基于广义逆的矩阵 PADE 逼近的 Pfaffian 计算公式及其应用*1)

顾传青

（上海大学理学院）

PFAFFIAN FORMULA FOR GENERALIZED INVERSE MATRIX PADE APPROXIMATION AND APPLICATION

Gu Chuan-qing

(Science College of Shanghai University)

Abstract

A new matrix Pade approximants (GMPA) based on generalized inverse was at first introduced by [1]. The aim of this paper is to give a Pfaffian formula for denominator polynomial of GMPA, which should represent the denominator more accurately than the standard determinantal form in [1]. The result derive from Cayley theorem [6] which states that the determinant of a bordered zero-axial skew-symmetric matrix is the product of two Pfaffians. As a important result, the Pfaffian formula of denominator polynomial of type [4/4] for GMPA is established and is applied to approximate matrix exponential functions.

§1. 引　　言

矩阵 Pade 逼近在变分原理、原子及初等粒子物理、系统理论的模型简化等领域中已经有深入的实际应用背景 [7,8]. 文献 [1] 给出一种新的基于广义逆的矩阵 Pade 逼近，其特点是：在保持逼近阶的前提下，构造过程中不需要用矩阵的乘法运算，没有左、右 Pade 逼近的区别，从而拓宽了应用范围 (对奇异矩阵是适用的，见下面例 2). 并可以用两种不同的格式计算出来，即分母多项式的行列式公式和矩阵 ε- 算法.

设矩阵值幂级数为

$$f(z) = C_0 + C_1 z + C_2 z^2 + \cdots + C_n z^n + \cdots, \tag{1.1}$$

* 1997 年 5 月 4 日收到.

1) 国家自然科学基金资助项目.

其中

$$C_i = (c_i^{(st)}) \in C^{d\times d}, \quad z \in C.$$

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

$$P(z) - q(z)f(z) = O(z^{n+1}), \quad P(0)/q(0) \text{ 为有限值}, \tag{1.2}$$

$$\partial\{P\} = \max\partial\{p^{(st)}\} \le n, \quad \partial\{q\} = 2k, \tag{1.3}$$

$$q(z) \| P(z)\|^2, \tag{1.4}$$

式中 “∂” 表示多项式的次数， “$|$” 表示整除号.

$$\|P\|^2 = (P|P) = tr(P^H P) = \sum_{s=1}^{d}\sum_{t=1}^{d} |p^{(st)}|^2,$$

则称 $r(z) = P(z)/q(z)$ 是关于 (1.1) 的 $[n/2k]$ 型基于广义逆的矩阵 Pade 逼近，简记为 GMPA.

下面记 $\sum_d = \sum_{s=1}^{d}\sum_{t=1}^{d}$ 设矩阵 M 由下面 (1.5) 所表示，即 $q(z) = \det M$.

设 $r(z) = P(z)/q(z)$ 是 $[n/2k]$ 型 GMPA, 由 [1] 中定理 2 得

$$q(z) = \begin{vmatrix} 0 & M_{12} & \cdots & M_{1,2k} & M_{1,2k+1} \\ M_{21} & 0 & \cdots & M_{2,2k} & M_{2,2k+1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ M_{2k,1} & M_{2k,2} & \cdots & 0 & M_{2k,2k+1} \\ z^{2k} & z^{2k-1} & \cdots & z & 1 \end{vmatrix}, \tag{1.5}$$

其中

$$M_{ij} = \sum_d \Big(\sum_{l=0}^{j-i-1} c_{l+i+n-2k}^{(st)} c_{j-l+n-2k-1}^{(st)} \Big), \quad j > i, \tag{1.6}$$

$$M_{ij} = -M_{ji}, \quad j < i. \tag{1.7}$$

本文利用 Cayley 定理给出基于广义逆矩阵的 Pade 逼近的分母行列式公式的 Pfaffian 计算公式，即

$$q(z) = q^{pf}(z) q^{pf}(0). \tag{1.8}$$

因为 $q^{pf}(0)$ 是一个常数，故 Pfaffian 计算公式 (1.8) 比行列式公式 (1.5) 的数值计算更加稳定，同时，计算格式也更加简化. 作为一个重要的应用，本文给出了 [4/4] 型基于广义逆的矩阵 Pade 逼近的分母多项式 $q(z)$ 的准确而实用的 Pfaffian 计算公式.

该公式大大地简化了计算量 (见 (2.19), (2.20) 和例 2), 使高阶矩阵 Pade 逼近的计算进入实用阶段. 矩阵指数函数 e^{tA} 的一个详尽的计算实例说明了 Pfaffian 公式的有效性和优越性. 本文的部分结果是文献 [9] 的方法在矩阵情形中的推广和发展.

