第25卷 第1期
1999年1月

自 动 化 学 报
ACTA AUTOMATICA SINICA

Vol. 25, No. 1
Jan., 1999

短 文

关于矩阵指数的PADE逼近新算法[1)]

顾传青

（上海大学理学院 上海 201800）

摘 要 基于广义逆矩阵Pade逼近的特点是在保持逼近阶的前提下，在构造过程中不需要用到矩阵的乘法运算. 利用该结果建立矩阵指数 e^{tA}的一种新的非线性逼近算法. 该方法与原Pade近似法相比具有明显的优点，即它对奇异矩阵和高阶矩阵是适用的，并且所得到的算法适合编程上机进行计算. 给出的一个计算实例说明了算法的有效性. 逼近公式的存在性和唯一性得到了证明.

关键词 矩阵指数，广义逆矩阵Pade逼近.

NEW ALGORITHM FOR MATRIX EXPONENTIALS BY PADE APPROXIMATION

GU Chuanqing

(*Science College of Shanghai University, Shanghai* 201800)

Abstract The matrix Pade approximants based on generalized inverse is characterized by keeping approximation order and without multiplication of matrices in the construction process. In this paper, a new nonlinear approximating method for matrix exponential functions is established by means of this result. This method is obviously superior to the original Pade method because it can be applied to singular matrices and higher-order matrices, and the obtained algorithm is suitable to compute on computers. A computational example is given to illustrate the efficiency of the algorithm. Existence and uniqueness of approximation formulas are proven.

Key words Matrix exponentials, generalized inverse matrix Pade approximants.

1 引言

矩阵指数 e^{tA}在线性系统理论及线性算子半群理论中有着特殊的作用. 在现代控制理

1)国家自然科学基金资助项目.

收稿日期 1997-05-26 收到修改稿日期 1997-11-23

论中,无论是齐次状态方程的求解,还是非齐次状态方程的求解,主要是取决于矩阵指数函数 e^{tA}的计算和近似. 根据定义

$$e^{tA}=I+At+\frac{1}{2!}A^2t^2+\frac{1}{3!}A^3t^3+\cdots+\frac{1}{n!}A^nt^n+\cdots, \tag{1}$$

这种级数展开法的缺点是收敛比较慢,与其他方法相比它的计算时间最长. 目前,e^{tA}的计算除了展开法(1)之外,还有非奇异变换法,拉普拉斯变换法,多项式表示法,西勒维斯特插值法和矩阵 Pade 近似法[1]. 其中矩阵 Pade 近似法是用有限多项式逼近 e^{tA}的一种逼近算法. 它的方法是:对任意 t,将 t 分划为 n 个小区间,令 $T=t/n$,$e^{At}=e^{nAT}=e^{AT}\cdots e^{AT}$,故只要计算出 e^{AT}即可. 显然

$$e^{AT}=I+AT+\frac{1}{2!}A^2T^2+\frac{1}{3!}A^3T^3+\cdots+\frac{1}{n!}A^nT^n+\cdots, \tag{2}$$

(2)式的一阶,二阶矩阵 Pade 分别近似为

$$F_1(AT)=(I+\frac{1}{2}AT)(I-\frac{1}{2}AT)^{-1}$$

$$F_2(AT)=(I+\frac{1}{2}AT+\frac{1}{12}A^2T^2)(I-\frac{1}{2}AT+\frac{1}{12}A^2T^2)^{-1}.$$

上述矩阵 Pade 近似法除了计算比较繁琐,表达式含有矩阵 A 的多项式逆等不利因素之外,还有一个重要的限制,即矩阵 A 必须是可逆的. 事实上,在(2)式中设

$$e^{AT}=(a_0+a_1T)(I+b_1T)^{-1}+O(T^3), \tag{3}$$

则应解 $I=a_0$,$A+b_1=a_1$,$\frac{1}{2}A^2+b_1A=0$,得 $b_1=-\frac{1}{2}A^2A^{-1}$,即 A 必须是可逆的.

本文利用文[2]的结果建立 e^{tA}的一种新的非线性逼近算法.

2　广义逆矩阵 Pade 逼近的新算法

设矩阵指数 e^{tA}的级数展开式为

$$\begin{aligned}e^{tA}=&I+At+\frac{1}{2!}A^2t^2+\frac{1}{3!}A^3t^3+\cdots+\frac{1}{n!}A^nt^n+\cdots=\\&C_0+C_1t+C_2t^2+\cdots+C_nt^n+\cdots,\end{aligned} \tag{4}$$

其中　$C_i=\frac{1}{i!}A^i=(c_i^{(uv)})\in R^{d\times d}$,$i=0,1,2,\cdots$,$t\in R$.

