فرهنگ و اندیشهٔ ریاضی

سال ۴۲، شمارهٔ ۲ (پاییز و زمستان ۱۴۰۲) صص. ۲۰۵ تا ۲۲۰

تجزیهٔ قطبی ماتریسی: کاربردها و روش‌های محاسبه

حمید اسمعیلی

چکیده. در این مقاله به معرفی یک تجزیهٔ ماتریسی مهم و پرکاربرد با نام تجزیهٔ قطبی می‌پردازیم که تعمیم نمایش قطبی اعداد مختلط به ماتریس‌های مختلط است. چندین کاربرد مهم تجزیهٔ قطبی ماتریسی را در زمینه‌های مختلف بیان می‌کنیم. همچنین، بعضی از روش‌های تکراری را برای محاسبهٔ تجزیهٔ قطبی ماتریسی ذکر کرده و مرتبهٔ همگرایی آن‌ها را بیان می‌کنیم.

۱ مقدمه: معرفی تجزیهٔ قطبی ماتریسی

احتمالاً خواننده با تجزیه‌های ماتریسی مهم مانند تجزیهٔ LU، تجزیهٔ چولسکی، تجزیهٔ QR، تجزیهٔ طیفی، تجزیهٔ URV، و تجزیهٔ مقدار تکین (SVD) آشنا باشد. تجزیهٔ قطبی ماتریسی[1] نیز یکی از تجزیه‌های ماتریسی است که نخستین‌بار در سال ۱۹۰۲ مطرح شد و اخیراً مورد توجه قرار گرفته است [۸، ۹، ۱۱، ۱۲]. تاریخچه‌ای مفصّل از این تجزیه را می‌توان در [۱۳] پیدا کرد. تجزیهٔ قطبی، درواقع، شالودهٔ تجزیهٔ مقدار تکین است و همان‌طورکه می‌دانیم مقادیر تکین و تجزیهٔ مقدار تکین نقش مهمی در محاسبات ماتریسی و فشرده‌سازی داده‌ها (توسط تقریب یک ماتریس مفروض با ماتریسی کم‌رتبه) دارند. نابرابری‌های فراوانی در مورد مقادیر تکین وجود دارند ولی تقریب و نابرابری‌ها انگیزهٔ اصلی پیدایش مقادیر تکین نبودند.

متخصصان هندسهٔ دیفرانسیل و جبردان‌های قرن نوزدهم می‌خواستند بدانند که چطور می‌توانند هم‌ارزی صورت‌های دوخطی حقیقی $\varphi_A(x,y) = x^T Ay$ و $\varphi_B(x,y) = x^T By$ را تحت

عبارات و کلمات کلیدی: تجزیهٔ ماتریسی، تجزیهٔ قطبی، روش تکراری، مرتبهٔ همگرایی

نوع مقاله: مروری؛ تاریخ دریافت: ۱۴۰۱/۹/۸؛ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۱/۱۱/۱

1. matrix polar decomposition

© ۱۴۰۲(انجمن ریاضی ایران)

doi: 10.30504/mct.2023.1348.1940

جانشانی‌های متعامد مستقل تعیین کنند، یعنی، آیا ماتریس‌های متعامد $Q_۱, Q_۲ \in \mathbb{R}^{n\times n}$ وجود دارند به‌طوری‌که به‌ازای هر $x, y \in \mathbb{R}^n$، $\varphi_A(x,y) = \varphi_B(Q_۱x, Q_۲y)$؟ (در این مقاله، از C^T و D^*، به ترتیب، برای نشان‌دادن ترانهادهٔ C و ترانهادهٔ مزدوج D استفاده می‌کنیم).

یک رهیافت برای این مسئله می‌توانست پیداکردن آن صورت متعارفی باشد که توسط جانشانی‌های متعامد در هر چنین صورت دوخطی به دست آید، یا رهیافت پیداکردن مجموعهٔ کاملی از ناورداها برای صورت‌های دوخطی تحت جانشانی‌های متعامد. در سال ۱۸۷۳، بلترامی[1]، هندسه‌دان ایتالیایی، و مستقل از او، ژوردان[2]، جبردان فرانسوی، در سال ۱۸۷۴، رهیافتی برای هر دو منظور ارائه کردند. بلترامی کشف کرد که به‌ازای هر ماتریس $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ همواره ماتریس‌های متعامد حقیقی $Q_۱$ و $Q_۲$ وجود دارند به‌طوری‌که $Q_۱^T A Q_۲ = \Sigma = \operatorname{diag}(\sigma_۱(A), \dots, \sigma_n(A))$ یک ماتریس قطری نامنفی است که در آن $\sigma_۱^۲(A) \geq \cdots \geq \sigma_n^۲(A)$ ویژه‌مقدارهای AA^T (و نیز A^TA) هستند. به‌علاوه، او مشاهده کرد که ستون‌های $Q_۱$ و $Q_۲$، به ترتیب، ویژه‌بردارهای AA^T و A^TA هستند. هرچند بلترامی هیچ نامی به عناصر این صورت متعارف نداد، ولی این همان چیزی است که ما اکنون با نام تجزیهٔ مقدار تکین برای ماتریس‌های مربعی حقیقی می‌شناسیم. ژوردان از نگاه دیگری به همان صورت متعارف بلترامی رسید. ژوردان دریافت که ویژه‌مقدارهای (لزوماً حقیقی) ماتریس متقارن

$$\begin{bmatrix} ۰ & A \\ A^T & ۰ \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{۲n\times ۲n}$$

موسوم به ماتریس ژوردان–ویلانت[3] به‌صورت $\pm\sigma_۱(A)$، $\pm\sigma_۲(A)$، ...، $\pm\sigma_n(A)$ هستند.

