

Q-R FaktORIZACE

Matice $A = (\vec{a}_1, \vec{a}_2, \dots, \vec{a}_n)$ $\vec{a}_1, \dots$ vektorů rovné dimenze

nebo matice vektorů $\vec{x} = (\lambda_1, \dots, \lambda_n)^T$... skalárů

$$A\vec{x} = \lambda_1 \vec{a}_1 + \lambda_2 \vec{a}_2 + \dots + \lambda_n \vec{a}_n$$

tj; $R(A)$ (obor hodnot) = $\mathcal{L}(\vec{a}_1, \dots, \vec{a}_n)$ (lineární obal)

ON baza v $R(A)$ -- $\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_n$ lze konstruovat tak aby

$$\mathcal{L}(\vec{a}_1) = \mathcal{L}(\vec{q}_1)$$

$$\mathcal{L}(\vec{a}_1, \vec{a}_2) = \mathcal{L}(\vec{q}_1, \vec{q}_2)$$

$$\vdots$$

$$\mathcal{L}(\vec{a}_1, \dots, \vec{a}_n) = \mathcal{L}(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_n)$$

$$\vec{a}_1 = \mu_{11} \vec{q}_1$$

$$\vec{a}_2 = \mu_{12} \vec{q}_1 + \mu_{22} \vec{q}_2$$

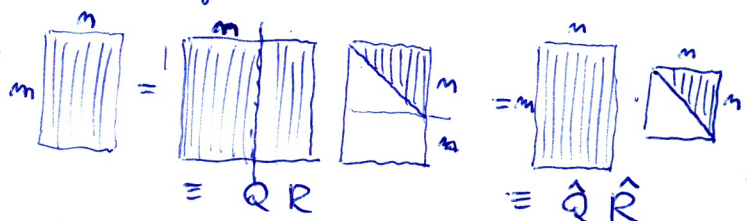
$$\vdots$$

$$\vec{a}_n = \mu_{1n} \vec{q}_1 + \dots + \mu_{nn} \vec{q}_n$$

neboli:

$$\begin{bmatrix} \vec{a}_1 & \vec{a}_2 & \dots & \vec{a}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{q}_1 & \vec{q}_2 & \dots & \vec{q}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu_{11} & \mu_{12} & \dots & \mu_{1n} \\ & \mu_{22} & \dots & \mu_{2n} \\ & & \ddots & \\ & & & \mu_{nn} \end{bmatrix}$$

tj; $A = QR$ kde Q je OB matice ($Q^+Q = QQ^+ = 1$)
a R je horní Δ -matice

pozn: plná faktORIZACE: $A =$ matice $m \times n$ (obecně komplex)
 reduk. faktORIZACE

Věta: 1, $\forall A \in \mathbb{C}^{m \times n}$ ($m \geq n$) má QR faktORIZACI (tedy i $\hat{Q}\hat{R}$)

2, Pokud hodnota $A = n$ [full rank] pak $\exists!$ $\hat{Q}\hat{R}$ s $\mu_{jj} > 0 \forall j$

↑
fixuje nejednozn. danou fazovým faktorem

DK: Gram-Schmidt Orthogonalization:

$$\vec{q}_1 = \frac{\vec{a}_1}{\|\vec{a}_1\|} \quad \vec{q}_2 = \frac{\vec{a}_2 - (\vec{q}_1 \cdot \vec{a}_2) \vec{q}_1}{\|\vec{a}_2 - (\vec{q}_1 \cdot \vec{a}_2) \vec{q}_1\|} \quad \dots \quad \vec{q}_n = \frac{\vec{a}_n - \sum (\vec{q}_i \cdot \vec{a}_n) \vec{q}_i}{\|\vec{a}_n - \sum (\vec{q}_i \cdot \vec{a}_n) \vec{q}_i\|}$$

tj; algoritmus (nestabilní):

$$j = 1, \dots, n: \vec{v}_j = \vec{a}_j$$

$$i = 1, \dots, j-1: \mu_{ij} = \vec{q}_i \cdot \vec{a}_j$$

~~$$\vec{v}_j = \vec{a}_j - \sum_{i=1}^{j-1} \mu_{ij} \vec{q}_i$$~~

$$\vec{v}_j = \vec{a}_j - \sum_{i=1}^{j-1} \mu_{ij} \vec{q}_i$$

$$\mu_{jj} = \|\vec{v}_j\|_2$$

$$\vec{q}_j = \vec{v}_j / \mu_{jj}$$

podob $\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_j$
lin. závislé

tj; hod. matice $A < n$

pak $\mu_{jj} = 0$

a za $\vec{q}_j$ můžeme vzít
libovol. vektor $\perp$ na
 $\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_{j-1}$

Pověit: řešení $Ax = b$:

① spočtu $QR = A$

② spočtu $y = Q^+b$

③ vyřešime $Rx = y$ -- zpětné dosazení

Modifikovaná G-S ortogonalizace

LiňA-2

opakování ... OG projektor $P : P^2 = P ; P^+ = P$

násobí ... provádí projekci vektoru $\vec{a}$ do $\mathcal{R}(P)$ tak že $(\vec{a} - P\vec{a}) \cdot \vec{u} = 0$

ale dk: $(\vec{a} - P\vec{a}) \cdot \vec{a} = \vec{a} \cdot (\vec{a} - P\vec{a}) = P\vec{a} \cdot (\vec{a} - P\vec{a}) = P\vec{a} \cdot \vec{a} - P^+ P\vec{a} \cdot \vec{a} = 0$

Z algoritmu G-S je ihned vidět, že projekce na obalí rovnice v množině kuli obsahuje všechny vektory $\rightarrow$ užší je malý.

$$\vec{q}_j = \frac{P_j \vec{a}_j}{\|P_j \vec{a}_j\|} \quad \text{ale } P_j \text{ je projektor } P_j = I - |q_1 \times q_2| - |q_2 \times q_3| - \dots - |q_{j-1} \times q_j|$$

($P_1 \equiv I$)

Přitom: $P_j = (I - |q_1 \times q_2|)(I - |q_2 \times q_3|) \dots (I - |q_{j-1} \times q_j|)$

pouze okolí pólu / okolí rovniny je jako objem / povrch + jeho 1/dimenze

Algoritmus: $i = 1, \dots, n : \vec{v}_i = \vec{a}_i$

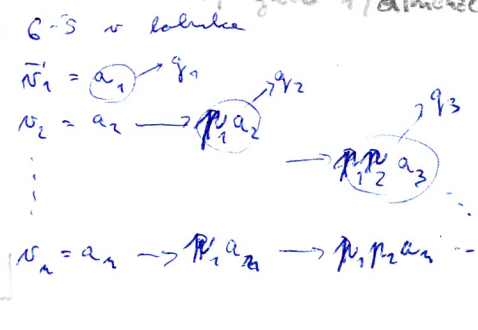
$i = 1, \dots, n : \mu_{ii} = \|\vec{v}_i\|$

násob. matic

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\mu_{11}} & -\frac{\mu_{12}}{\mu_{11}} & \dots & -\frac{\mu_{1n}}{\mu_{11}} \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix} (i=1) \quad \vec{q}_i = \vec{v}_i / \mu_{ii}$$

$$j = i+1, n : \mu_{ij} = \vec{q}_i \cdot \vec{v}_j$$

$$\vec{v}_j = \vec{v}_j - \mu_{ij} \vec{q}_i$$



Počet operací (FLOP) ... floating point operations $\sim 2mn^2$ flops

... miliónů násob 4m flops celkem $(n-1 + \dots + 1) \sim \frac{1}{2}n^2 \times 4m =$ flops

Haušholderova triangulace:

G-S ... trojúhelníková ortogonalizace

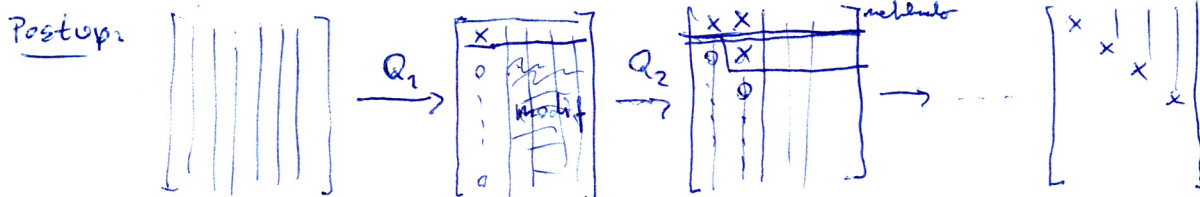
Haušholder ... ortogonální triangulace

$$R^{-1} \dots R = R_n^{-1} \dots R_1^{-1}$$

$$AR_1 \dots R_n = Q$$

$$Q_n \dots Q_2 Q_1 A = R$$

Q^+

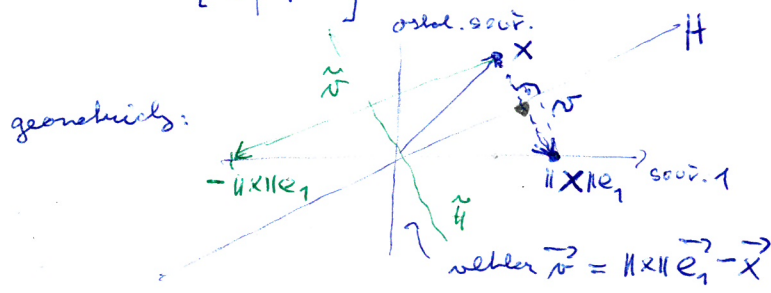


Haušholderovo zrcadlení F

$$Q_k = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & F \end{bmatrix}^{k-1}$$

ale $Fx = \begin{pmatrix} \|x\| \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$

x = sloupce k symulaci
přitom F je OG ... $F^+ = F^{-1}$
tj. symulaci musí zachovávat



zobraz. zachov. normu:
rotace (posledji ... Givens)
zrcadlení

$H =$ zrcadlo = hyperplane

projekce do H : $P_H = I - \frac{\vec{v} \cdot \vec{v}}{\|\vec{v}\|^2} \vec{v}$

zrcadlení ... je to jeden tolik: $F = 1 - 2 \frac{|\vec{v} \times \vec{v}|}{\|\vec{v}\|^2} \leftarrow$ změna se při $\vec{v} \rightarrow -\vec{v}$

nejednotvárnost: násobí velikost $\vec{v} = \pm \|\vec{x}\| \vec{e}_1 - \vec{x}$ maximálně tak aby nebylo $\|\vec{v}\| < \|\vec{x}\|$ (odtáhání sloupce)

závěr: $\vec{v} = \text{sign}(x_1) \|\vec{x}\| \vec{e}_1 - \vec{x}$ x1 = 1. souřadnice $\vec{x}$

Haušholderův algoritmus Q-R faktorizace:

LinA-3

for $k=1 \dots m$: $x = A_{k:m, k}$

$$\vec{v}_k = \text{sign}(x_1) \|x\| \vec{e}_1 + x$$

$$\vec{v}_k = \vec{v}_k / \|\vec{v}_k\|$$

$$A_{k:m, k:m} = A_{k:m, k:m} - 2 \frac{\vec{v}_k \vec{v}_k^T}{\|\vec{v}_k\|^2} A_{k:m, k:m}$$

+ vytvoření matice Q : $Q^+ = Q_m \dots Q_2 Q_1$ tj. $Q = Q_1 Q_2 \dots Q_m$

výpočet $Q^* b$: $k=1 \dots m$: $b_{k:m} = b_{k:m} - 2 \frac{\vec{v}_k \vec{v}_k^T}{\|\vec{v}_k\|^2} b_{k:m}$

výpočet Qx : $k=m \dots 1$: $x_{k:m} = x_{k:m} - 2 \frac{\vec{v}_k \vec{v}_k^T}{\|\vec{v}_k\|^2} x_{k:m}$

... jen $m \times m$ operací místo m^2

konstrukce Q ... postupná aplikace na $\vec{e}_1, \vec{e}_2 \dots \vec{e}_m$

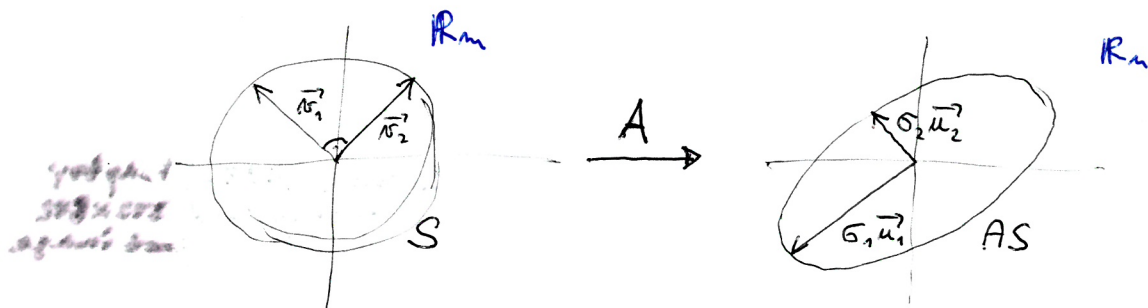
Počet operací na Haušholdera ... $2m^2 - \frac{2}{3}m^3$

pozn.: podobný algoritmus jako Haušholder lze udělat pomocí Givens rotací ale hodně větší počet oper.

Singulární rozklad matice (Singular Value Decomposition) SVD

geometrický náhled:

Tvrzení: Obraz 1-sféry lin. zobrazením maticí $m \times n$ je hyperelipsa



geom def: necht $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ $m \geq n$

def hlavní poloosy: $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n$

+ přísl. 1-vectory: $\vec{u}_1, \vec{u}_2, \dots, \vec{u}_n$... $A \vec{v}_j = \sigma_j \vec{u}_j$

+ jejich vzory $\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_n$ - left sing. vect.
 - right singular vectors

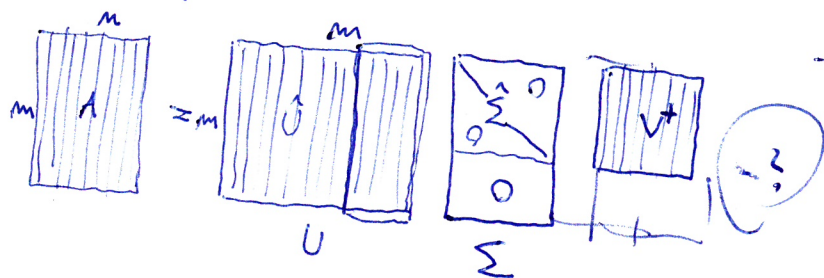
$\vec{u}, \vec{v}$... ON množiny vektorů

$$\text{SVD (matrik)}: A \begin{pmatrix} | & | & \dots & | \\ v_1 & v_2 & \dots & v_n \\ | & | & \dots & | \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} | & | & \dots & | \\ \sigma_1 & \sigma_2 & \dots & \sigma_n \\ | & | & \dots & | \end{pmatrix} \begin{pmatrix} | & | & \dots & | \\ u_1 & u_2 & \dots & u_n \\ | & | & \dots & | \end{pmatrix}$$

$$\rightarrow A = \hat{U} \hat{\Sigma} \hat{V}^T \quad m \times n \quad A = \begin{bmatrix} \hat{U} \\ \hat{\Sigma} \\ \hat{V}^T \end{bmatrix}$$

Asymetrie: def. full SVD:

lin A-4



$U^T = U^{-1}$
 $V^T = V^{-1}$ unitární
 Σ diagonální

VĚTA: $\forall$ matice A má SVD. Navíc body $\{\sigma_i\}$ jsou dány jedinečně a pokud jsou σ_i navzájem různé pak i $\{u_i\}$ a $\{v_i\}$ jsou dány jedinečně až na násobení komplex. fází.