§2. Pfaffian 公式

按照文献 [9] 的记号, 设 K_n 是具有 $n=2m$ 顶点的图的集合, 每个排列 $\sigma\in S(n)$ 确定一个关于边 $\{\sigma(2i-1),\sigma(2i)\}_{i=1}^m$ 的完全匹配 $\pi(\sigma)$. 由于 $\pi(\sigma)$ 与边的方向和次序都无关, 故得出同样一个 $\pi(\sigma)$ 应有 $2^m m!$ 种不同的排列 σ. 设任意一个反对称矩阵 $A\in C^{2m\times 2m}$, 定义

$$\pi(\sigma)=\operatorname{sign}\sigma\prod_{i=1}^{m}a_{\sigma(2i-1),\sigma(2i)},\tag{2.1}$$

那么矩阵 A 的 Pfaffian 公式定义为

$$PfA=\sum\pi(\sigma),\tag{2.2}$$

其中和号表示对 K_n 中所有不同的完全匹配 $\pi(\sigma)$ 求和. 记 $A_{/i;j}$ 是从矩阵 A 中去掉第 i 行和第 j 列而得到的子阵.

引理 1 (Caley[6]). 设 A 是一个行, 列为偶数的方阵, 子阵 $A_{/v;v}$ 是一个反对称矩阵, $R.C$ 分别表示仅改变矩阵 A 的第 v 行, 第 v 列而形成的反对称矩阵, 则成立

$$\det A=PfR\cdot PfC.\tag{2.3}$$

引理 2.

$$q(z)=q^{Pf}(z)q^{Pf}(0).\tag{2.4}$$

证明. 从 (1.5) 可以推出

$$q(z)=\sum_{j=0}^{2k}z^{2k-j}(-1)^j\det M_{/2k+1;j+1}.\tag{2.5}$$

设

$$q^{Pf}(z)=\sum_{j=0}^{2k}z^{2k-j}(-1)^jPf\det M_{/j+1;j+1},\tag{2.6}$$

则从 (2.6) 得

$$q^{Pf}(0)=PfM_{/2k+1;2k+1}.\tag{2.7}$$

根据引理 1 知

$$\det M_{/2k+1;j}=PfM_{/j;j}PfM_{/2k+1;2k+1}.\tag{2.8}$$

将 (2.8) 代入 (2.5), 并由 (2.6), (2.7) 得 (2.4) 成立.

定理 1. 定义 Pfaffian 公式

$$\varphi(z)=\begin{vmatrix} M_{12} & M_{13}\cdots & M_{1,2k+1} & z^{2k} \\ & M_{23}\cdots & M_{2,2k+1} & z^{2k-1} \\ & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & M_{2k,2k+1} & z \\ & & & 1 \end{vmatrix}, \tag{2.9}$$

则成立

$$\text{(i)} \qquad \varphi(z)=q^{Pf}(z), \tag{2.10}$$

$$\text{(ii)} \qquad q(z)=\varphi(z)\varphi(0). \tag{2.11}$$

证明. 从 (2.6), (2.7) 知

$$q^{Pf}(0)=\begin{vmatrix} M_{12} & M_{13} & \cdots & M_{1,2k} \\ & M_{23} & \cdots & M_{2,2k} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & M_{2k-1,2k} \end{vmatrix}. \tag{2.12}$$

应用 Sylvester 定理:

$$D\cdot D_{/2k+1,2k+2;2k+1,2k+2}=D_{/2k+1;2k+1}\cdot D_{/2k+2;2k+2}-D_{/2k+1;2k+2}\cdot D_{/2k+2;2k+1} \tag{2.13}$$

到反对称矩阵的行列式

$$D=\begin{vmatrix} 0 & M_{12} & \cdots & M_{1,2k+1} & z^{2k} \\ -M_{12} & 0 & \cdots & M_{2,2k+1} & z^{2k-1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ -M_{1,2k+1} & -M_{2,2k+1} & \cdots & 0 & 1 \\ -z^{2k} & -z^{2k-1} & \cdots & -1 & 0 \end{vmatrix}. \tag{2.14}$$

可以推出下列结论:

(i) $\varphi(z)=Pf(D)$, 从 (2.7), (2.12) 得

$$\varphi(0)=Pf(D|_{z=0})=q^{Pf}(0). \tag{2.15}$$

(ii) $q(z)=-D_{/2k+1;2k+2}=D_{/2k+2;2k+1}$.

(iii) $D_{/2k+1;2k+1}=0$, 这是因为它是一个行, 列为奇数的反对称矩阵的行列式. 因此, 从 (1.5), (2.13) 得到

$$D\cdot q(0)=q(z)^2. \tag{2.16}$$

利用引理 1

$$D = Pf(D)^2 = \varphi(z)^2,$$

$$q(0) = Pf(q(0))^2 = Pf(D|_{z=0})^2 = \varphi(0)^2 = q^{Pf}(0)^2,$$

将上式代入 (2.16) 得

$$q(z)^2 = \varphi(z)^2\varphi(0)^2. \tag{2.17}$$

从 (1.4) 知 $q(z) \geq 0$, 则 (2.11) 由 (2.17) 得证.

由 (2.11), (2.15) 并利用引理 2 知 (2.10) 成立.

