,i}(C_1)_{i,q+1}]}{\sum_{i=1}^n \sigma_i^2 (Q_{q+1,i}^2 + Q_{q,i}^2)}, & \sum_{i=1}^n \sigma_i^2 (Q_{q+1,i}^2 + Q_{q,i}^2) \neq 0, \quad (1 \leq q \leq n-1), \\ \text{任意}, & \text{其它} \end{cases} \\ c_t^* &= \begin{cases} \frac{\sum_{i=1}^n \sigma_i [Q_{t+2,i}(C_1)_{i,t} + Q_{t,i}(C_1)_{i,t+2}]}{\sum_{i=1}^n \sigma_i^2 (Q_{t+2,i}^2 + Q_{t,i}^2)}, & \sum_{i=1}^n \sigma_i^2 (Q_{t+2,i}^2 + Q_{t,i}^2) \neq 0, \quad (1 \leq t \leq n-2). \\ \text{任意}, & \text{其它} \end{cases}\end{aligned}$$

证 目标函数 $f: \mathbb{R}^{3n-3} \rightarrow \mathbb{R}$,

$$\begin{aligned}f(a, b, c) &= f\{a_1, \dots, a_n, b_1, \dots, b_{n-1}, c_1, \dots, c_{n-2}\} = \frac{1}{2} \|T - C_1\|^2 = \frac{1}{2} \|\Sigma Q^T X - C_1\|^2 \\ &= \frac{1}{2} \|\Sigma Q^T (\sum_{g=1}^n a_g G_g + \sum_{r=1}^{n-1} b_r R_r + \sum_{s=1}^{n-2} c_s S_s) - C_1\|^2 \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n [(\Sigma Q^T (\sum_{g=1}^n a_g G_g + \sum_{r=1}^{n-1} b_r R_r + \sum_{s=1}^{n-2} c_s S_s))_{i,j} - (C_1)_{i,j}]^2.\end{aligned}$$

记 $\Delta = \sum_{g=1}^n a_g G_g + \sum_{r=1}^{n-1} b_r R_r + \sum_{s=1}^{n-2} c_s S_s$. 显然 f 是二阶连续可微的, 我们可以计算 $\frac{\partial f}{\partial a_p}(a, b, c)$ 使得对所有的 $1 \leq p \leq n$ 有

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial a_p} &= \frac{\partial}{\partial a_p} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n [(\Sigma Q^T \Delta)_{i,j} - (C_1)_{i,j}]^2 \right\} \\ &= \sum_{i,j=1}^n \left[((\Sigma Q^T \Delta)_{i,j} - (C_1)_{i,j}) \cdot \frac{\partial}{\partial a_p} (\Sigma Q^T \Delta)_{i,j} \right]. \end{aligned} \quad (2.3)$$

(2.3) 式右边的乘积因子

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial a_p} (\Sigma Q^T \Delta)_{i,j} &= \frac{\partial}{\partial a_p} \left(\sum_{l=1}^n ((\Sigma Q^T)_{i,l} \cdot \Delta_{l,j}) \right) = \sum_{l=1}^n \left((\Sigma Q^T)_{i,l} \cdot \frac{\partial}{\partial a_p} (\Delta)_{l,j} \right) \\ &= \sum_{l=1}^n (\Sigma Q^T)_{i,l} (G_p)_{l,j} = (\Sigma Q^T G_p)_{i,j}, \end{aligned}$$

那么 (2.3) 变成

$$\frac{\partial f}{\partial a_p} = \sum_{i,j=1}^n (\Sigma Q^T \Delta)_{i,j} \cdot (\Sigma Q^T G_p)_{i,j} - \sum_{i,j=1}^n (C_1)_{i,j} \cdot (\Sigma Q^T G_p)_{i,j}. \quad (2.4)$$

注意到 $(\Sigma Q^T \Delta)_{i,j}$ 是 ΣQ^T 的第 i 行与 Δ 的第 j 列的内积, 如果令 $c_{-1} = 0, b_0 = 0, c_0 = 0, c_{n-1} = 0, b_n = 0, c_n = 0$, 则对所有的 $1 \leq i, j \leq n$, 有

$$(\Sigma Q^T \Delta)_{i,j} = \sigma_i (c_{j-2} Q_{j-2,i} + b_{j-1} Q_{j-1,i} + a_j Q_{j,i} + b_j Q_{j+1,i} + c_j Q_{j+2,i}). \quad (2.5)$$