همهٔ پژوهش‌های انجام‌شده محدود به فضای حقیقی بود تا آنکه اوتُنه[4] در سال ۱۹۰۲ نشان داد که هر ماتریس ناتکین $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ را می‌توان به‌صورت $A = UP$ تجزیه کرد، که در آن $U \in \mathbb{C}^{n\times n}$ یکانی و $P \in \mathbb{C}^{n\times n}$ معیّن مثبت ارمیتی است. اوتُنه به کمک این تجزیه (که مطابق تعریف ۱.۱ آن را تجزیهٔ قطبی ماتریسی می‌نامیم) نشان داد که ماتریس‌های A^*A و AA^* متشابه‌اند و نتیجه گرفت که هر ماتریس $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ (تکین یا ناتکین) را می‌توان به‌صورت $A = V\Sigma W^*$ تجزیه کرد، که در آن $V, W \in \mathbb{C}^{n\times n}$ یکانی هستند و Σ یک ماتریس قطری نامنفی است. بااین‌حال، او نامی به درایه‌های قطری Σ نداد. اوتُنه ثابت کرد که عامل نیمه‌معیّن مثبت Σ اساساً به‌طور یکتا توسط A تعیین می‌شود، ولی V و W این‌چنین نیستند. او همچنین

1. Eugenio Beltrami 2. Camille Jordan 3. Helmut Wielandt 4. Léon Autonne

مجموعهٔ تمام عامل‌های یکانی V و W متناظر با A را مشخص کرد. او ثابت کرد که هرگاه A حقیقی باشد عامل‌های یکانی V و W را می‌توان حقیقی انتخاب کرد و تأکید کرد که با نوشتن

$$A = V\Sigma W^* = (VW^*)(W\Sigma W^*) = (V\Sigma V^*)(VW^*)$$

می‌توان تجزیهٔ قطبی را به ماتریس‌های مربعی تکین نیز تعمیم داد. هرچند اوتُنه تجزیهٔ مقدار تکین یک ماتریس غیرمربعی را در نظر نگرفت ولی این حالت کلی‌تر به‌سادگی از حالت مربعی نتیجه می‌شود. در سال ۱۹۳۱، وینتر[1] و مرناهن[2] دوباره تجزیهٔ قطبی یک ماتریس مربعی ناتکین مختلط را کشف کردند و نشان دادند که همواره می‌توان A را به‌صورت $A = PU = UQ$ با همان ماتریس یکانی U ولی احتمالاً با ماتریس‌های نیمه‌معیّن مثبت P و Q متفاوت تجزیه کرد. همچنین آن‌ها دریافتند که می‌توان از انتخاب $P = Q$ استفاده کرد اگر و تنها اگر A یک ماتریس نرمال (یعنی، $A^*A = AA^*$) باشد. به نظر می‌رسد که آن‌ها از کارهای پیشین اوتُنه در مورد تجزیهٔ قطبی کاملاً بی‌خبر بوده‌اند.

در سال ۱۹۳۵ ویلیامسون[3] صورت کاملی از تجزیهٔ قطبی برای ماتریس‌های مستطیلی مختلط را ارائه و به هر دو کار قبلی اوتُنه و وینتر–مرناهن برای حالت مربعی اشاره کرد. اثبات ویلیامسون نیز مانند اثبات اوتُنه با تجزیهٔ طیفی ماتریس‌های ارمیتی AA^* و A^*A شروع می‌شود. ویلیامسون نامی از تجزیهٔ مقدار تکین نمی‌برد و به نظر می‌رسد که تجزیهٔ مقدار تکین برای ماتریس‌های مستطیلی مختلط نتیجه‌ای از کار او نباشد.

اگر $A = [c]$ یک ماتریس مختلط ۱×۱ ناصفر باشد آنگاه $A = e^{i\theta}r = UH$ که در آن $H = r = |c| = \sqrt{\bar{c}c} > ۰$، $U = e^{i\theta}$، و $U^*U = ۱$. ازاین‌رو تجزیهٔ قطبی ماتریسی تعمیم نمایش قطبی اعداد مختلط به ماتریس‌های مختلط تعبیر می‌شود.

تعریف ۱.۱ (تجزیهٔ قطبی ماتریسی). اگر A یک ماتریس مختلط $m \times n$ باشد آنگاه تجزیهٔ قطبی A عبارت است از

$$A = UH \qquad (۱.۱)$$

که در آن $H \in \mathbb{C}^{n\times n}$ یک ماتریس نیمه‌معیّن مثبت ارمیتی است و $U \in \mathbb{C}^{m\times n}$ در یکی از

1. A. Winter 2. F. D. Murnaghan 3. J. Williamson

شرایط زیر صدق می‌کند.

$$\begin{aligned} U^*U &= I_n, \qquad m \geq n; \\ UU^* &= I_m, \qquad m \leq n. \end{aligned} \tag{۲.۱}$$

به H عامل ارمیتی و به U عامل یکانی تجزیهٔ قطبی ماتریسی (۱.۱) گفته می‌شود.

در (۲.۱) ماتریس I_k نشان‌دهندهٔ ماتریس همانی مرتبهٔ k است. شرط اول به معنی آن است که ستون‌های ماتریس U یکامتعامدند. اگر $m = n$ آنگاه U یکانی است و درنتیجه $U^{-1} = U^*$. به‌ازای $m < n$ سطرهای U یکامتعامدند.

ملاحظه ۲.۱. تجزیهٔ قطبی ماتریسی معمولاً برای حالت $m \geq n$ بیان می‌شود. برای $m < n$ می‌توان از تعریف $A = HU$ نیز استفاده کرد که در آن H نیمه‌معیّن مثبت ارمیتی است و U سطرهای یکامتعامد دارد.

قضیهٔ زیر وجود و یکتایی تجزیهٔ قطبی ماتریسی را نشان می‌دهد.

قضیه ۳.۱ ([۱۳]). فرض کنید $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$.

۱) اگر $m \leq n$ آنگاه $A = PY$ که در آن $P \in \mathbb{C}^{m\times m}$ نیمه‌معیّن مثبت ارمیتی است، $P^2 = AA^*$ و $Y \in \mathbb{C}^{m\times n}$ سطرهای یکامتعامد دارد.

۲) اگر $m \geq n$ آنگاه $A = XQ$ که در آن $Q \in \mathbb{C}^{n\times n}$ نیمه‌معیّن مثبت ارمیتی است، $Q^2 = A^*A$ و $X \in \mathbb{C}^{m\times n}$ ستون‌های یکامتعامد دارد.

۳) اگر $m = n$ آنگاه $A = PU = UQ$ که در آن $U \in \mathbb{C}^{n\times n}$ ماتریسی یکانی است، $P, Q \in \mathbb{C}^{n\times n}$ نیمه‌معیّن مثبت ارمیتی‌اند، $P^2 = AA^*$، و $Q^2 = A^*A$.