Náznak DK: $\sigma_1 = \|A\|$ + $\exists u_1, v_1 : Av_1 = \sigma_1 u_1$ + libovol. normy na unit. lora
 $\rightarrow U_1^T A V_1 = \begin{pmatrix} \sigma_1 & w \\ 0 & B \end{pmatrix}$ + DK je $\|w\| = 0$ + indukce

Použití SVD: $\left\| \begin{pmatrix} \sigma_1 u^T \\ 0 & B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_1 v \\ w \end{pmatrix} \right\|_2^2 \geq \sigma_1^2$ $\rightarrow$ $\sigma_1 = \|A\|$ $\rightarrow$ $\sigma_1 = \|A\|$ $\rightarrow$ $\sigma_1 = \|A\|$

- $\forall$ matice je diagonální pokud máme správn. bázi v. s. vektorů a def. s. vektorů.
- s. v. vektory ... pořadí ... iterativní matice e^{+A}

$$\begin{pmatrix} 0 & A^T \\ A & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k \\ \pm v_k \end{pmatrix} = \pm \sigma_k \begin{pmatrix} u_k \\ \pm v_k \end{pmatrix}$$

$\rightarrow$ dvojice $\lambda = \pm \sigma_k$ v. l. c.
 $+ \text{pro } u_k \text{ pro } k > h(A)$
 $\text{je } \begin{pmatrix} 0 \\ u_k \end{pmatrix} \text{ v. s. pro } \lambda = 0$

- $\text{rank}(A) = \text{počet } n$
- $\ker(A) = \mathcal{L}(v_{h+1}, v_{h+2}, \dots)$
- $\mathcal{R}(A) = \mathcal{L}(u_1, \dots, u_h)$
- $\|A\|_2 = \sigma_1$; $\|A\|_F = \sqrt{\sigma_1^2 + \dots + \sigma_m^2}$
- def $A = \sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_m$
- Approx matice: $A = \sum_{i=1}^k \sigma_i u_i v_i^T$

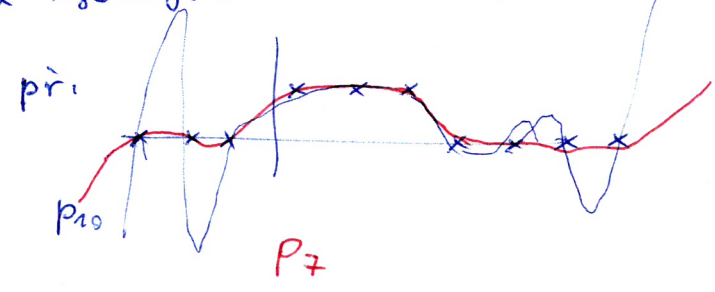
Algoritmus SVD -- pořadí (přibližně s diagonalizací)

Nejmenší čtverce (least squares problems) - lineární převrácená úloha

převrácený problém $Ax = b$ (více ř. než sl.)
 řešení -- minimalizace $\|Ax - b\|_2$
 geometricky -- $\exists$ je vektor tak aby $\vec{y} = A\vec{x}$ byl nejbližší bod z $\mathcal{R}(A)$ ke $\vec{b}$

PŘ: polynomiální fitování

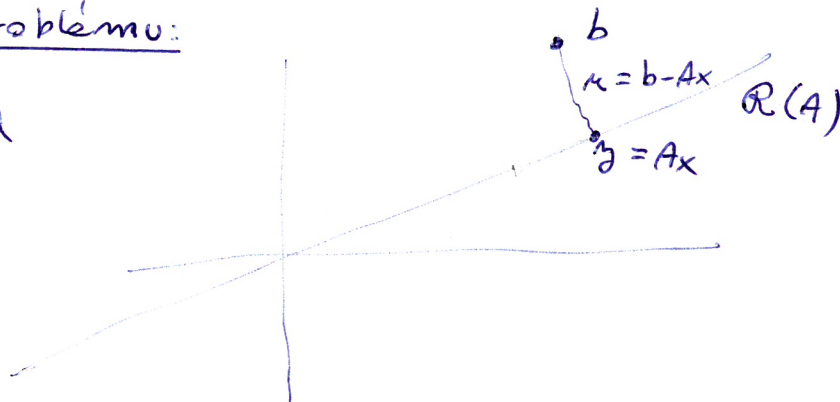
$$\begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^{m-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_m & x_m^2 & \dots & x_m^{m-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ \vdots \\ c_{m-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}$$



Řešení problému:

Un-A-5

geom. náhled



Věta: $x \in \mathbb{C}^n$ minimalizuje $\|r\|_2 \equiv \|b - Ax\|_2$ pro $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$ $m \geq n$
 $b \in \mathbb{C}^m$

$$\Leftrightarrow A^+ r = 0 \quad (1) \Leftrightarrow A^+ A x = A^+ b \quad (2) \Leftrightarrow P b = A x \quad (3)$$

kde $P \in \mathbb{C}^{m \times m}$ je og. projektor na $\mathcal{R}(A)$.

Názna DK: $\rightarrow r \perp \mathcal{R}(A)$

(3) je zřejmé a náhledu (přesněji Pythagoras)

(1) je vidět z SVD ... je to podle $r \perp \mathcal{R}(A)$ $A^+ = V \Sigma U^+$

(2) rovnice z (1) dosaz. def $r = b - Ax$

Normální rovnice & pseudoinverze:

x je jednoznačné $\Leftrightarrow A$ má plnou hodnost

$\dots$ tj. $\forall \epsilon \neq 0$

pak: $A^+ A x = A^+ b$ (Normální rovnice)

$$\rightarrow x = (A^+ A)^{-1} A^+ b$$

Pseudoinverze: $A^{\dagger} \equiv (A^+ A)^{-1} A^+$

Numerické řešení nejmenších čtverců:

Met. 1: přímé řešení Normál rce:

↖ kazí podmíněnost!

- 1) sestavit $(A^+ A) \equiv M$ a vektor $c = A^+ b$
- 2) vyřešit $Mx = c$ (Choleského faktORIZACE)

$\left. \begin{array}{l} 1) \\ 2) \end{array} \right\} mn^2 + \frac{1}{3}n^3 \text{ FLOPS}$

Met 2: reduk. R-R faktORIZACE: $A = \hat{Q} \hat{R} \rightarrow P \equiv \hat{Q} \hat{Q}^+$

$(\sim \frac{4}{3}n^3)$

+ řešení $Ax = Pb$ tj; $\hat{Q} \hat{R} x = \hat{Q} \hat{Q}^+ b$ tj; $Rx = Q^+ b$

$\Rightarrow$ 1) najít $A = \hat{Q} \hat{R}$

2) spočítat $c \equiv \hat{Q}^+ b$

3, vyřešit $\hat{R}x = c$ přel. dekompozicí

$\left. \begin{array}{l} 1) \\ 2) \\ 3) \end{array} \right\} 2mn^2 - \frac{2}{3}n^3 \text{ Flops}$
 $(\sim \frac{4}{3}n^3)$

řešení pomocí SVD:

$$A = \hat{U} \hat{\Sigma} V^+ \rightarrow P = \hat{U} \hat{U}^+$$

$$\rightarrow \text{řešit } Ax = Pb \text{ t.j. } \hat{U} \hat{\Sigma} V^+ x = \hat{U} \hat{U}^+ b$$

t.j. Metoda 3:

$$\left. \begin{array}{l} 1) \text{ najít } A = \hat{U} \hat{\Sigma} V^+ \\ 2) \text{ spočítat } c = \hat{U}^+ b \\ 3) \text{ vyřešit } \hat{\Sigma} w = c \\ 4) \text{ najít } x = V w \end{array} \right\} \begin{array}{l} 2mn^2 + 11n^3 \text{ FLOPS} \\ (\sim 13n^3) \end{array}$$

cca 10x pomalejší

Pozn: stejně se ~~má~~ řeší defektní úloha se singul. maticí -- zdvihem $\sigma^{-1} \rightarrow 0$ -- nejkratší část přechází do $\text{Ker}(A)$