类似地, 元素 $(\Sigma Q^T G_p)_{i,j}$ 是 ΣQ^T 的第 i 行与第 j 列的内积, 因此

$$(\Sigma Q^T G_p)_{i,j} = \begin{cases} \sigma_i Q_{p,i}, & j = p, \\ 0, & j \neq p. \end{cases}$$

那么 (2.4) 式右边的第一个和式可以写成

$$\begin{aligned} &\sum_{i=1}^n (\Sigma Q^T \Delta)_{i,p} \cdot (\Sigma Q^T G_p)_{i,p} \\ &= \sum_{i=1}^n \sigma_i^2 (c_{p-2} Q_{p-2,i} + b_{p-1} Q_{p-1,i} + a_p Q_{p,i} + b_p Q_{p+1,i} + c_p Q_{p+2,i}) Q_{p,i}. \end{aligned}$$

定义 $\sum_{i=1}^n Q_{m,i} Q_{k,i} \sigma_i^2 = \nu^T \theta$, 其中 $\nu^T = (Q_{m,1} Q_{k,1}, Q_{m,2} Q_{k,2}, \dots, Q_{m,n} Q_{k,n})$, $\theta = (\sigma_1^2, \sigma_2^2, \dots, \sigma_n^2)$, 我们知道 ν 的所有元素之和是正交矩阵 Q 其中两列的内积, 且当其列序号 $m \neq k$ 时其值为 0. 因此对 $m \neq k$, 有

$$0 = \left(\sum_{i=1}^n \nu_i \right) \sigma_n^2 \leq \nu^T \theta = \sum_{i=1}^n \nu_i \sigma_i^2 \leq \left(\sum_{i=1}^n \nu_i \right) \sigma_1^2 = 0,$$

因此对所有的 $m \neq k$ 都有 $\nu^T \theta = 0$, 且

$$\sum_{i=1}^n (\Sigma Q^T \Delta)_{i,p} \cdot (\Sigma Q^T G_p)_{i,p} = \sum_{i=1}^n a_p \sigma_i^2 Q_{p,i}^2.$$

这时 (2.4) 式变成

$$\frac{\partial f}{\partial a_p} = \sum_{i=1}^n a_p \sigma_i^2 Q_{p,i}^2 - \sum_{i=1}^n \sigma_i (C_1)_{i,p} Q_{p,i} \quad (2.6)$$

对所有的 $p = 1, \dots, n$ 都成立. 根据多元函数求极小值的一阶必要条件

$$\frac{\partial f}{\partial a_p} = 0, \quad p = 1, \dots, n,$$

得到

$$a_p^* = \frac{\sum_{i=1}^n \sigma_i Q_{p,i} (C_1)_{i,p}}{\sum_{i=1}^n \sigma_i^2 Q_{p,i}^2}. \quad (2.7)$$

注意到当 $\text{rank}(A) = n$ 时, (2.7) 式的分母恒不为 0, 因为 A 的奇异值全大于 0, 则

$$\sum_{i=1}^n \sigma_i^2 Q_{p,i}^2 = 0$$

意味着 $\sigma_i Q_{p,i} = 0 \rightarrow [Q_{p,1}, Q_{p,2}, \dots, Q_{p,n}] = 0$, 这与 Q 是正交矩阵矛盾! 但是当 $\text{rank}(A) = k < n$ 时, (2.7) 式的分母有可能为 0, 只需令 Q 的第 p 行的前面 k 个元素全为 0, 后面的 $n - k$ 个元素至少有一个非零元即可. 因此当 (2.7) 式的分母有为 0 时, 我们令 a_p^* 可取任意值.