设矩阵有理函数 $r(t)=P(t)/q(t)$,其中 $P(t)=(p^{(uv)}(t))\in R^{d\times d}$是矩阵值多项式,$q(t)$是实多项式,若它们满足

$$P(t)-q(t)e^{tA}=O(t^{n+1}),\qquad q(0)\neq 0, \tag{5}$$

$$\partial\{P\}=\max\partial\{P^{(uv)}\}\leqslant n,\qquad \partial\{q\}=2k, \tag{6}$$

$$q(t)\mid \|P(t)\|^2, \tag{7}$$

式中 ∂ 表示多项式的次数,| 表示整除号,

$$\|P\|^2=(P|P)=\mathrm{tr}(P^{\mathrm{T}}P)=\sum_{u=1}^{d}\sum_{v=1}^{d}(p^{(uv)})^2,$$

则称 $r(t)=P(t)/q(t)$是关于 e^{tA}(4)的[$n/2k$]型基于广义逆的矩阵 Pade 逼近,简记为 GMRIe $r_n(t)=P_n(t)/q_{2k}(t)$. 为简明计,下面设 $N=2k$,$\sum_d=\sum_{u=1}^{d}\sum_{v=1}^{d}$.

根据上述定义(5)－(7)，下面给出 GMRIe $r_n(t)=P_n(t)/q_{2k}(t)$的计算步骤.

1)如果 $n=N$：

第一步. 计算 $C_i=\frac{1}{i!}A^i=(c_i^{(uv)})$， $i=0,1,2,\cdots,n$，得 e^{tA}的级数展开式如(4)式.

第二步. 利用$\{C_i,i=0,1,\cdots,n\}$，计算行列式

$$q_N(z)=\begin{vmatrix} 0 & M_{01} & \cdots M_{0,N-1} & M_{0,N} \\ -M_{01} & 0 & \cdots M_{1,N-1} & M_{1,N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ -M_{0,N-1} & -M_{1,N-1} & \cdots 0 & M_{N-1,N} \\ t^N & t^{N-1} & \cdots t & 1 \end{vmatrix}, \tag{8}$$

其中

$$M_{ij}=\sum_d\left(\sum_{l=0}^{j-i-1}c_{l+i+n-N+1}^{(uv)}C_{j-l+n-N}^{(uv)}\right),\ j>i,\ M_{ij}=-M_{ji},j<i. \tag{9}$$

第三步. 根据定义(5)和第二步的结果计算

$$P_n(t)=\left[\left(\sum_{i=0}^{\infty}C_it^i\right)q_N(t)\right]_0^n, \tag{10}$$

式(10)表示两边关于 t 从0到 n 的次数前的系数对应相等，则得 $r_n(t)=P_n(t)/q_N(t)$.

2)如果 $n<N$：

第一步. 定义 $H_i=0$， $i=0,1,\cdots,N-n-1$；

$H_i=C_{i-N+n}$， $i=N-n,N-n+1,\cdots,N$.

第二步. 利用$\{H_i,i=0,1,\cdots,N\}$，计算 $q_N^L(t)$如(8)式.

第三步. 计算

$$P_n(t)=t^{n-N}\left[\left(\sum_{i=0}^{\infty}H_it^i\right)q_N^L(t)\right]_0^N, \tag{11}$$

则 $r_n(t)=P_n(t)/q_N^L(t)$即为所求.

3)如果 $n>N$：

第一步. 计算 $C_i=\frac{1}{i!}A^i=(c_i^{(uv)})$， $i=n-N,n-N+1,\cdots,N$.

第二步. 利用$\{C_i,i=n-N,n-N+1,\cdots,N\}$，计算 $q_N^R(t)$如(8)式.

第三步. 计算

$$P_n(t)=t^{n-N}P_N(t)+q_N^R(t)\left(\sum_{i=0}^{n-N-1}C_i t^i\right), \tag{12}$$

其中

$$P_N(t)=\left[\left(\sum_{i=n-N}^{\infty}C_it^{i+N-n}\right)q_N^R(t)\right]_0^N, \tag{13}$$

则 $r_n(t)=P_n(t)/q_N^R(t)$即为所求.