در تمام حالت‌ها، عامل‌های ارمیتی P و Q به‌طور یکتا توسط A تعیین می‌شوند و ویژه‌مقدارهای آن‌ها همان مقادیر تکین A هستند.

تجزیهٔ قطبی ماتریسی مانند SVD تحت تبدیلات تشابهی یکانی ناوردا است. به‌عبارت‌دیگر، اگر A یک ماتریس مربعی با تجزیهٔ قطبی $A = UH$ باشد و A' به‌طور یکانی با A متشابه باشد، به این معنی که $A' = MAM^*$ با $M^*M = I$، آنگاه $A' = U'H'$ که در آن $U' = MUM^*$ (که یک ماتریس یکانی است) و $H' = MHM^*$ (که یک ماتریس نیمه‌معیّن مثبت ارمیتی است). این ویژگی در تجزیه‌های LU، چولسکی، و QR برقرار نیست.

در این مقاله فرض می‌کنیم که A یک ماتریس حقیقی $m \times n$، $m \geq n$، است (تعمیم به حالت مختلط سرراست است). همچنین، فرض می‌کنیم $A = UH$ تجزیهٔ قطبی A باشد. در حالت حقیقی به U عامل متعامد و به H عامل متقارن می‌گوییم.

تجزیهٔ قطبی ماتریسی و SVD رابطهٔ تنگاتنگی با هم دارند و می‌توان یکی از آن‌ها را با استفاده از دیگری به دست آورد. برای مثال، اگر SVD ماتریس A به‌صورت $A = PDQ$ باشد که در آن $P^{-1} = P^T$، $Q^{-1} = Q^T$، و

$$D = \begin{bmatrix} D_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \qquad D_r = \operatorname{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_r)$$

آنگاه

$$A = PDQ = P(QQ^T)DQ = (PQ)(Q^TDQ) = UH$$

که در آن $U = PQ$ ماتریسی با ستون‌های یکامتعامد و $H = Q^TDQ$ نیمه‌معیّن مثبت است. به‌علاوه، چون $A^TA = H^TU^TUH = H^TH = H^2$، پس $H = (A^TA)^{\frac{1}{2}}$. در این حالت، اگر H_R^{-1} وارونی راست برای H باشد آنگاه $U = AH_R^{-1}$. به‌طورمشابه تجزیهٔ قطبی $A = HU$ به دست می‌آید که در آن $U = PQ$ ماتریسی با ستون‌های یکامتعامد و $H = PDP^T$ نیمه‌معیّن مثبت است. به‌علاوه، چون $AA^T = H^2$، پس $H = (AA^T)^{\frac{1}{2}}$.

روابط بالا نشان می‌دهند که همواره عامل متقارن H در تجزیهٔ قطبی ماتریسی وجود دارد و یکتا است؛ ولی، در حالت کلی، عامل متعامد U یکتا نیست. اگر ماتریس A رتبهٔ ستونی کامل داشته باشد آنگاه عامل متقارن H معیّن مثبت و بنابراین ناتکین است، و درنتیجه عامل متعامد U یکتا خواهد بود

$$U = A(A^TA)^{-\frac{1}{2}} = (AA^T)^{-\frac{1}{2}}A.$$

توجه داریم که اگر عامل متعامد U معلوم باشد عامل متقارن H را می‌توان از رابطهٔ $H = U^TA$ محاسبه کرد. به‌این‌دلیل، بیشتر روش‌های محاسباتی برای تجزیهٔ قطبی ماتریسی سعی در محاسبهٔ عامل متعامد U دارند. یک تعریف انتگرالی برای عامل متعامد U به‌صورت زیر است

$$U = \frac{2}{\pi} A \int_0^\infty (t^2 I + A^TA)^{-1} dt. \qquad (۳.۱)$$

۲ کاربردهایی از تجزیهٔ قطبی ماتریسی

در این بخش به بیان بعضی از کاربردهای تجزیهٔ قطبی ماتریسی می‌پردازیم. قبل از آن، برای درک هندسی تجزیهٔ قطبی ماتریسی مثالی می‌آوریم. فرض کنید می‌خواهیم مربعی با رئوس

$$N_۱ = (۱, ۱), \qquad N_۲ = (۲, ۱), \qquad N_۳ = (۲, ۲), \qquad N_۴ = (۱, ۲)$$

در دستگاه مختصات دکارتی (X, Y) را در دستگاه مختصات جدید (x, y) نمایش دهیم که در آن ارتباط میان این دو دستگاه مختصات چنین است

$$\begin{cases} x = ۱٫۳۰۰X - ۰٫۳۷۵Y \\ y = ۰٫۷۵۰X + ۰٫۶۵۰Y \end{cases}$$

با تبدیل رئوس این مربع از دستگاه مختصات قدیم به دستگاه مختصات جدید خواهیم داشت

$$\begin{aligned} n_۱ &= (۰٫۹۲۵, ۱٫۴۰۰), \qquad & n_۲ &= (۲٫۲۲۵, ۲٫۱۵۰), \\ n_۳ &= (۱٫۸۵۰, ۲٫۸۰۰), \qquad & n_۴ &= (۰٫۵۵۰, ۲٫۰۵۰). \end{aligned}$$

برای پی‌بردن به این نکته که در دستگاه مختصات جدید چه اتفاقی برای مربع افتاده است از تجزیهٔ قطبی ماتریس ضرایب تبدیل بالا استفاده می‌کنیم

$$A = \begin{bmatrix} ۱٫۳۰۰ & -۰٫۳۷۵ \\ ۰٫۷۵۰ & ۰٫۶۵۰ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} ۰٫۸۶۶ & -۰٫۵۰۰ \\ ۰٫۵۰۰ & ۰٫۸۶۶ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} ۱٫۵۰۰ & ۰٫۰۰۰ \\ ۰٫۰۰۰ & ۰٫۷۵۰ \end{bmatrix} = UH$$

تأثیر H بر نقطهٔ (X, Y) در دستگاه مختصات قدیم به نقطهٔ $(x, y) = (۱٫۵X, ۰٫۷۵Y)$ در دستگاه مختصات جدید می‌انجامد. یعنی اِعمال H بر یک نقطه سبب می‌شود که مختص اول آن نقطه ۱٫۵ برابر و مختص دوم آن ۰٫۷۵ برابر شود. با بررسی درایه‌های عامل متعامد U و با استفاده از توابع وارون مثلثاتی ملاحظه می‌کنیم که

$$U = \begin{bmatrix} \cos ۳۰^\circ & -\sin ۳۰^\circ \\ \sin ۳۰^\circ & \cos ۳۰^\circ \end{bmatrix}.$$

به‌این‌ترتیب ماتریس U هر نقطه در دستگاه قدیم را به اندازهٔ ۳۰ درجه در جهت پادساعت‌گرد دوران می‌دهد تا به نقطهٔ متناظر در دستگاه مختصات جدید تبدیل شود. بنابراین، مربع بالا به مستطیلی در دستگاه مختصات جدید تبدیل می‌شود که به اندازهٔ ۳۰ درجه دوران یافته است.