类似于 $\frac{\partial f}{\partial a_p}$, 计算 $\frac{\partial f}{\partial b_q}$, 对所有的 $1 \leq q \leq n - 1$,

$$\frac{\partial f}{\partial b_q} = \sum_{i,j=1}^n \left[\left((\Sigma Q^T \Delta)_{i,j} - (C_1)_{i,j} \right) \cdot \frac{\partial}{\partial b_q} (\Sigma Q^T \Delta)_{i,j} \right]. \quad (2.8)$$

同样

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial b_q} (\Sigma Q^T \Delta)_{i,j} &= \frac{\partial}{\partial b_q} \left(\sum_{l=1}^n ((\Sigma Q^T)_{i,l} \cdot \Delta_{l,j}) \right) = \sum_{l=1}^n \left((\Sigma Q^T)_{i,l} \cdot \frac{\partial}{\partial b_q} (\Delta)_{l,j} \right) \\ &= (\Sigma Q^T R_q)_{i,j} = \begin{cases} \sigma_i Q_{q,i}, & j = q + 1; \\ \sigma_i Q_{q+1,i}, & j = q; \\ 0, & \text{否则.} \end{cases} \end{aligned} \quad (2.9)$$

因此结合 (2.5), (2.9), (2.8) 式变成

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial b_q} &= \sum_{i=1}^n \sigma_i (\Sigma Q^T \Delta)_{i,q} Q_{q+1,i} + \sum_{i=1}^n \sigma_i (\Sigma Q^T \Delta)_{i,q+1} Q_{q,i} - \sum_{i=1}^n \sigma_i (C_1)_{i,q} Q_{q+1,i} \\ &\quad - \sum_{i=1}^n \sigma_i (C_1)_{i,q+1} Q_{q,i} \\ &= \sum_{i=1}^n \sigma_i^2 (c_{q-2} Q_{q-2,i} + b_{q-1} Q_{q-1,i} + a_q Q_{q,i} + b_q Q_{q+1,i} + c_q Q_{q+2,i}) Q_{q+1,i} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{i=1}^n \sigma_i^2 (c_{q-1} Q_{q-1,i} + b_q Q_{q,i} + a_{q+1} Q_{q+1,i} + b_{q+1} Q_{q+2,i} + c_{q+1} Q_{q+3,i}) Q_{q,i} \\
& - \sum_{i=1}^n \sigma_i [(C_1)_{i,q} Q_{q+1,i} + (C_1)_{i,q+1} Q_{q,i}] \\
& = \sum_{i=1}^n \sigma_i^2 b_q (Q_{q+1,i}^2 + Q_{q,i}^2) - \sum_{i=1}^n \sigma_i [(C_1)_{i,q} Q_{q+1,i} + (C_1)_{i,q+1} Q_{q,i}]. \quad (2.10)
\end{aligned}$$

同样根据多元函数一阶必要条件 $\frac{\partial f}{\partial b_q} = 0$, $q = 1, \dots, n-1$, 有

$$b_q^* = \frac{\sum_{i=1}^n \sigma_i [Q_{q+1,i} (C_1)_{i,q} + Q_{q,i} (C_1)_{i,q+1}]}{\sum_{i=1}^n \sigma_i^2 (Q_{q+1,i}^2 + Q_{q,i}^2)}. \quad (2.11)$$

同样当 $\text{rank}(A) = n$ 时, (2.11) 式的分母不为 0, 当 $\text{rank}(A) = k < n$ 时, (2.11) 式的分母可能为 0, 可能的取法为 Q 的第 q 行和第 $q+1$ 行的前面 k 个元素全为 0, 后面的 $n-k$ 个元素每行都至少含有一个非零元. 因此当 (2.11) 的分母为 0 时, 我们令 b_q^* 取任意值.

类似于 $\frac{\partial f}{\partial a_p}, \frac{\partial f}{\partial b_q}$, 对所有的 $1 \leq t \leq n-2$,

$$\frac{\partial f}{\partial c_t} = \sum_{i,j=1}^n \left[\left((\Sigma Q^T \Delta)_{i,j} - (C_1)_{i,j} \right) \cdot \frac{\partial}{\partial c_t} (\Sigma Q^T \Delta)_{i,j} \right], \quad (2.12)$$

$$\frac{\partial}{\partial c_t} (\Sigma Q^T \Delta)_{i,j} = (\Sigma Q^T S_t)_{i,j} = \begin{cases} \sigma_i Q_{t,i}, & j = t+2, \\ \sigma_i Q_{t+2,i}, & j = t, \\ 0, & \text{否则.} \end{cases} \quad (2.13)$$