Volba metody: balance mezi rychlostí a stabilitou

Ještě o stabilitě:

číslo podmíněnosti $\kappa = \sup_{\|\delta x\| \neq 0} \frac{\|\delta f\| / \|f\|}{\|\delta x\| / \|x\|}$

číslo podmín. matice $\kappa(A) \equiv \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$

podm. nás matice $b = Ax$
očí měnám δx

$$\frac{\|\delta b\|}{\|b\|} / \frac{\|\delta x\|}{\|x\|} = \frac{\|A \delta x\|}{\|b\|} / \frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$$

stabilita algoritmu -- chování vůči zaokl. chybám

$$\rightarrow \text{strašné } \varepsilon \dots \|\tilde{x} - x\| \leq \kappa \varepsilon$$

Stabilita: ~~algoritmicky~~ spektrálně

problém: vyřešit $f(x)$ s nepřes. $\tilde{x}$

algoritmicky spektrálně $\tilde{f}(x)$

$$\exists \tilde{x}: \frac{\|\tilde{x} - x\|}{\|x\|} = O(\varepsilon) \text{ zároveň } \frac{\|\tilde{f}(x) - f(\tilde{x})\|}{\|f(\tilde{x})\|} = O(\varepsilon)$$

Stabilní algoritmus dá skoro vždy odpov. na skoro přes. otázku

Zpětná stabilita: $\tilde{f}(x) = f(\tilde{x})$ má nějaké $\frac{\|\tilde{x} - x\|}{\|x\|} = O(\varepsilon)$

zpětně stabil. algor. dá přes. odpověď na přibližnou otázku.

! přesnost zpětně stabil. algoritmu je dána podmín. úlohy!

Příklady: • QR faktorizace Householderem je

• řešení $Ax = b$ QR je

pozor konst. může být závislá na vel. probl.

př. zpět. dosazení: $\frac{|\delta a_{ij}|}{|a_{ij}|} \leq m \varepsilon + O(\varepsilon^2)$
dá se dk:

• Nejméně čtverce: QR je spěl. stabilní
(Householder i G-S)
nejde jako SVD

OK, ale po Gauss elin
! 2m ! -- později

opakování: Norma matice a vektoru:

Motivace: měří vel. chyby /
(nebo konvergence) $\frac{L_1 - A - G + s}{(dodatek)}$

vektor: def $\|\cdot\|: \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{R}$: (1) $\|x\| \geq 0$; $\|x\| = 0 \Leftrightarrow x = 0$

$$(2) \|x+y\| \leq \|x\| + \|y\|$$

(*)

$$(3) \|\lambda x\| = |\lambda| \|x\|$$

Běžné příklady: p-normy $\|x\|_p = (\sum |x_i|^p)^{1/p}$ $p \in (1, \infty)$

1-Dobli: $\|x\|_1 = \sum |x_i|$



$$\|x\|_\infty = \max |x_i|$$



$$\|x\|_2 = \sqrt{\sum |x_i|^2}$$



$$\|x\|_p$$



Indukovaná norma matice: $\|A\|_{(m,n)} = \sup_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_m}{\|x\|_n} = \sup_{\|x\|=1} \|Ax\|_m$

příklady:

p-normy $\rightarrow \|A\|_1 = \max_j \|\vec{a}_j\|_1 = \max \{ \sum_i |a_{ij}| \}$... max sloup. suma
 $\|A\|_\infty = \max_i \|\vec{a}_i\|_\infty = \max \{ \sum_j |a_{ij}| \}$... max řad. suma
 $\|A\|_2 = \sigma_1$... největší singulár. hodnota (největší v.č. pro normál. matice)

D3L. nerovnosti: Hölder $|(x,y)| \leq \|x\|_p \|y\|_q$ pro $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$

spec Schwarz $|(x,y)| \leq \|x\|_2 \|y\|_2$

nás. vektoru: $\|Ax\|_{(m,n)} \leq \|A\|_{(m,n)} \cdot \|x\|_{(n,n)}$... pro induk. normu (zdef)

$\Rightarrow$

$$\|AB\|_{(m,n)} \leq \|A\|_{(m,k)} \|B\|_{(k,n)}$$
 ... rovnost obec. neplatí
 ... ani pro $A=B$

obee matic norma ... splňuje (*) ... nemusí být induk

často použ. příklad: Frobenius norm (Hilbert-Schmidt)

$$\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i,j} |a_{ij}|^2}$$
 ... rovněž splňuje $\|AB\|_F \leq \|A\|_F \cdot \|B\|_F$

normy $\|A\|_2$ a $\|A\|_F$ jsou invar. vůči unit transformaci

$$\Rightarrow \|A\|_F = \sqrt{\sum \sigma_i^2}$$
 ... vyjádření přes SVD

Ještě o stabilitě a podmíněnosti

stabilita může být ořídná po špatné podmíněné úlohy. Proto ještě některá upřesnění.

opakování: čísla podmíněnosti úlohy $f: x \rightarrow y$: $\kappa = \lim_{\delta \rightarrow 0} \sup_{\| \delta x \| = \delta} \frac{\| \delta f \|}{\| \delta x \|}$

relativní č. podmíněnosti: $\kappa = \lim_{\delta \rightarrow 0} \sup_{\| \delta x \| \leq \delta} \left(\frac{\| \delta f \|}{\| f \|} / \frac{\| \delta x \|}{\| x \|} \right)$

Násobení vektorem maticí: $Ax = \vec{b}$... vstup $x \rightarrow$ výstup b

$$\kappa = \sup \frac{\|A \delta x\|}{\|A x\|} / \frac{\|\delta x\|}{\|x\|} = \sup \frac{\|A \delta x\|}{\|\delta x\|} \cdot \frac{\|x\|}{\|Ax\|} \leq \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$$

... dá se $\|A\|$ a $\|A^{-1}\|$ plác normou.
 (čten. nesing.)

občime ... řeš. soust. vic ... vstup b ... plác $b = A^{-1}x$

$$\rightarrow \kappa = \|A^{-1}\| \cdot \|(A^{-1})^{-1}\| = \|A^{-1}\| \|A\| \stackrel{\text{def}}{=} \kappa(A) = \sigma_1 \cdot \sigma_n$$

co když řešíme $Ax = b$ a A chápeme jako vektor Lin - A - 6 + 22
(podmíněně vzhledem k porovnání A)

t; $(A + \delta A)(x + \delta x) = b$ t; o 1. ř. $\delta A \cdot x = A \delta x$

t; $\delta x = -A^{-1} \delta A \cdot x \Rightarrow \|\delta x\| \leq \|A^{-1}\| \|\delta A\| \|x\|$

t; $\kappa = \sup \frac{\|\delta x\|}{\|x\|} / \frac{\|\delta A\|}{\|A\|} \leq \frac{\|A^{-1}\| \cdot \|\delta A\| \cdot \|x\|}{\|x\|} \cdot \frac{\|A\|}{\|\delta A\|} = \kappa(A)$

opět se dá ukázat
že $\exists$ δA pro
něž není rovnost.

stabilita

Lin algebra ... diskrétní problém ... může být trochu
přesnější na přesnost ... není diskret. chyba, ale pozor na špet. podm.