۱.۲ بهترین تقریب متعامد

یکی از کاربردهای تجزیهٔ قطبی ماتریسی پیدا کردن تقریب‌های متعامد برای ماتریس‌ها است. حل‌پذیری این مسئله به نرم استفاده‌شده بستگی دارد و ثابت می‌شود که عامل متعامد U نزدیک‌ترین ماتریس با ستون‌های یکامتعامد به A در نرم دو و نرم فروبنیوس است [۱۱، ۱۲]. به‌عبارت‌دیگر، اگر $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ با شرط $m \geq n$ دارای تجزیهٔ قطبی $A = UH$ باشد، نسبت به نرم دو و نرم فروبنیوس داریم

$$\|A - U\| = \min_{Q\in\mathbb{R}^{m\times n}} \{\|A - Q\| \ : Q^TQ = I\}$$

اگر $m = n$ نتیجهٔ بالا به‌ازای هر نرمی که به‌طور یکانی ناوردا باشد درست است. یک نرم به‌طور یکانی ناوردا نرمی است که به‌ازای همهٔ ماتریس‌های یکانی P و Q در $\|PAQ\| = \|A\|$ صدق کند.

مسئلهٔ $\min \|A - Q\|$، که در آن Q یک ماتریس متعامد دلخواه است، در محاسبات هوافضا ظاهر می‌شود [۱۱]. به‌دلیل خطاهای محاسباتی، ممکن است در محاسبهٔ $Q \in \mathbb{R}^{۳\times ۳}$ (ماتریس کسینوس‌های هادی)، که بردارهای یک دستگاه مختصات را به بردارهای یک دستگاه مختصات دیگر تبدیل می‌کند، ویژگی تعامد از بین برود. در این حالت، می‌توان ماتریس $\widehat{Q}$ محاسبه‌شده را با نزدیک‌ترین ماتریس متعامد به آن، که همان عامل متعامد $\widehat{Q}$ است، جایگزین نمود.

۲.۲ مسئلهٔ تعامد پروکروسْتِس

یک کاربرد دیگر تجزیه قطبی ماتریسی، مسئلهٔ متعامد پروکروسْتِس[1] است که با مفروض‌بودن ماتریس‌های $A, B \in \mathbb{R}^{n\times n}$ به دنبال یافتن ماتریس متعامد $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ هستیم که مقدار $\|A - BQ\|_F$ را کمینه کند. به‌بیان‌دیگر، این مسئله تبدیل متعامد Qای را می‌یابد که BQ از لحاظ کمترین مربعات نزدیک‌ترین ماتریس به A باشد. در این حالت، اگر $B^TA = UH$ یک تجزیهٔ قطبی باشد به‌ازای هر ماتریس متعامد Q،

$$\|A - BU\|_F \leq \|A - BQ\|_F.$$

به‌علاوه، اگر A و B^TA رتبهٔ ستونی کامل داشته باشند جواب مسئلهٔ بالا یکتا است.

1. orthogonal Procrustes problem

مسئلهٔ تعامد پروکروستِس مسئلهٔ مهم و معروفی در مقیاس‌بندی چندبُعدی در آمار است. در آنجا ماتریس‌های A و B مجموعه‌ای از داده‌های تجربی یا نمونه‌های چندمتغیره را نشان می‌دهند و لازم است که بدانیم آیا این مجموعه‌ها تحت دوران هم‌ارز هستند یا خیر [۸، ۹].

۳.۲ بهترین تقریب نیمه‌معیّن مثبت

از تجزیهٔ قطبی ماتریسی می‌توان برای پیدا کردن نزدیک‌ترین ماتریس نیمه‌معیّن مثبت متقارن به ماتریس $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ استفاده کرد. نیکولس هایم در [۱۰] نشان داد که اگر $A = UH$ تجزیهٔ قطبی A باشد آنگاه $A_H = (A + A^T)/۲$ و $X_F = (A_H + H)/۲$ نزدیک‌ترین ماتریس نیمه‌معیّن مثبت یکتا به A نسبت به نرم فروبنیوس است.

تقریب‌های نیمه‌معیّن مثبت کاربردهای مهمی در بهینه‌سازی دارند. مثلاً، در روش نیوتن برای کمینه‌سازی تابع حقیقی $F(x)$ متغیری n لازم است که در هر تکرار جهت کاهشی $p^{(k)}$ با حل دستگاه $G_k p^{(k)} = -g^{(k)}$ محاسبه شود، که در آن $g^{(k)}$ و G_k، به ترتیب، بردار گرادیان و ماتریس هسه‌ای تابع F در نقطهٔ $x^{(k)}$ هستند. اگر G_k معیّن مثبت نباشد جهت $p^{(k)}$ کاهشی نخواهد بود. در این حالت می‌توان G_k را با عامل متقارن آن در تجزیهٔ قطبی جایگزین نمود. اگر G_k ناتکین باشد عامل متقارن آن معیّن مثبت است.

۴.۲ محاسبه ریشهٔ دوم یک ماتریس

با استفاده از تجزیهٔ قطبی ماتریسی می‌توان ریشهٔ دوم ماتریس‌های معیّن مثبت را محاسبه کرد. اگر $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ یک ماتریس معیّن مثبت باشد، آنگاه $B \in \mathbb{R}^{n\times n}$ یک ریشهٔ دوم معیّن مثبت ماتریس A گفته می‌شود هرگاه B معیّن مثبت باشد و $B^۲ = A$. در این حالت می‌نویسیم $B = A^{\frac{۱}{۲}}$. ریشهٔ دوم معیّن مثبت از یک ماتریس معیّن مثبت همواره وجود دارد و یکتا است.