因此结合 (2.5), (2.13), (2.12) 式变成

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f}{\partial c_t} & = \sum_{i=1}^n \sigma_i (\Sigma Q^T \Delta)_{i,t} Q_{t+2,i} + \sum_{i=1}^n \sigma_i (\Sigma Q^T \Delta)_{i,t+2} Q_{t,i} - \sum_{i=1}^n \sigma_i (C_1)_{i,t} Q_{t+2,i} \\
& \quad - \sum_{i=1}^n \sigma_i (C_1)_{i,t+2} Q_{t,i} \\
& = \sum_{i=1}^n \sigma_i^2 (c_{t-2} Q_{t-2,i} + b_{t-1} Q_{t-1,i} + a_t Q_{t,i} + b_t Q_{t+1,i} + c_t Q_{t+2,i}) Q_{t+2,i} \\
& \quad + \sum_{i=1}^n \sigma_i^2 (c_t Q_{t,i} + b_{t+1} Q_{t+1,i} + a_{t+2} Q_{t+2,i} + b_{t+2} Q_{t+3,i} + c_{t+2} Q_{t+4,i}) Q_{t,i} \\
& \quad - \sum_{i=1}^n \sigma_i [(C_1)_{i,t} Q_{t+2,i} + (C_1)_{i,t+2} Q_{t,i}] \\
& = \sum_{i=1}^n \sigma_i^2 c_t (Q_{t,i}^2 + Q_{t+2,i}^2) - \sum_{i=1}^n \sigma_i [(C_1)_{i,t} Q_{t+2,i} + (C_1)_{i,t+2} Q_{t,i}].
\end{aligned} \quad (2.14)$$

同样根据多元函数极小值问题一阶必要条件 $\frac{\partial f}{\partial c_t} = 0$, $t = 1, \dots, n-2$, 有

$$c_t^* = \frac{\sum_{i=1}^n \sigma_i [(C_1)_{i,t} Q_{t+2,i} + (C_1)_{i,t+2} Q_{t,i}]}{\sum_{i=1}^n \sigma_i^2 (Q_{t,i}^2 + Q_{t+2,i}^2)}. \quad (2.15)$$

类似于 (2.11) 式中对分母的讨论, 当 $\text{rank}(A) = n$ 时它恒不为 0, 当 $\text{rank}(A) = k < n$ 时, 它有可能为 0. 同样当 (2.15) 式的分母为 0 时, 我们令 c_t^* 取任意值. 现在我们需要证明 $a_p^*(1 \leq p \leq n)$, $b_q^*(1 \leq q \leq n-1)$, $c_t^*(1 \leq t \leq n-2)$ 是 f 的极小值. 计算

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 f}{\partial a_p^2}(a_p^*) &= \sum_{i=1}^n \sigma_i^2 Q_{p,i}^2 \geq 0, & \frac{\partial^2 f}{\partial b_q^2}(b_q^*) &= \sum_{i=1}^n \sigma_i^2 (Q_{q+1,i}^2 + Q_{q,i}^2) \geq 0, \\ \frac{\partial^2 f}{\partial c_t^2} &= \sum_{i=1}^n \sigma_i^2 (Q_{t,i}^2 + Q_{t+2,i}^2) \geq 0, \end{aligned}$$

很容易证明上述不等式中等号不能同时成立, 因为 Q 是正交矩阵, 特别地, 当 $\text{rank}(A) = n$, 上述不等式的严格不等号同时成立. 同时有

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 f}{\partial a_p \partial a_k} &= 0, \text{ 如果 } k \neq p; & \frac{\partial^2 f}{\partial b_q \partial b_l} &= 0, \text{ 如果 } l \neq q, & \frac{\partial^2 f}{\partial c_t \partial c_s} &= 0; \text{ 如果 } t \neq s, \\ \frac{\partial^2 f}{\partial a_p \partial b_q} &= 0, & \frac{\partial^2 f}{\partial a_p \partial c_t} &= 0, & \frac{\partial^2 f}{\partial b_q \partial a_p} &= 0, & \frac{\partial^2 f}{\partial b_q \partial c_t} &= 0, & \frac{\partial^2 f}{\partial c_t \partial a_p} &= 0, & \frac{\partial^2 f}{\partial c_t \partial b_q} &= 0. \end{aligned}$$

这说明关于二阶导数的海赛 (Hessian) 矩阵 $\nabla^2 f(a^*, b^*, c^*)$ 是半正定的. 特别地, 当 $\text{rank}(A) = n$ 时为正定, 因此, $a_p^*(1 \leq p \leq n)$, $b_q^*(1 \leq q \leq n-1)$, $c_t^*(1 \leq t \leq n-2)$ 确实是 f 的极小值.