Problém $f: X \rightarrow Y = f(x)$

Algoritmus: $\tilde{f}: X \rightarrow Y = \tilde{f}(x) \dots$ včetně rozhodnutí vol. data

Stabilita: $\frac{\|\tilde{f}(x) - f(\tilde{x})\|}{\|f(\tilde{x})\|} = O(\varepsilon)$ pro nějaké $\tilde{x}$: $\frac{\|x - \tilde{x}\|}{\|x\|} = O(\varepsilon)$

skoro-přesná odpověď na skoro správných otázkách

.. musíme také kvůli podmíněnosti

Srovnaj.. přesnost výpočtu: $\frac{\|\tilde{f}(x) - f(x)\|}{\|f(x)\|} = O(\varepsilon)$.. může se položit
podmíněnost úlohy

! lineární algebra se skládá z několika požadavků zpět stability

zpětná stabilita: $\exists \tilde{x} \frac{\|x - \tilde{x}\|}{\|x\|} = O(\varepsilon)$ tak, že $\tilde{f}(x) = f(\tilde{x})$

přesná odpověď na skoro správných otázkách.

Věta: ~~z~~ relativní chyba pro zpětně stabilní algoritmus aplik.

na úlohu s podm. κ je: $\frac{\|\tilde{f}(x) - f(x)\|}{\|f(x)\|} = O(\kappa(x) \cdot \varepsilon)$

PK: přímo užití def + def κ

příklady: sledování součin $\sum x_i y_i$.. zpět stabilní

densov součin $A_{ij} = x_i y_j$ není zpět. stabil ... díky nebudou
separabil. matice ve formě $(x + \delta x) X y + \delta y$

pozn.: zpět stabilita silnější; šitá na míru zpětné analýze dle.

(+ zpět stabilní $\Rightarrow$ stabilní)

pozor: zpět stabilní $\nRightarrow$ přesná -- může pokazit podmíněnost
při QR rozklad

Ke stabilitě (z Trefethena)

Fundamentální axiom fl. point. arithmet.

$$\forall x, y \in \mathbb{F} \quad \exists \epsilon : |\epsilon| \leq \epsilon_{\text{machine}} : x \circledast y = (x * y) (1 + \epsilon)$$

$\uparrow$
reprezent. čísla

$$\forall \text{ operace } \circledast = (+, -, \times, \div)$$

PR: výpočet $x_1 - x_2$ -- $f(x_1, x_2) = x_1 - x_2$ -- zpět. stabilita

algorithm

$$\tilde{f}(x_1, x_2) = \underset{\substack{\parallel \\ x_1(1+\epsilon_1)}}{fl(x_1)} \ominus \underset{\substack{\parallel \\ x_2(1+\epsilon_2)}}{fl(x_2)} = (fl(x_1) - fl(x_2))(1 + \epsilon_3)$$

$$\approx x_1(1 + \epsilon_4) - x_2(1 + \epsilon_5) \quad \text{pro nějaké } \epsilon_4, \epsilon_5$$

$\rightarrow$ je zpětně stabilní. ale ne stabilní
(protože $\|f(\tilde{x})\|$ může divergovat)

PR: skal. souč. -- zpět. stabilní

věj. souč. -- není zpětně ale je stabilní

PR: $f(x) = x + 1 \rightarrow \tilde{f}(x) = fl(x) \oplus 1$ není zpětně stabilní

Věta: $A = QR$ pro $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$ Householder $\rightarrow \tilde{Q}, \tilde{R}$

pok $\tilde{Q} \tilde{R} = A + \delta A$; $\frac{\|\delta A\|}{\|A\|} = O(\epsilon_{\text{machine}})$ pro nějaké $\delta A \in \mathbb{C}^{m \times n}$

$\Rightarrow$ řeš. soust. rovnice

$$QR = A$$

$$Qx = b$$

$$y = Q^* b$$

$$x = R^{-1} y$$

$\Rightarrow$ je zpětně stabilní : $(A + \delta A) \tilde{x} = b$ pro nějaké $\frac{\|\delta A\|}{\|A\|} = O(\epsilon_{\text{mach}})$

Věta: $\frac{\|\tilde{x} - x\|}{\|x\|} = O(\kappa(A) \epsilon_{\text{mach}})$

$$\Gamma_a(\epsilon) \equiv 2\pi \sum_k \delta(\epsilon - \epsilon_{k\alpha}) |V_{dk\alpha}|^2. \quad (5)$$

The width function $\Gamma_a(\epsilon)$ is the imaginary part of the self-energy function

$$\Sigma_a(\epsilon) = \sum_k \frac{|V_{dk\alpha}|^2}{\epsilon^+ - \epsilon_{k\alpha}} \equiv \Delta_a(\epsilon) - \frac{i}{2} \Gamma_a(\epsilon), \quad (6)$$

where $\epsilon^+ = \epsilon + i\gamma$, γ being a positive infinitesimal. The real part of the self-energy function, the level-shift function $\Delta_a(\epsilon)$, is related to the width function via Hilbert transformation,

i.e.

$$\Delta_a(\epsilon) = \frac{1}{2\pi} P \int \frac{\Gamma_a(\epsilon')}{\epsilon - \epsilon'} d\epsilon', \quad (7)$$

where P denotes the principal value of the integral.

For the nearest-neighbor tight-binding model of the leads introduced above, the self-

energy function $\Sigma(z)$ is given by the Hubbard Green's function [61,62], multiplied by the

coupling strength v between the last atomic site in the leads and the bridge,

$$\Sigma_a(z) = \frac{2v^2}{z - \mu_a + \sqrt{(z - \mu_a)^2 - 4\beta^2}}. \quad (8)$$

Here, the width of the conduction band is given by 4β . Analytic continuation in the complex

energy (z) plane gives the real part

and β

$$\Delta_a(\epsilon) = \begin{cases} \frac{v^2}{2\beta^2} (\epsilon - \mu_a) & \text{for } |\epsilon - \mu_a| < 2\beta \\ \frac{v^2}{2\beta^2} \left[(\epsilon - \mu_a) \pm \sqrt{(\epsilon - \mu_a)^2 - 4\beta^2} \right] & \text{for } |\epsilon - \mu_a| > 2\beta \end{cases} \quad (9)$$

and the imaginary part

$$\Gamma_a(\epsilon) = \begin{cases} 0 & \text{for } |\epsilon - \mu_a| < 2\beta \\ \frac{v^2}{\beta^2} \sqrt{4\beta^2 - (\epsilon - \mu_a)^2} & \text{for } |\epsilon - \mu_a| > 2\beta \end{cases} \quad (10)$$

As will be demonstrated in Sec. III, the inclusion of the energy dependence of the width

function $\Gamma_a(\epsilon)$ and thus of the coupling matrix elements $V_{dk\alpha}$, which complicates the theo-

retical treatment significantly, is crucial in order to account correctly for inelastic effects, in

particular for energies close to the edge of the conduction band.

$$\begin{aligned} (\sqrt{x} + \sqrt{y})^2 &= 1 \iff \sqrt{x} + \sqrt{y} = \pm 1 \\ x + 2\sqrt{xy} + y &= 1 \\ 2\sqrt{xy} &= 1 - x - y \\ 4xy &= 1 + x^2 + y^2 - 2x - 2y + 2xy \\ x &= (\pm 1 - \sqrt{y})^2 = (\sqrt{y} \pm 1)^2 = \\ y &= (\sqrt{x} \pm 1)^2 = 1 + x \pm 2\sqrt{x} \end{aligned}$$

opakování:

číslo podmíněnosti matice $\kappa = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$

- podmíněnost úloh... násobení maticí, řešení soustavy...