با استفاده از رابطهٔ $H = (A^T A)^{\frac{۱}{۲}}$ در تجزیهٔ قطبی ماتریسی می‌توان ریشهٔ دوم معیّن مثبت ماتریس معیّن مثبت A را حساب کرد [۱۱]. اگر $A = LL^T$ تجزیهٔ چولسکی ماتریس A و H_L عامل متقارن تجزیهٔ قطبی ماتریس L^T باشد آنگاه $H_L = (LL^T)^{\frac{۱}{۲}} = A^{\frac{۱}{۲}}$.

۵.۲ محاسبهٔ تجزیهٔ مقدار تکین

تجزیهٔ مقدار تکین را نیز می‌توان با استفاده از تجزیهٔ قطبی ماتریسی به دست آورد. فرض کنید $A = UH$ تجزیهٔ قطبی A و $H = V\Lambda V^T$ تجزیهٔ طیفی H باشد که در آن V ماتریسی

متعامد و $\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$ ماتریس قطری شامل ویژه‌مقدارها با ترتیب نزولی است. چون H نیمه‌معیّن مثبت است، پس λ_jها اعداد حقیقی نامنفی هستند. در این صورت، با تعریف $P = UV$، $D = \Lambda$، و $Q = V^T$ خواهیم داشت $A = PDQ$ که یک تجزیهٔ مقدار تکین از ماتریس A است.

۳ روش‌های محاسبهٔ عامل متعامد

روش‌های تکراری برای محاسبهٔ تجزیهٔ قطبی ماتریسی معمولاً عامل متعامد U را محاسبه می‌کنند. عامل متقارن H را می‌توان از فرمول

$$H = \frac{1}{2}\left(U^T A + A^T U\right)$$

به دست آورد. از فرمول $H = U^T A$ استفاده نمی‌کنیم چون ممکن است که H به‌دلیل خطاهای گرد کردن متقارن نشود.

روش‌های تکراری برای محاسبهٔ عامل متعامد U دنباله‌ای از ماتریس‌های A_k را، معمولاً به‌صورت $A_{k+1} = g(A_k)$ یا $A_{k+1} = A_k g(A_k^T A_k)$، به‌ازای یک تابع تکرار مناسب g، می‌سازند که به U همگرا است. تقریباً همهٔ این روش‌ها از تقریب اولیهٔ $A_0 = A$ یا $A_0 = \alpha A$، به‌ازای یک $\alpha \in \mathbb{R}$ی مناسب، شروع می‌شوند و تا برقراری نابرابری

$$\|A_{k+1} - A_k\|_1 \leq \delta \|A_{k+1}\|_1$$

ادامه می‌یابند که در آن δ دقت ازپیش تعیین‌شده است.

روش‌های تکراری متعددی برای محاسبهٔ عامل متعامد U پیدا شده‌اند که در ادامه به بیان بعضی از آن‌ها می‌پردازیم [۱، ۲، ۳، ۴، ۵، ۶، ۷، ۱۲، ۱۵، ۱۶]. دسته‌بندی این روش‌ها نوعاً کار آسانی نیست ولی می‌توان بعضی از آن‌ها را در یک قالب کلی بیان کرد.

۱.۳ روش‌های مبتنی‌بر حل معادلهٔ ماتریسی

این‌گونه روش‌ها، عموماً، همان روش‌های عددی شناخته‌شده برای حل معادلهٔ اسکالری $f(x) = x^2 - 1 = 0$ هستند که به‌طور طبیعی برای حل معادلهٔ ماتریسی

$$f(X) = X^T X - I = 0 \qquad (۱.۳)$$

تعمیم یافته‌اند.

فرض کنید که A یک ماتریس حقیقی $n \times n$ ناتکین باشد. هایم برای حل معادلهٔ ماتریسی (۱.۳) از روش نیوتن استفاده می‌کند [۱۲]. درواقع، این روش دنبالهٔ ماتریسی

$$A_0 = A, \qquad A_{k+1} = \frac{1}{2}\left(A_k + A_k^{-T}\right), \quad k \geq 0 \tag{۲.۳}$$

را تولید می‌کند که همگرای مرتبهٔ دو به U است. اگر A تقریباً متعامد باشد تکرارهای کمی برای همگرایی لازم است. هرچند که دنبالهٔ (۲.۳) همگرای مرتبهٔ دو است، ولی ممکن است که همگرایی در تکرارهای آغازین کُند باشد. مثلاً، برای حالت اسکالر $n = 1$ دنبالهٔ (۲.۳) عبارت است از $a_{k+1} = \frac{1}{2}(a_k + \frac{1}{a_k})$. اگر $a_0 = a \gg 1$ آنگاه $a_{k+1} \approx \frac{1}{2}a_k$ و خطا در هر تکرار فقط نصف می‌شود. برای شتاب‌دادن به همگرایی روش (۲.۳) می‌توان در هر تکرار پارامتر شتاب $\gamma_k \neq 0$ را به کار برد و A_k را با $\gamma_k A_k$ جایگزین کرد:

$$A_0 = A, \qquad A_{k+1} = \frac{1}{2}\left(\gamma_k A_k + (\gamma_k A_k)^{-T}\right), \quad k \geq 0 \tag{۳.۳}$$

انتخاب‌های مختلفی برای γ_k ارائه شده‌اند [۱۲]. برخی از آن‌ها عبارت‌اند از

$$\begin{aligned}
\gamma_k^{(\mathrm{opt})} &= \left(\frac{\|A_k^{-1}\|_2}{\|A_k\|_2}\right)^{\frac{1}{2}} \\
\gamma_k^{(1,\infty)} &= \left(\frac{\|A_k^{-1}\|_1 \|A_k^{-1}\|_\infty}{\|A_k\|_1 \|A_k\|_\infty}\right)^{\frac{1}{4}} \\
\gamma_k^{(F)} &= \left(\frac{\|A_k^{-1}\|_F}{\|A_k\|_F}\right)^{\frac{1}{2}} \\
\gamma_k^{(\det)} &= |\det(A_k)|^{-\frac{1}{n}}
\end{aligned}$$