从定理 2.1 可以看出, $a_p^*(1 \leq p \leq n)$, $b_q^*(1 \leq q \leq n-1)$, $c_t^*(1 \leq t \leq n-2)$ 只依赖于矩阵 A 的奇异值分解中的三个分解因子 P, Q, Σ . 但是不像对角因子 Σ , 左右正交因子 P, Q 并不是唯一确定的即使矩阵 A 是列满秩的, 这种不唯一性的程度取决于奇异值的重数. 类似于文献 [10] 中的定理 3.11', 下列引理描述矩阵 A 的奇异值分解中正交因子的所有可能取法以及它们之间的关系.

引理 2.1 给定矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, 假定 A 的所有不同的奇异值为 $\sigma_1 > \cdots > \sigma_k > 0$, 它们的重数分别为 $\mu_1, \cdots, \mu_k \geq 1$, $\mu_1 + \cdots + \mu_k = r$. 令 A 的奇异值分解为 $A = P \text{diag}(\Sigma, 0_{m-r, n-r}) Q$, 其中 $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1 I_{\mu_1}, \cdots, \sigma_k I_{\mu_k}) \in \mathbb{R}^{r \times r}$. 令 $\hat{P} \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $\hat{Q} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 为给定的正交矩阵, 那么 $A = \hat{P} \text{diag}(\Sigma, 0_{m-r, n-r}) \hat{W}^T$ 当且仅当存在正交矩阵 $U_i \in \mathbb{R}^{\mu_i \times \mu_i}$, $i = 1, \cdots, k$, $\tilde{V} \in \mathbb{R}^{(m-r) \times (m-r)}$, $\tilde{W} \in \mathbb{R}^{(n-r) \times (n-r)}$ 使得

$$\hat{P} = P[U_1 \oplus \cdots \oplus U_k \oplus \tilde{V}] \text{ 和 } \hat{Q} = Q[U_1 \oplus \cdots \oplus U_k \oplus \tilde{W}]. \quad (2.16)$$

下面结合引理 2.1 我们证明当矩阵 A 列满秩时问题 (1.2) 只有唯一解, 当矩阵 A 不是列满秩时, 问题 (1.2) 有无穷多解. 首先下列众所周知的引理保证问题 (1.2) 解的存在性.

引理 2.2 [5] 设 $\mathcal{H}$ 为实数域上的线性子空间, $\mathcal{C}$ 是 $\mathcal{H}$ 上的非空闭凸锥. 假定 f 是凸函数并且强制性的 (在线性子空间 $\mathcal{H}$ 上定义内积 $\langle X, Y \rangle = \text{trace}(XY^T)$, $X, Y \in \mathcal{H}$, 称函数 f 在 $\mathcal{C}$ 上具有强制性如果 $\min_{\|X\| \rightarrow \infty, X \in \mathcal{C}} f(X) = \infty$), 那么极小值问题 $\min_{X \in \mathcal{C}} f(X)$ 有解, 并且如果 f 是严格凸的, 解是唯一的.

假定 A 是列满秩的, 且 A 的另一奇异值分解为 $A = \hat{P} \begin{bmatrix} \Sigma \\ 0 \end{bmatrix} \hat{Q}$, 其中

$$\hat{P} = P \begin{pmatrix} U_1 & & \\ & \ddots & \\ & & U_k \\ & & & \tilde{V} \end{pmatrix} \quad \text{和} \quad \hat{Q} = Q \begin{pmatrix} U_1 & & \\ & \ddots & \\ & & U_k \end{pmatrix},$$

其中矩阵 P, Q 在式2.1中给出, 分块矩阵 $P = [P_1, P_2]$, $\hat{P} = [\hat{P}_1, \hat{P}_2]$, 其中 $P_1 \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\hat{P}_1 \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 则有

$$\hat{P}_1 = P_1 \begin{pmatrix} U_1 & & \\ & \ddots & \\ & & U_k \end{pmatrix}.$$