设 $G_i=\|C_i\|^2,H_{ij}=\sum_d c_i^{(uv)}c_j^{(uv)}$，下面分别给出 $q_2(t),q_4(t)$ 的表达式

$$q_2(t)=\begin{vmatrix} 0 & G_1 & 2H_{12} \\ -G_1 & 0 & G_2 \\ t^2 & t & 1 \end{vmatrix}, \tag{14}$$

$$q_4(t)=\begin{vmatrix} 0 & G_1 & 2H_{12} & 2H_{13}+G_2 & 2H_{14}+2H_{23} \\ -G_1 & 0 & G_2 & 2H_{23} & 2H_{24}+G_3 \\ -2H_{12} & -G_2 & 0 & G_3 & 2H_{34} \\ -2H_{13}-G_2 & -2H_{23} & -G_3 & 0 & G_4 \\ t^4 & t^3 & t^2 & t & 1 \end{vmatrix}. \tag{15}$$

3 存在性和唯一性

定理1(存在性). 设 M_{ij}由公式(9)给出,$N=2k$,如果行列式

$$D_N=\begin{vmatrix} 0 & M_{01} & \cdots & M_{0,N-1} \\ -M_{01} & 0 & \cdots & M_{1,N-1} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ -M_{0,N-1} & -M_{1,N-1} & \cdots & 0 \end{vmatrix}\neq 0, \tag{16}$$

则矩阵指数 e^{tA}的$[n/N]$型 GMRIe $r_n(t)=P_n(t)/q_N(t)$存在.

证. 设 $q_N(t)=q_Nt^N+q_{N-1}t^{N-1}+\cdots+q_0$,由行列式公式(8)不难得到下列齐次方程组

$$\begin{bmatrix} 0 & M_{01} & \cdots & M_{0,N-1} & M_{0,N} \\ -M_{01} & 0 & \cdots & M_{1,N-1} & M_{1,N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ -M_{0,N-1} & -M_{1,N-1} & & 0 & M_{N-1,N} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} q_N \\ q_{N-1} \\ \vdots \\ q_0 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{17}$$

在(17)中取 $q_0=1$得非齐次方程组

$$\begin{bmatrix} 0 & M_{01} & \cdots & M_{0,N-1} \\ -M_{01} & 0 & \cdots & M_{1,N-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ -M_{0,N-1} & -M_{1,N-1} & & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} q_N \\ q_{N-1} \\ \vdots \\ q_1 \end{bmatrix}=-\begin{bmatrix} -M_{0,N} \\ -M_{1,N} \\ \vdots \\ -M_{N-1,N} \end{bmatrix}, \tag{18}$$

于是,式(16)是式(18)有唯一解的条件.

定理2(唯一性)[2]. 如果$[n/N]$型 GMRIe 存在,$N=2k$,则 $r_n(t)=P_n(t)/q_N(t)$必唯一.

4 算例

例1[1]. 设 $A=\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & -2 \end{bmatrix}$,

$$e^{tA}=\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}+\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & -2 \end{bmatrix}t+\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}t^2+\cdots=C_0+C_1t+C_2t+\cdots, \tag{19}$$

因为 $A=C_1=\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & -2 \end{bmatrix}$不可逆,故按矩阵 Pade 近似法[1],相应的逼近式不存在(见式(2),(3)). 由于 $M_{01}=\|C_1\|^2=5$,$D_2=\begin{vmatrix} 0 & M_{01} \\ -M_{01} & 0 \end{vmatrix}=25\neq 0$,依定理1,$[n/2]$型 GMPAe 存在.

1)求[2/2]型 GMPAe:由(14)得

$$q_2(t)=\begin{vmatrix}0 & 5 & -10\\ -5 & 0 & 5\\ t^2 & t & 1\end{vmatrix}=25(t+1)^2,$$

其中

$$M_{01}=G_1=\|C_1\|^2=5,$$

$$M_{02}=2H_{12}=\sum_2 c_1^{(uv)}c_2^{(uv)}=-10, M_{12}=G_2=\|C_2\|^2=5,$$

由(10)得

$$P_2(t)=e^{tA}q_2(t)+O(t^3)=25\begin{bmatrix}(t+1)^2 & t(t+1)\\ 0 & 1-t^2\end{bmatrix},$$

即 $r_2(t)=P_2(t)/q_2(t)$是 e^{tA}(19)的[2/2]型 GMRIe. 满足:

(i)$P_2(t)-q_2(t)e^{tA}=O(t^3)$;(ii)$\partial\{P_2\}=2,\partial\{q_2\}=2$;

(iii)$\|P_2\|^2=625(t+1)^2(t^2+2t+2)q(t)\mid\|P_2(t)\|^2$.