انتخاب بهینه عبارت است از $\gamma_k^{(\mathrm{opt})}$ هرچند که محاسبهٔ آن ساده نیست. با این انتخاب برای γ_k همگرایی بسیار سریع است، حتی وقتی که A بدوضع[1] است. درواقع، در این حالت ثابت شده است که اگر ماتریس A دارای s مقدار تکین متمایز باشد آنگاه $A_s = U$، یعنی همگرایی در s تکرار به دست می‌آید [۱۴]. آزمایش‌های عددی نشان می‌دهند که با $\gamma_k^{(1,\infty)}$ همگرایی تقریباً همواره در حداکثر ده تکرار به دست می‌آید. همچنین، ثابت شده است که روش (۳.۳) سریع‌تر از روش (۲.۳)

1. ill-conditioned

است اگر و تنها اگر $1 \leq \sqrt{\gamma_k} \leq \gamma_k^{(\mathrm{opt})}$. انتخاب $\gamma_k^{(\mathrm{det})}$ بدترین رفتار همگرایی را دارد چون به‌طور مجانبی بهینه نیست.

انتخاب‌های بالا تقریب‌هایی برای $\gamma_k^{(\mathrm{opt})}$ هستند و در عمل انتخاب $\gamma_k^{(1,\infty)}$ بیشترین استفاده را دارد. توجه داریم که $\gamma_k^{(\mathrm{det})}$ را می‌توان در طول روند محاسبهٔ A_k^{-1}، مثلاً با استفاده از تجزیهٔ LU، به دست آورد.

اگر رتبهٔ ستونی A کامل باشد دنبالهٔ (۲.۳) را می‌توان به‌صورت

$$A_0 = \alpha A, \qquad A_{k+1} = \frac{1}{2} A_k \left(I + (A_k^T A_k)^{-1} \right), \quad k \geq 0 \tag{۴.۳}$$

بازنویسی کرد که در آن $\alpha = 1/\sqrt{1 + \|A\|_1 \|A\|_\infty}$. این روش در [۶] معرفی شده است و تعمیم دنبالهٔ (۲.۳) به ماتریس‌های مستطیلی با رتبهٔ کامل است. اگر A بدوضع نباشد دنبالهٔ (۴.۳) خوب کار می‌کند و همگرای مرتبهٔ دو است. به‌هرحال، وجود $A_k^T A_k$ در (۴.۳) یک کاستی به شمار می‌آید زیرا مربع‌شدن ضریب وضعیت را به دنبال دارد و محاسبهٔ وارون این ماتریس نیز باعث بروز مشکل‌های محاسباتی می‌شود.

به‌جای روش (۲.۳) می‌توان از روش هَلی[1] برای حل معادلهٔ ماتریسی (۱.۳) استفاده کرد که همگرای مرتبهٔ سه است و عامل متعامد U را با دنبالهٔ زیر به دست می‌آورد [۷]:

$$A_0 = A, \qquad A_{k+1} = A_k \left(A_k^T A_k + 3I \right) \left(3A_k^T A_k + I \right)^{-1}, \quad k \geq 0 \tag{۵.۳}$$

در اینجا A ماتریسی ناتکین است. این روش را می‌توان برای ماتریس‌های مستطیلی رتبهٔ کامل نیز به کار برد. یک نسخهٔ کاراتر از روش (۵.۳) به‌صورت زیر است:

$$A_0 = A, \qquad A_{k+1} = \frac{1}{3} A_k \left[I + 8 \left(3A_k^T A_k + I \right)^{-1} \right], \quad k \geq 0$$

سلیمانی و همکاران در [۱۸] از یک روش دوگامی برای حل معادلهٔ (۱.۳) استفاده کردند که ترکیبی از روش‌های نوع چبیشف–هَلی و روش نیوتن است. روش آن‌ها از ماتریس آغازین $A_0 = \frac{1}{\beta} A$ شروع می‌شود که در آن β تقریبی برای $\|A\|_2$ است و دنبالهٔ ماتریس‌های

$$\begin{aligned} &Y_k = A_k^* A_k, \quad Z_k = Y_k^2, \quad W_k = Y_k Z_k, \quad L_k = Y_k W_k, \\ &A_{k+1} = A_k [6842I + 53166Y_k + 58766Z_k + 9244W_k] \\ &\qquad \times [812I + 25244Y_k + 69900Z_k + 30844W_k + 1212L_k]^{-1} \end{aligned}$$

1. Edmond Halley

را تولید می‌کند. ثابت شده است که روش بالا همگرای مرتبهٔ ۶ است. انواع دیگری از این‌گونه روش‌ها را می‌توان در [۱۷، ۱۸] مشاهده کرد.

۲.۳ روش‌های مبتنی‌بر تقریب

اگر $z = |z|e^{i\theta}$ یک عدد مختلط باشد داریم

$$e^{i\theta} = \frac{z}{|z|} = \frac{z}{\sqrt{|z|^2}} = \frac{z}{\sqrt{1-q}}, \qquad q = 1 - |z|^2.$$

بنابراین با استفاده از سری تیلر داریم

$$e^{i\theta} = z\left(1 + \frac{1}{2}q + \frac{3}{8}q^2 + \cdots + (-1)^p\binom{-\frac{1}{2}}{p}q^p + \cdots\right).$$

ازاین‌رو، بنابر یک تشابه نام آشنا بین ماتریس‌ها و اعداد مختلط،

$$U = A\left(I + \frac{1}{2}T + \frac{3}{8}T^2 + \cdots\right), \qquad T = I - A^TA,$$

خانوادهٔ روش‌های تکراری مرتبهٔ $p+1$ زیر را بیورک و باوئی به دست آوردند [۱]:

$$\begin{aligned} A_0 &= A, \\ T_k &= I - A_k^TA_k, \quad k \geq 0, \\ A_{k+1} &= A_k\left(I + \frac{1}{2}T_k + \frac{3}{8}T_k^2 + \cdots + (-1)^p\binom{-\frac{1}{2}}{p}T_k^p\right). \end{aligned} \tag{۶.۳}$$

روش (۶.۳) برای ماتریس‌های مستطیلی هم‌کاربرد دارد. به‌ازای $p = 1$ تکرار نیوتن–شولتس[1]

$$A_0 = A, \qquad A_{k+1} = \frac{1}{2}A_k\left(3I - A_k^TA_k\right), \quad k \geq 0 \tag{۷.۳}$$

به دست می‌آید که همگرای مرتبهٔ دو است هرگاه تمام مقادیر تکین A کوچک‌تر از $\sqrt{3}$ باشند. درواقع، این روش را می‌توان به‌عنوان بهبودی برای روش (۲.۳) در نظر گرفت هرگاه A_k^{-T} را فقط با یک تکرار روش نیوتن برای ماتریس وارون تقریب بزنیم: $A_k^{-T} \approx A_k(2I - A_k^TA_k)$.