Ještě o stabilitě:

- nestabilní algoritmus -- PR:
 - největ vl. č. matice 2×2
 - největ koef. char. pol $p(\lambda)$
 - největ kořeny
 - chyba až $O(\sqrt{\epsilon})$

Věta 1: QR je faktorizace $A = QR$; $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$
 spočítaná Householderem, počítačem splň. základní ary.
 fl. point. aritmetiky; potom vypočtené $\tilde{Q}, \tilde{R}$ splňují:
 $\tilde{Q} \tilde{R} = A + \delta A$; kde $\frac{\|\delta A\|}{\|A\|} = O(\epsilon_m)$ pro nějaké $\delta A \in \mathbb{C}^{m \times n}$

Věta 2: Řešení $Ax = b$ QR faktorizací:

- 1) Householder $QR = A$
- 2) $y = Q^* b$
- 3) $x = R^{-1} y$ (zpět. dosazení)

je zpět. stabilní. Podrobněji:

$$(A + \Delta A) \tilde{x} = b \quad \text{pro nějaké } \Delta A \in \mathbb{C}^{m \times m} : \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} = O(\epsilon_m)$$

Věta 3: Řešení $\tilde{x}$ splňuje: $\frac{\|\tilde{x} - x\|}{\|x\|} = O(\kappa(A) \epsilon_m)$

Věta 4: Zpět. subst: $x_m = b_m / r_{mm}$

$$j = m-1, \dots, 1 : x_j = (b_j - \sum_{k=j+1}^m x_k r_{jk}) / r_{jj}$$

$$\text{FLOPS} \sim O(m^2)$$

je zpět. stabil. : $(R + \delta R) \tilde{x} = b \sim \frac{\|\delta R\|}{\|R\|} = O(\epsilon_m)$

$$\text{Dokonce} \quad \frac{|\delta r_{ij}|}{|r_{ij}|} \leq m \epsilon_m + O(\epsilon_m^2)$$

Věta 5: Podmíněnost nejv. $\square$: $Ax = b$; $b \in \mathbb{C}^m$, $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$ full rank

Podmíněnost oc $\|\cdot\|_2$

	out in	η	R
nastáváví	b	$1/\cos \theta$	$\kappa(A)/\eta \cos \theta$
normalizace	A	$\frac{\kappa(A)}{\cos \theta}$	$\kappa(A) + \frac{\kappa(A)^2 \tan \theta}{\eta}$

$$y = Ax = Pb$$

největší $\tilde{b}$

$$x = A^{-1} b$$

$$\theta \in (0, \frac{\pi}{2})$$

$$\cos \theta = \frac{\|y\|}{\|b\|} \quad \eta = \frac{\|A\| \cdot \|x\|}{\|Ax\| \epsilon} = \frac{1}{\epsilon} \in \langle 1, \kappa(A) \rangle$$

Gaussova eliminace a LU ~~dekompozice~~ rozklad

$$Ax = b$$

řešení → úprava da hor. dvoj. formu řádkový úpravy

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots \\ a_{21} & a_{22} & \dots & \\ a_{31} & a_{32} & \dots & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \xrightarrow{L_1} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots \\ 0 & \tilde{a}_{22} & \tilde{a}_{23} & \dots \\ 0 & \tilde{a}_{32} & \dots & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

tedy $L_1 = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ -l_{21} & 1 & & \\ -l_{31} & & 1 & \\ \vdots & & \vdots & \ddots \\ -l_{m1} & & & 1 \end{pmatrix}$ tedy $l_i^{(1)} = \frac{a_{i1}}{a_{11}}$ + obec. dále

+ úprava: $\tilde{L}_i^1 = \text{stejně } l_i \rightarrow l_i - l_i$
• násobení jen dle L a řešení

násobec: $L_{m-1} \dots L_2 L_1 A = U$

→ výsledek $A = L_1^{-1} \dots L_{m-1}^{-1} U = \begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ l_{21}^1 & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ l_{m1}^1 & l_{m2}^1 & \dots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \dots & u_{1m} \\ & u_{22} & \dots & \\ & & \ddots & \\ & & & u_{mm} \end{pmatrix}$

Algoritmus Gauss-Elim bez pivot. (NEPOUŽÍVAT!)
(pozitivní jen diag. dominantní nebo sym. pozit. def.)
 $\hookrightarrow |a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}| \forall i$ (řádkově diag. dom.)

$$U = A$$

$$L = I$$

$$k = 1, m-1$$

$$j = k+1, m$$

$$l_{jk} = u_{jk} / u_{kk}$$

$$u_{j,k:m} = u_{j,k:m} - l_{jk} u_{k,k:m}$$

$$\sim \frac{2}{3} m^3 \text{ FLOPS}$$

! Nestabilita bez pivotace:

$$A = \begin{pmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = LU \quad L = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 10^{20} & 1 \end{pmatrix} \quad U = \begin{pmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 0 & 1 - 10^{20} \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 0 & -10^{20} \end{pmatrix} = \tilde{U}$$

problém .. stabilitu LU

ne opět. stabilita: $L \cdot \tilde{U} = \begin{pmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

→ větší divergence .. ani dopředu stabilita

náhled... $A = L \cdot U$... inverze... $X = U^{-1} L^{-1} b$

ale úslo podm. $\kappa(L) \cdot \kappa(U) \gg \kappa(A) \doteq \frac{15+1}{15-1} \doteq 2.6$
málem $\parallel$
1 $\hookrightarrow \doteq 10^{40}$

Pivotace:

1, polívaní řádků; pak teprve L

... $P_i \dots$ permutační matice

$$\rightarrow L_{n-1} P_{n-1} \dots L_2 P_2 L_1 P_1 A = U$$

do pozn.
rozepsat detaily

$$L_{n-1} P_{n-1} \dots L_2 P_2 L_1 P_1 A = U$$

ne reorganizovat leh, že $PA = LU$ kde $P = P_{n-1} \dots P_2 P_1$

Gauss eliminace s řádk. pivotací:

přesněji: $L_3 P_3 L_2 P_2 L_1 P_1 = L_3' L_2' L_1' P_3 P_2 P_1$
kde $L_3' = L_3$ $L_2' = P_3 L_2 P_3^{-1}$, $L_1' = P_3 P_2 L_1 P_2^{-1} P_3^{-1}$

$$U = A, L = I, P = I$$

$$k = 1, m-1$$

najít $i \geq k$.. maximalizace $|u_{ik}|$

$$u_{k,k:m} \leftrightarrow u_{i,k:m}$$

$$l_{k,1:k-1} \leftrightarrow l_{i,1:k-1}$$

$$p_{k1} \leftrightarrow p_{i1}$$

$$j = k+1, m$$

$$l_{jk} = u_{jk} / u_{kk}$$

$$u_{j,k:m} = u_{j,k:m} - l_{jk} u_{k,k:m}$$

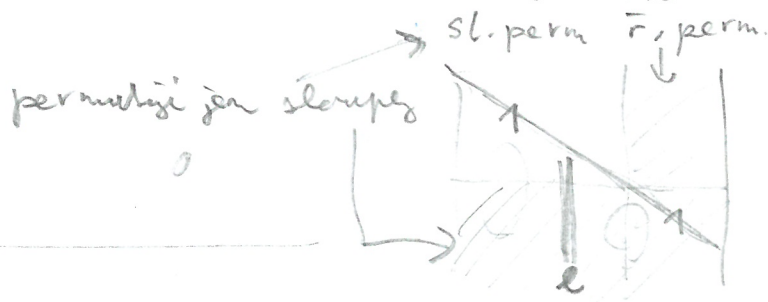
$$\sim \frac{2}{3} m^3 \text{ FLOPs}$$

(přesněji
nepřispívá dos
vnitř. cyklus
je m^2 kroků)