例 1. 设 [4/4] 型基于广义逆矩阵 Pade 逼近的分母行列式为

$$q_4(z) = \begin{vmatrix} 0 & G_1 & 2H_{12} & 2H_{13}+G_2 & 2H_{14}+2H_{23} \\ -G_1 & 0 & G_2 & 2H_{23} & 2H_{24}+G_3 \\ -2H_{12} & -G_2 & 0 & G_3 & 2H_{34} \\ -2H_{13}-G_2 & -2H_{23} & -G_3 & 0 & G_4 \\ z^4 & z^3 & z^2 & z & 1 \end{vmatrix}, \tag{2.18}$$

其中 $G_i = \|G_i\|^2$, $H_{ij} = \sum\limits_{d} c_i^{(st)} c_j^{(st)}$. 根据定理 1 知 $q_4(z) = \varphi(z)\varphi(0)$, 其中

$$\varphi(z) = \begin{vmatrix} G_1 & 2H_{12} & 2H_{13}+G_2 & 2H_{14}+2H_{24} & z^4 \\ & G_2 & 2H_{23} & 2H_{24}+G_3 & z^3 \\ & & G_3 & 2H_{34} & z^2 \\ & & & G_4 & z \\ & & & & 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a & b & c & d & z^4 \\ & e & f & g & z^3 \\ & & h & j & z^2 \\ & & & k & z \\ & & & & 1 \end{vmatrix}$$

$$\begin{aligned} &= (ah - bf + ce) + (de + ja - gb)z + (ak - gc + df)z^2 \\ &\quad + (jc - bk - hd)z^3 + (gh + ek - jf)z^4, \end{aligned} \tag{2.19}$$

$$\varphi(0) = \begin{vmatrix} a & b & c \\ & e & f \\ & & h \end{vmatrix} = (ah - bf + ce). \tag{2.20}$$

由 (2.19), (2.20) 立即得到 $q_4(z) = \varphi(z)\varphi(0)$ 的实用而大为简化的 Pfaffian 计算公式.

§3. 算　例

例 2[10]. 设

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & -2 \end{bmatrix},$$

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

根据 (2.18), (2.19) 和 (2.20) 得

$$\begin{aligned}\varphi(t)=&\begin{vmatrix}a&b&c&d&t^4\\&e&f&g&t^3\\&&h&j&t^2\\&&&k&t\\&&&&1\end{vmatrix}=(ah-bf+ce)+(de+ja-gb)t+(ak-gc+df)t^2\\&+(jc-bk-hd)t^3+(gh+ek-jf)t^4\\=&(25/81)(t^4+6t^3+15t^2-18t+9),\ \varphi(0)=25/9,\end{aligned}$$

则

$$q_4(t)=\varphi(t)\varphi(0)=(625/729)(t^4+6t^3+15t^2-18t+9),$$

其中

$$a=\|C_1\|^2=5,\ b=2\sum_2 c_1^{(st)}c_2^{(st)}=-10,$$

$$c=2\sum_2 c_1^{(st)}c_3^{(st)}+\|C_2\|^2=3/35,$$

$$d=2\sum_2 c_1^{(st)}c_4^{(st)}+2\sum_2 c_2^{(st)}c_3^{(st)}=-10,$$

$$e=\|C_2\|^2=5,\ f=2\sum_2 c_2^{(st)}c_3^{(st)}=-20/3,$$

$$g=2\sum_2 c_2^{(st)}c_4^{(st)}+\|C_3\|^2=50/9, h=\|C_3\|^2=20/9,$$

$$j=2\sum_2 c_3^{(st)}c_4^{(st)}=-20/9, k=\|C_4\|^2=5/9.$$

由 (1.2) 求得矩阵多项式

$$\begin{aligned}P_4(t)=&e^{tA}q_4(t)+O(t^5)\\=&\frac{625}{729}\begin{bmatrix}t^4+6t^3+15t^2-18t+9&3t(-8t^3+13t^2-9t+3)\\0&49t^4-72t^3+69t^2-36t+9\end{bmatrix}.\end{aligned}$$

参 考 文 献

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

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

[3] 顾传青，关于矩阵切触有理插值，高等学校计算数学学报， **2** (1996), 135–141.

[4] 顾传青，朱功勤，矩阵有理逼近，数学研究与评论， **2** (1996), 301–305.

[5] Gu Chuan-qing, bivariate matrix valued rational interpolation, *J. Comput. Appl. Math.*, **80** (1997), 71–82.

[6] A. Cayley, Theoreme sur les determinants gauches, *Crelle's J.,* **55** (1857), 277–278.

[7] Baker, P.R. Graves-Mories, Pade approximants, PartII, Addison-wesley Publishing Company, 1981.

[8] E.B. Saff, R.H. Varga, pade and rational approximation, Academic Press, New York, 1977.

[9] P.R. Gravess-Morris, George A. Baker Jr., C.F. Woodcock, Cayley's theorem and its application in the theory of vector pade appromants, *J. Comput. Appl. Math.,* **66** (1996), 255–265.

[10] 阙志宏，线性系统理论，西北工业大学出版社， 1995.