یک روش همگرای مرتبهٔ $2p$ که برای محاسبات موازی بسیار مناسب است به‌صورت

$$A_0 = A, \qquad A_{k+1} = \frac{1}{p}A_k\sum_{i=1}^{p}\frac{1}{\xi_i}\left(A_k^TA_k + \alpha_i^2I\right)^{-1}, \quad k \geq 0 \tag{۸.۳}$$

1. Newton-Schulz iteration

داده می‌شود [۱۲] که در آن A مستطیلی رتبهٔ کامل و p عددی طبیعی است، همچنین

$$\xi_i = \frac{۱}{۲}\left(۱ + \cos\frac{(۲i-۱)\pi}{۲p}\right), \qquad \alpha_i^۲ = \frac{۱}{\xi_i} - ۱, \quad ۱ \le i \le p.$$

اگر p بزرگ انتخاب شود می‌توان از فرمول‌های پایدار عددی

$$\xi_i = \cos^۲\frac{(۲i-۱)\pi}{۴p}, \qquad \alpha_i^۲ = \tan^۲\frac{(۲i-۱)\pi}{۴p}, \quad ۱ \le i \le p$$

استفاده کرد. روش (۸.۳) درواقع از تقریب انتگرال (۳.۱) برای عامل متعامد U با قاعدهٔ انتگرال‌گیری گاوس–چبیشف نتیجه می‌شود. به‌ازای $p = ۱$ روش تکراری مرتبهٔ دو

$$A_۰ = A, \qquad A_{k+۱} = ۲A_k\left(I + A_k^T A_k\right)^{-۱}, \quad k \ge ۰ \qquad (۹.۳)$$

به دست می‌آید که درواقع عکس روش (۲.۳) است.

بر مبنای روش هَلی (۵.۳)، که همگرای مرتبهٔ سه است، در [۶] خانوادهٔ تک‌پارامتری زیر از روش‌های تکراری معرفی شده است که مرتبهٔ همگرایی آن‌ها حداقل دو است:

$$\begin{aligned} A_۰ &= \alpha A, \\ A_{k+۱} &= A_k\left((۲\beta - ۳)I + A_k^T A_k\right)\left((\beta - ۲)I + \beta A_k^T A_k\right)^{-۱} \end{aligned} \qquad (۱۰.۳)$$

در اینجا $k \ge ۰$، $\beta \ne ۱$، و $\alpha = ۱/\sqrt{۱ + \|A\|_۱\|A\|_\infty}$. به‌ازای $\beta = ۰$ روش (۷.۳)، به‌ازای $\beta = ۲$ روش (۲.۳)، و به‌ازای $\beta = ۳$ روش هَلی (۵.۳) به دست می‌آید. در حالت $\beta \ne ۰, ۱$ برای اهداف محاسباتی بهتر است که روش (۱۰.۳) را به‌صورت زیر بازنویسی کنیم

$$\begin{aligned} A_۰ &= \alpha A \\ A_{k+۱} &= \frac{۱}{\beta}A_k + ۲\left(\frac{\beta - ۱}{\beta}\right)^۲ A_k\left(\frac{\beta - ۲}{\beta}I + A_k^T A_k\right)^{-۱}, \quad k \ge ۰ \end{aligned}$$

۳.۳ روش‌های نوع کووارژیک

کووارژیک[1] یک روش همگرای مرتبهٔ دو برای متعامدسازی تقریبی مجموعه‌ای متناهی از بردارهای

1. Zdislav V. Kovářík

خطی‌ْمستقل در یک فضای هیلبرت ارائه کرد که در هر تکرار آن باید وارون یک ماتریس به‌طور صریح محاسبه شود [۱۵]. روش کووارژیک به‌صورت زیر است

$$\begin{aligned} A_{\circ} &= A \\ K_k &= (I - A_k^T A_k)(I + A_k^T A_k)^{-1} \\ A_{k+1} &= A_k \left(I + K_k\right), \quad k \geq \circ \end{aligned} \tag{۱۱.۳}$$

ثابت شده است که اگر $\|A^T A\|_{۲} < ۱$ آنگاه $\|A_k^T A_k\|_{۲} < ۱$ به‌ازای هر $k \geq ۱$. در این حالت، ماتریس $I + A_k^T A_k$ وارون‌پذیر است و برعکس. به‌علاوه، همواره می‌توان با مقیاس‌بندی A به‌صورت

$$A^{\text{new}} := \frac{۱}{\sqrt{۱ + \|A\|_{۱}\|A\|_{\infty}}} A$$

شرط $\|A^T A\|_{۲} < ۱$ را برقرار کرد. کووارژیک ثابت کرد که اگر ستون‌های A خطی‌ْمستقل باشند دنبالهٔ ماتریس‌های A_k به

$$U = A(A^T A)^{-\frac{۱}{۲}}$$

همگرا است و ستون‌های U یکامتعامدند.

یکی از کاستی‌های روش کووارژیک محاسبهٔ وارون ماتریس $I + A_k^T A_k$، به‌ازای هر k، است. بنابراین بهبودهای مختلف برای روش کووارژیک با تقریب $(I + A_k^T A_k)^{-1}$ به دست می‌آیند. مثلاً، در [۱۶] از $I - ۰٫۵A_k^T A_k$ به‌عنوان تقریبی برای $(I + A_k^T A_k)^{-1}$ استفاده شده است و منجر به بهبود زیر برای روش کووارژیک شده است

$$\begin{aligned} A_{\circ} &= A \\ K_k &= (I - A_k^T A_k)(I - ۰٫۵A_k^T A_k) \\ A_{k+1} &= A_k(I + K_k), \quad k \geq \circ \end{aligned} \tag{۱۲.۳}$$

هیچ دلیل قانع‌کننده‌ای از منشأ این انتخاب بیان نشده است و با استفاده از آزمون‌های عددی نشان داده شده است که روش (۱۲.۳) همگرای خطی است.