2)求[1/2]型 GMRIe:定义 $H_0=O,H_1=C_0=I,H^2=C_1$. 由式(14),(11)分别得

$$q_2^L(t)=\begin{vmatrix}0 & 2 & -4\\ -2 & 0 & 5\\ t^2 & t & 1\end{vmatrix}=2(5t^2+4t+2),$$

$$P_1(t)=t^{-1}\Big[\Big(\sum_{i=0}^{\infty}H_i t^i\Big)q_2^L(t)\Big]_0^2=4\begin{bmatrix}2t+1 & t\\ 0 & 1\end{bmatrix},$$

即 $r_1(t)=P_1(t)/q_2^L(t)$是 e^{tA}(19)的[1/2]型 GMRIe. 满足:

(i) $P_1(t)-q_2^L(t)e^{tA}=O(t^2)$; (ii) $\partial\{P_1\}=1,\partial\{q_2^L\}=2$;

(iii)$\|P_1\|^2=16(5t^2+4t+2),q_2^L(t)\mid\|P_1(t)\|^2$.

3)求[3/2]型 GMRIe:由$\{C_1,C_2,C_3\}$,再由式(14),(13)分别得

$$q_2^R(t)=\begin{vmatrix}0 & 5 & -\frac{20}{3}\\ -5 & 0 & \frac{20}{9}\\ t^2 & t & 1\end{vmatrix}=\frac{25}{9}(2t+3)^2,\quad P_N(t)=\frac{25}{9}\begin{bmatrix}0 & -2t^2+3t+9\\ 0 & 4t^2-6t-18\end{bmatrix},$$

式中 $N=2$,从而由(12)得

$$P_3(t)=tP_N(t)+q_2^R(t)C_0=\frac{25}{9}\begin{bmatrix}(2t+3)^2 & t(2t+3)(3-t)\\ 0 & (2t+3)(2t^2-4t+3)\end{bmatrix},$$

即 $r_3(t)=P_3(t)/q_2^R(t)$是 e^{tA}(19)的[3/2]型 GMRIe. 满足:

(i)$P_3(t)-q_2^R(t)e^{tA}=O(t^4)$; (ii)$\partial\{P_3\}=3,\partial\{q_2^R\}=2$;

(iii)$\|P_3\|^2=\frac{625}{81}(2t+3)^2[(2t+3)^2+t^2(3-t)^2+(2t^2-4t+3)^2],q_2^R(t)\Big|\|P_3(t)\|^2$.

5 关于稳定性

本文给出的 GMPAe 算法具有很好的数值稳定性. 在例1的 $r_2(t)=P_2(t)/q_2(t)$中取 t

=0.1,则得到近似值与精确值分别为

$$r_2(0.1)=\begin{bmatrix}1 & 0.0909\\0 & 0.8182\end{bmatrix},e^{At}\Big|_{t=0.1}=\begin{bmatrix}1 & 0.0907\\0 & 0.8187\end{bmatrix}.$$

由此可见,低阶[2/2]型 GMPAe 的精确度已十分可观.事实上,文[3,pp.297-308]在讨论抛物型方程的数值解时,列举了 $e^{-\Delta tA}$(式中 Δt 是时间步长,A 是实矩阵)的四种逼近方法,其中矩阵 Pade 逼近的稳定性最好.另一方面,对大规模 A 阵(即高阶 A 阵)的计算和逼近来说,GMPAe 算法具有不增加计算的复杂性和影响计算的稳定性的独特的优越性.这是由于:(i)GMPAe 算法不必计算 A 阵的逆阵,(ii)对取定的 $r_n(t)=P_n(t)/q_N(t)$,$q_N(t)$的行列式元素 M_{ij}的计算是由系数矩阵 $C_i=(c_i^{(uv)})$的对应元素的乘积之和而得到的(见(9)式),$q_N(t)$的行列式的阶数没有随 A 阵的阶数增加而增加.

参 考 文 献

1 阙志宏.线性系统理论.西安:西北工业大学出版社,1995.

2 顾传青.基于广义逆的矩阵 Pade 逼近.计算数学,1997,**19**(1):19-28.

3 徐献瑜,李家楷,徐国良.Pade 逼近概论.上海:上海科技出版社,1990.

4 顾传青,陈之兵.矩阵有理插值及其误差公式.计算数学,1995,**17**(1):73-77

5 顾传青.关于矩阵切触有理插值.高等学校计算数学学报,1996,**18**(2):135-141.

顾传青 1955年生于上海.1988年于合肥工业大学计算数学专业获理学硕士学位.1993年评为教授.现在上海大学数学系计算数学教研室任教.研究方向为非线性逼近理论与方法研究,尤其是矩阵函数的非线性逼近理论及其在现代控制理论方面的应用.近年来,发表论文40篇,出版专著1本.