Úplná pivotace ... možná, ale nepřispívá k m^3 mědru

$$PAQ = LU$$

Pozn: L' jsou dolní Δ číslování, že $L' = P_1 P_2 L P_3 P_4$



Postup aprox:

$$L$$

$$U$$

$$I$$

$$A$$

6-E jen dělal se starých psan

Dodatek: L-U s temp rozklad a pivotací

$$(\cancel{L_n P_n}) (\cancel{L_{n-1} P_{n-1}}) \dots (\cancel{L_1 P_1}) A = U$$

$$+ \text{plati } (\cancel{L_n P_n}) \dots (\cancel{L_2 P_2}) (\cancel{L_1 P_1}) = \cancel{L_n} \dots \cancel{L_1} \cancel{P_{n-1}} \dots \cancel{P_1}$$

$$\text{ale } \cancel{L'_n} = \cancel{L_n}, \quad \cancel{L'_{n-1}} = P_{n-1} \cancel{L_{n-1}} P_{n-1}^{-1} \dots \quad \cancel{L'_1} = \cancel{P_n} P_{n-1} \dots P_2 L_1 P_2^{-1} \dots \cancel{P_n^{-1}}$$

$$\text{tj. } PA = LU, \quad \text{ale } P = P_{n-1} \dots P_1$$

$$L = (\cancel{L'_{n-1}} \dots \cancel{L'_1})^{-1}$$

$$\cancel{L'_k} = P_{n-1} \dots P_{k+1} L_k P_{k+1}^{-1} \dots P_{n-1}^{-1}$$

G-eliminace a pivotací:

$$U = A, \quad L = I, \quad P = I$$

for $k = 1, m-1$

najít $i \geq k$: maximalizovat $|u_{ik}|$

prohodit: $u_{k,k:m} \leftrightarrow u_{i,k:m}$

$l_{k,1:k-1} \leftrightarrow l_{i,1:k-1}$

$p_{k,:} \leftrightarrow p_{i,:}$

for $j = k+1, m$

$$l_{jk} = u_{jk} / u_{kk}$$

$$u_{j,k:m} = u_{j,k:m} - l_{jk} u_{k,k:m}$$

} přispívá v řádu $O(m^2)$

→ ~~$\frac{2}{3}m^3$~~ FLOPs
— vedoucí řád

Úplná pivotace: $PAQ = LU$

$$\text{tj. } (\cancel{L_{n-1} P_{n-1}}) \dots (\cancel{L_1 P_1}) A Q_1 \dots Q_{n-1} = U$$

... bez modifikace
algor. jen probr.
sl. a parabolat Q

VSUVKA O ZPĚT. STABILITĚ

+ stabilita G-Elin.

SVD: $A = \underbrace{U}_{\hat{U}} \underbrace{\Sigma}_{\hat{\Sigma}} \underbrace{V^T}_{V^+} = \underbrace{U}_{\hat{U}} \underbrace{\begin{bmatrix} \hat{\Sigma} \\ 0 \end{bmatrix}}_{\hat{\Sigma}} \underbrace{V^T}_{V^+}$

$$A \times = P b = U U^T b$$

$$t; \quad U \Sigma V^T = U U^T b \rightarrow \Sigma V^T = U^T b \rightarrow \hat{\Sigma} V^T = \hat{U}^T b \rightarrow x = V \hat{\Sigma}^{-1} \hat{U}^T b$$

Obecně čtvercová matice:

$$A = \begin{array}{|c|} \hline U \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \Sigma \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline V \\ \hline \end{array} = \sum_i \sigma_i |u_i \rangle \langle v_i|$$

pokud $|A| = 0 \dots 1$, nemá řešení, ale může být blízko v nejmenším. $\square$

2) má najdvostr. š. ... vyhodíme nejednosť
→ máme se najít najhor. bodu x

jak psát? ... $\sigma_i = 0$... malý σ_i malý ... práh

podobně jako najm. D: nulovité $A^{-1} \rightarrow V \Sigma^{-1} U^+$

pročítáme v $G_i^{-1} = 1/G_i$ pokud $G_i \neq 0$
 0 pokud $G_i = 0$

$$A^\dagger = A \quad + \text{posit. definit} \Rightarrow \langle x | A | x \rangle \geq 0 \quad \forall |x\rangle$$

$$\textcircled{1} \text{Prädip: } A = \begin{bmatrix} 1 & w^* \\ w & k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ w & I \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & w^+ \\ 0 & k - w w^+ \end{bmatrix}$$

Gauss-eliminace pokračuje, ale místo toho lze:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & w^* \\ w & k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ w & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & k - w w^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & w^* \\ 0 & I \end{bmatrix}$$

↖ sloupové operace

обраще

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & w^+ \\ w & K \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ w/2 & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & K - ww^+/a_{11} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha & w^+/\alpha \\ 0 & I \end{bmatrix} = R_1^+ A_1 R_1$$

Def $\alpha \equiv \sqrt{a_{11}}$

+ pohybavání $A = \underbrace{R_1^+ \dots R_n^+}_{R^+} \underbrace{R_n \dots R_2 R_1}_R = R^+ R$.. Choleského rozklad
... každá H. pos. def. má! $\uparrow$

Věta:

nechť $A=LU$; A nesingulární spojitane
Gaus. Elin bez. pivotingu

potom: $\tilde{L}\tilde{U} = A + \delta A$; $\frac{\|\delta A\|}{\|L\|\|U\|} = O(\epsilon)$
↑
spojitané

ϵ ; def: growth factor $\rho = \frac{\max |u_{ij}|}{\max |a_{ij}|}$

důsledkem: $\tilde{L}\tilde{U} = PA + \delta A$ -- $\frac{\|\delta A\|}{\|A\|} = O(\rho\epsilon)$

pro pivotaci (sl.) neboť + element $\tilde{L} \leq 1 \Rightarrow \|L\| = O(1)$

jde o růst U -- def: growth factor $\rho = \frac{\max_{i,j} |u_{ij}|}{\max_{i,j} |a_{ij}|}$

... dá se dk:

Věta: nechť $PA=LU$ je spojitane GE s čisl. pivotací

potom po výčtení matice plati: $\tilde{L}\tilde{U} = \tilde{P}A + \delta A$, kde

$\frac{\|\delta A\|}{\|A\|} = O(\rho\epsilon)$ pro nějakou matici δA $\left\{ \begin{array}{l} a) P = \tilde{P} \text{ pro dost malá } \epsilon \\ \text{plati } |l_{ij}| < 1 \end{array} \right.$

Nejhorší případ

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \longrightarrow U = \begin{pmatrix} 1 & & & & 1 \\ & 1 & & & 2 \\ & & 1 & & 4 \\ & & & 1 & 8 \\ & & & & 16 \end{pmatrix}$$

... growth factor ... $\rho = 2^{n-1}$

-- Věta: GE s čisl. pivotací je opětne stabilní, ale $O(\epsilon)$ -- ale prefaktor až 2^{n-1} !

Stabilita v praxi: OK -- growth factor max $|m|$ -- exp. malá počet.
větších

+ ukázat obr 22.1, 22.2.

Haušholderův algoritmus Q-R faktorizace:

for $k = 1 \dots m$: $x = A_{k:m,k}$

$$\vec{v}_k = \text{sign}(x_1) \|x\| \vec{e}_1 + \vec{x}$$

$$\vec{v}_k = \vec{v}_k / \|\vec{v}_k\|$$

$$A_{k:m,k:m} = A_{k:m,k:m} - \frac{2 \vec{v}_k \vec{v}_k^T}{\|\vec{v}_k\|^2} A_{k:m,k:m}$$

+ vytvoření matice Q: $Q^T = Q_m \dots Q_2 Q_1$ tj. $Q = Q_1 Q_2 \dots Q_m$

výpočet $Q^T b$: $k = 1 \dots m$: $b_{k:m} = b_{k:m} - 2 \langle \vec{v}_k, x \rangle \vec{v}_k$

výpočet Qx : $k = m \dots 1$: $x_{k:m} = x_{k:m} - 2 \langle \vec{v}_k, x \rangle \vec{v}_k$

... jen $m \times m$ místo $m \times m^2$

konstrukce Q ... postupně aplikace na $\vec{e}_1, \vec{e}_2 \dots \vec{e}_m$

Počet operací na Haušholdera ... $2mn^2 - \frac{2}{3}n^3$

pozn. podobný algoritmus jako Haušholder lze udělat pomocí Givens rotací
ale hodně větší počet oper.