根据定理 2.1, 我们可得到另外一组依赖于 $\hat{Q}$ 和 $\hat{C}_1 (= \hat{P}_1^T B)$ 的解 $\hat{a}_p^* (1 \leq p \leq n)$, $\hat{b}_q^* (1 \leq q \leq n-1)$, $\hat{c}_t^* (1 \leq t \leq n-2)$, 具体表达式类似于 (2.7), (2.11), (2.15) 式. 但是

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \sigma_i \hat{Q}_{f,i} (\hat{C}_1)_{i,h} &= [\sigma_1 Q_{f,1}, \dots, \sigma_n Q_{f,n}] \begin{pmatrix} U_1 & & \\ & \ddots & \\ & & U_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1^T & & \\ & \ddots & \\ & & U_k^T \end{pmatrix} P_1^T \begin{pmatrix} B_{1,h} \\ \vdots \\ B_{n,h} \end{pmatrix} \\ &= \sum_{i=1}^n \sigma_i Q_{f,i} (C_1)_{i,h}, \\ \sum_{i=1}^n \sigma_i^2 \hat{Q}_{f,i}^2 &= [\sigma_1 Q_{f,1}, \dots, \sigma_n Q_{f,n}] \begin{pmatrix} U_1 & & \\ & \ddots & \\ & & U_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1^T & & \\ & \ddots & \\ & & U_k^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_1 Q_{f,1} \\ \vdots \\ \sigma_n Q_{f,n} \end{pmatrix} \\ &= \sum_{i=1}^n \sigma_i^2 Q_{f,i}^2. \end{aligned}$$

因此 $\hat{a}_p^* = a_p^* (1 \leq p \leq n)$, $\hat{b}_q^* = b_q^* (1 \leq q \leq n-1)$, $\hat{c}_t^* = c_t^* (1 \leq t \leq n-2)$. 这说明当矩阵 A 是列满秩时, 问题 (1.2) 只有唯一解, 这与引理 2.2 中的结论相符. 从上亦可以看出, 当 $\text{rank}(A) < n$, 问题 (1.2) 的解是与引理 2.1 中的矩阵 $\tilde{V}, \tilde{W}$ 是有关的, 因此也就说明解并不是唯一的.

3 数值算法及数值例子

根据上面的讨论, 给出求解问题 (1.2) 的数值算法如下:

算法 给定实矩阵 $A, B \in \mathbb{R}^{m \times n} (m \geq n)$,

1. 得出矩阵 A 的奇异值分解 $A = P \begin{bmatrix} \Sigma \\ 0 \end{bmatrix} Q^T$, 分块矩阵 $P = [P_1, P_2]$, $P_1 \in \mathbb{R}^{m \times n}$,

计算 $C_1 = P_1^T B$.

2. 按定理 (2.1) 计算 $a_p^* (1 \leq p \leq n)$, $b_q^* (1 \leq q \leq n-1)$, $c_t^* (1 \leq t \leq n-2)$.
3. 得到问题 (1.2) 的解, 若 $\text{rank}(A) = n$, 则该解是问题的唯一解.

例 给定矩阵

$$A = \begin{pmatrix} -4.1 & 4.9 & 4.3 & 6.2 & 6.8 & 0.5 & 1.5 & 8.9 \\ 3.0 & 2.1 & 9.3 & 3.7 & 0.9 & -3.6 & -6.7 & 2.7 \\ 8.7 & 6.4 & 6.8 & 5.7 & 0.3 & -6.3 & -6.9 & 2.5 \\ 0.1 & 3.2 & 2.1 & 4.5 & 6.1 & -7.1 & 7.2 & -8.6 \\ -7.6 & -9.6 & 8.3 & 0.4 & -6.0 & 6.9 & 4.7 & -2.3 \\ -9.7 & 7.2 & 6.2 & 0.2 & 0.1 & 0.8 & -5.5 & -8.0 \\ 9.9 & -4.1 & -1.3 & -3.1 & 0.1 & 4.5 & 1.2 & 9.0 \\ 7.8 & -7.4 & -2.1 & 0 & 1.9 & 4.4 & -4.5 & 2.3 \\ -4.3 & -2.6 & 6.2 & 3.8 & 5.8 & 3.5 & 7.1 & 2.3 \end{pmatrix},$$