در [۳] ردهٔ بهبودهای تک‌پارامتری

$$\begin{aligned} A_۰ &= A \\ K_k &= (I - A_k^T A_k)(I - \alpha A_k^T A_k) \\ A_{k+۱} &= A_k(I + K_k), \quad k \geq ۰ \end{aligned} \tag{۱۳.۳}$$

برای روش کووارژیک (۱۱.۳)، شامل روش (۱۲.۳)، ارائه شده است. روش‌های ردهٔ (۱۳.۳) فقط به‌ازای $\alpha \in [۰/۲۱, ۱)$ همگرا هستند و مرتبهٔ همگرایی آن‌ها خطی است، درحالی‌که مرتبهٔ همگرایی روش (۱۲.۳) دو است. به‌این‌ترتیب، علاوه‌بر اثبات اینکه روش (۱۲.۳)، برخلاف آنچه که تصور می‌شد، همگرای مرتبهٔ دو است، ثابت کردیم که یک روش بهینه در ردهٔ روش‌های (۱۳.۳) نیز است.

در [۴] نیز ردهٔ بهبودهای تک‌پارامتری

$$\begin{aligned} A_۰ &= A \\ K_k &= (I - A_k^T A_k)(\alpha I - \beta A_k^T A_k) \\ A_{k+۱} &= A_k(I + K_k), \quad k \geq ۰ \end{aligned} \tag{۱۴.۳}$$

را که در آن $\alpha = \frac{۷}{۸-۲c}$ و $\beta = \frac{c+۳}{۸-۲c}$، برای روش کووارژیک (۱۱.۳) ارائه کردیم که شامل بهبود (۱۲.۳) است. ثابت کردیم که روش‌های ردهٔ (۱۴.۳) فقط به‌ازای $c \in [-۲, ۲]$ همگرا هستند و مرتبهٔ همگرایی آن‌ها دو است. به‌علاوه، نشان دادیم که در حالت خاص $c = ۰$ یک روش با مرتبه همگرایی سه به دست می‌آید.

مراجع

[1] Björck, Å., Bowie, C., An iterative algorithm for computing the best estimate of an orthogonal matrix, *SIAM J. Numer. Anal.*, **8** (1971), 358-364.

[2] Esmaeili, H., A modification for Kovářík's method, *Lecturas Matematicas*, **27** (2006), 1-12.

[3] Esmaeili, H., A class of modifications for Kovářík's method,*Bull. Belg. Math. Soc. Simon Stevin*, **15** (2008), 377-384.

[4] Esmaeili, H., A quadratically convergent class of modifications for Kovářík's method, *Bull. Belg. Math. Soc. Simon Stevin*, **16** (2009), 617-622.

[5] Esmaeili, H., A class of iterative methods for computing polar decomposition, *Int. J. Comput. Math.*, **88** (2011), 207-220.

[6] Gander, W., Algorithms for the polar decomposition, *SIAM J. Sci. Comput.*, **11** (1990), 1102-1115.

[7] Gander, W., On Halley's iteration method, *Amer. Math. Monthly*, **92** (1985), 131-134.

[8] Gower, J. C., Multivariate analysis: ordination, multidimensional scaling and allied topics, in *Handbook of applicable Mathematics*, vol. VI, E. H. Lioyd, ed., John Wiley, Chichester, 1984.
[9] Gower, J. C., Dijksterhuis, G. B., *Procrustes Problems*, Oxford University Press, 2004.
[10] Higham, N. J., Computing a nearest symmetric positive semidefinite matrix, *Linear Algebra Appl.*, **103** (1988), 103-118.
[11] Higham, N. J., Matrix nearness problems and applications, in *Applications of Matrix Theory*, M. J. C. Gover, S. Barnett, eds., Oxford University prss, 1989, 1-27.
[12] Higham, N. J., Computing the polar decomposition- with applications,*SIAM J. Sci. Comput.*, **7** (1986), 1160-1174.
[13] Horn, R. A., Johnson, C. R., *Topics in Matrix Analysis*, Cambridge University Press, Cambridge, 1985.
[14] Kenney, C., Laub, A. J., On scaling Newtom's method for polar decomposition and the matrix sign function, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, **13** (1992), 688-706.
[15] Kovářík, Z., Some iterative methods for improving orthogonality, *SIAM J. Numer. Anal.*, **7** (1970), 386-389.
[16] Petcu, D., Popa, C., A new version of Kovarik's approximate orthogonalization algorithm without matrix inversion, *Int. J. Comput. Math.*, **82** (2005), 1235-1246.
[17] Soleymani, F., Stanimirović, P. S., Stojanović, I., A noval iterative method for polar decomposition and matrix sign function, *Discrete Dyn. Nat. Soc.*, **2015** (2015), 1-11.
[18] Soleymani, F., Khaksar Haghani, F., Shateyi, S., Several numerical methods for computing unitary polar factor of a matrix, *Adv. Difference Equ.*, **4** (2016), 1-11.

حمید اسمعیلی: دانشگاه بوعلی‌سینا همدان، دانشکدهٔ علوم، گروه ریاضی
رایانامه: esmaeili@basu.ac.ir

Mathematical Culture and Thought
Volume 42, Number 2, Fall/Winter 2023, Pages 205–220
doi: 10.30504/mct.2023.1348.1940

Matrix Polar Decomposition: Computations and Applications

H. Esmaeili [1]

Department of Mathematics, Faculty of Science, Bu-Ali Sina University, Iran

Abstract. In this article, an important and widely used matrix decomposition is introduced. This decomposition, named the matrix polar decomposition, is actually a generalization of the polar representation of complex numbers to matrices. Several important applications of matrix polar decomposition in various fields are considered. Also, some iterative methods for computing the matrix polar decomposition and their order of convergence are mentioned.

Keywords: matrix decomposition, polar decomposition, iterative method, order of convergence
Article history: Recieved 29 November 2022; Accepted 21 January 2023
Article type: review

1. esmaeili@basu.ac.ir

ISSN 1022-6443/© Iranian Mathematical Society under the CC BY-NC-SA 4.0 license