$$B = \begin{pmatrix} 4.94 & 3.40 & 9.34 & 0.99 & 1.55 & 4.12 & 4 & 9.2 \\ 0.78 & 3.14 & -2.64 & 1.37 & 1.91 & 9.01 & 1.98 & 8.44 \\ 6.40 & 3.65 & 0 & 8.18 & 4.22 & 0.05 & 6.25 & 3.68 \\ 1.90 & -3.93 & 8.72 & 0 & -8.56 & 2.97 & 7.33 & 6.20 \\ 8.43 & 0 & 2.37 & 8.90 & 4.90 & 0.49 & 3.75 & 7.31 \\ 1.73 & 1.19 & 6.45 & 7.34 & 8.15 & 6.93 & 0 & 1.93 \\ 1.70 & 0.38 & 9.66 & 0 & 0 & 6.50 & 4.19 & 9.04 \\ 9.94 & 4.58 & -6.64 & 3.41 & -4.57 & 9.83 & 0 & 5.69 \\ 4.39 & -8.69 & 8.70 & 1.66 & 0 & 5.52 & 7.93 & 6.38 \end{pmatrix},$$

其中 $\text{rank}(A) = 8$, 计算矩阵 A 的奇异值分解, 得到 A 的奇异值为

$$(25.6126, 24.2777, 19.2189, 16.4819, 12.6274, 7.5266, 4.5672, 72.3510),$$

依算法得问题 (1.2) 的唯一解为

$$X = \begin{pmatrix} 0.0756 & 0.0063 & 0.0560 & & & & & \\ 0.0063 & 0.0851 & 0.0649 & 0.0352 & & & & \\ 0.0560 & 0.0649 & 0.2031 & 0.2108 & 0.1937 & & & \\ & 0.0352 & 0.2108 & 0.2398 & 0.1717 & 0.2154 & & \\ & & 0.1937 & 0.1717 & 0.1541 & 0.2087 & 0.1756 & \\ & & & 0.2154 & 0.2087 & 0.1656 & 0.1434 & 0.1847 \\ & & & & 0.1756 & 0.1434 & 0.1858 & 0.1393 \\ & & & & & 0.1847 & 0.1393 & 0.2218 \end{pmatrix}.$$

参 考 文 献

- [1] Gower J C, Dijksterhuis G B. Procrustes problems[M]. Oxford: Oxford University Press, 2004.
- [2] Watson G A. The solution of orthogonal Procrustes problems for a family of orthogonal invariant norms[J]. Advances in Computational Mathematics, 1994, 2: 393-405.

- [3] Schonemann P. A generalized solution of the orthogonal Procrustes problem[J]. Psychometrika, 1966, 31: 1–10.
- [4] Higham N J. The symmetric procrustes problem[J]. BIT, 1988, 28: 133–143.
- [5] Andersson L E, Elfving T. A constrained procrustes problem[J]. SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, 1997, 18: 124–139.
- [6] 周小庄, 胡锡炎. 实对称五对角矩阵及其特征值反问题 [J]. 湖南大学学报, 1996, 23: 9–14.
- [7] 戴华. Jacobi 矩阵和对称三对角矩阵特征值反问题 [J]. 高等学校计算数学学报, 1990, 12: 1–13.
- [8] 王正盛. 实对称五对角矩阵逆特征值问题 [J]. 高等学校计算数学学报, 2002, 12: 366–376.
- [9] Eberle M G, Maciel M C. Finding the closest Toeplitz matrix[J]. Computational Applied Mathematics, 2003, 1: 1–18.
- [10] Horn R A, Johnson C R. Topics in matrix analysis[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1991.

REAL SYMMETRIC FIVE-DIAGONAL MATRIX PROCRUSTES PROBLEM

Li Jiao-fen , Zhang Xiao-ning

(*School of Mathematics and Computational Science,
Guilin University of Electronic Technology, Guilin, 541004*)

Abstract: In this paper, we study real symmetric five-diagonal Procrustes. By using the singular value decomposition and analytic methods, we find the real symmetric five-diagonal matrix X which minimizes the Frobenius (or Euclidean) norm of $AX - B$, with A and B as given rectangular matrices. Numerical difficulties are discussed and illustrated by example.

Keywords: real symmetric five-diagonal matrix; Procrustes problem

2010 MR Subject Classification: 65F05; 65F30