ke cvičení: práce s maticemi $x(:,2) = \begin{pmatrix} x_{1,2} \\ x_{2,2} \\ \vdots \end{pmatrix}$

přirazení $v(:,2) = x(:,2)$

$$\|x\|^2 = \text{SUM}(x(:,2) * x(:,2))$$

$$B = Ax \quad \dots \quad B(:,i) = \text{MATMUL}(A(:,i), x(:,i))$$

$$\text{max. hodnota } |a_{ij}| = \text{MAXVAL}(\text{abs}(A(:,i)))$$

CALL RANDOM_NUMBER(x) ... gener. náh. č. z $(0,1)$

$R = A$
 for $k = 1, m$
 for $j = k+1, m$
 $R_{j,j:m} = R_{j,j:m} - R_{k,j:m} R_{k,j}^* / R_{kk}$
 $R_{k,k:m} = R_{k,k:m} / \sqrt{R_{kk}}$

} $\sim \frac{1}{3} m^3 \text{ FLOPS}$

Stabilita: $\tilde{R}^T \tilde{R} = A + \delta A$, kde $\|\delta A\| / \|A\| = O(\epsilon)$

PROBLÉM HLEDÁNÍ VLASTNÍCH ČÍSEL + VEKTORŮ (diagonalizace matic)

OPAKOVÁNÍ Z ALGEBRY:

def ... pokud $Ax = \lambda x$ pak λ .. vl.č. x .. vl.v.
 vl.prostor; spektrum

→ diagonalizace $A = X \Lambda X^{-1}$

charakteristický polynom .. $p_A(z) \equiv \det(zI - A)$

• λ je vl.č. $\Leftrightarrow p_A(\lambda) = 0$

důstl ... i pro reál. matice může být $\lambda \in \mathbb{C}$

- jakýkoli algoritmus pro hledání λ musí být iterativní
 (nebo najít koneč. počet hodnot)

Perfektní matice $\begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$ versus $\begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$... stejný $p_A(z)$
 ale má jen jeden vl.v.

Unitární diagonalizace: $A = Q \Lambda Q^T$

matice lze unit. diagonalizovat $\Leftrightarrow A$ je normální, $[A, A^T] = 0$

Shorova faktorizace: $A = Q T Q^T$ T .. horní Δ

→ vl.č. na diagonále

věta: $\nexists$ matice nelze shorovu faktorizaci

většina iter. metod ... $t_{i+1} = F(t_i)$ kde $t_0 = A$
 $t_\infty = T$

+ vyslední ... nejdříve převést A do spec. tvaru

+ Jakobiho metoda dle sloupců

+ podmíněnost problému:

Věta nechť $A(\epsilon) = A + \epsilon C$ kde $\|C\| = \|A\|$ pak

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\lambda(\epsilon) - \lambda}{\epsilon} = \frac{\gamma^* C x}{\gamma^* x} \quad \text{kde } \gamma, x \text{ jsou levý a pravý v. v. } A$$

Důsledek: pro sym. matici A je libovol. vektor, ale
pro Hermit matici (nebo unit.-sym. normální) je $\gamma = x$

$$t; \quad \frac{d\lambda}{d\epsilon} = \langle x | C | x \rangle \quad (\text{normovaný } x)$$

Gaussova eliminace a LU rozklad

Gauss. Elim - 1)

problém: najít $x: Ax = b$; A, b zadane

→ řešení znáte -- Gauss. eliminace (G.E.)

- uvědomte si, že $A = LU = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots \\ l_{21} & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \\ l_{m1} & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \dots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \dots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & u_{nn} \end{bmatrix}$... výhodné pro opakované užití
- uvědomte si, že nestabilita → pivotace

• Jeden krok G.E:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots \\ a_{21} & a_{22} & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{j1} & a_{j2} & \dots & a_{jn} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix} \rightarrow \tilde{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots \\ 0 & \tilde{a}_{22} & \tilde{a}_{23} & \dots \\ 0 & \tilde{a}_{32} & \tilde{a}_{33} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ 0 & \tilde{a}_{m2} & \tilde{a}_{m3} & \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ -l_{21} & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -l_{m1} & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} \cdot A$$

kde $\tilde{a}_{ji} = a_{ji} - \frac{a_{j1}}{a_{11}} \cdot a_{1i} \rightarrow l_{j1} \dots j=2 \dots m$

podobně další řádky: ... obecně: $L_k = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & -l_{k,k+1} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & -l_{k,m} & \dots & 1 \end{pmatrix} \quad l_{ki} = \frac{\tilde{a}_{ki}}{\tilde{a}_{kk}}$

nakonec dostaneme: $L_{m-1} \dots L_2 L_1 A = U = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \dots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \dots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & u_{nn} \end{pmatrix}$
horní trojúhelníková

Lze interpretovat následovně: $A = L_1^{-1} \dots L_{m-1}^{-1} U = LU$

kde $L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{m1} & l_{m2} & \dots & 1 \end{pmatrix}$ neboť $\begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{m1} & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ -l_{21} & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -l_{m1} & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} = I$

ALGORITHMUS G.E:

$$U = A$$

$$L = I$$

for $k = 1, m-1$:

for $j = k+1, m$:

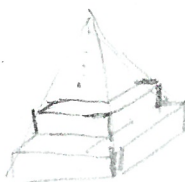
$$l_{jk} = u_{jk} / u_{kk}$$

$$u_{jk:m} = u_{j,k+1:m} - l_{jk} \cdot u_{k,k+1:m}$$

$$\sum_{k=1}^{m-1} 2(m-k) \cdot (m-k) = \text{obecně}$$

asymptotická složitost

$$\sim \frac{2}{3} n^3 + O(n^2) \text{ FLOPS}$$



4 pok. je hlavně

• použití na řešení $Ax = b \rightarrow L \underbrace{Ux}_y = b \rightarrow \begin{cases} Ly = b \\ Ux = y \end{cases} \left. \begin{matrix} \rightarrow Ly = b \\ Ux = y \end{matrix} \right\} \begin{matrix} 2 \times \text{zpět.} \\ \text{dosazení} \end{matrix}$

stabilita G.E. bez pivotace

GE - 2

- obecně nestabilní - nepoužívat: výjimky:

- diag. dominantní matice $\rightarrow |a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}| \quad \forall i$ (řádkově domin.)
- symetrické pozit. definit. matice ($\rightarrow$ lepší Choleského rozkl.)

- důvod nestability: č. podmíněnosti: obecně $\kappa(L)\kappa(U) \geq \kappa(A)$
ale může být $\kappa(L)\kappa(U) \gg \kappa(A)$

PR: $A = \begin{pmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = LU$ kde $L = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 10^{20} & 1 \end{pmatrix}$ $U = \begin{pmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 0 & 1-10^{20} \end{pmatrix}$

algoritmus (včetně zaokrohl.) je stabilní, $\hat{U} = \begin{pmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 0 & -10^{20} \end{pmatrix} = \tilde{U}$

ale ne zpětně stabilní: $L \cdot \tilde{U} = \begin{pmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$
(běžná situace ve vyš. dim)

obecně pro větší matice neplatí

v našem příkladě $\kappa(L)=1$; $\kappa(U) \approx 10^{40}$; $\kappa(A) = \frac{\sqrt{5}+1}{\sqrt{5}-1} \approx 2.6$

Pivotace - řádková

- jednoduché náprava problému:

před každým krokem G.E. prohodíme řádky, aby nejv. na diag.

- formálně ... prohození ... násobíme permut. maticí zprava
(zprava prohoz. sloupce)

př: transpozice $i \leftrightarrow j$:
$$\begin{matrix} i & j \\ \downarrow & \downarrow \\ \begin{matrix} 1 & & \\ & 0 & 1 \\ & 1 & 0 \end{matrix} \end{matrix}$$

cyklus $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3$

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

ALGORITMUS G.E. S ŘÁDKOVOU PIVOTACÍ

$$U = A; L = I; P = I$$

for $k = 1:m-1$

for $i = k:m$ najít $\max |u_{ik}|$

$$u_{k,k:m} \leftrightarrow u_{i,k:m}$$

$$l_{k,1:(k-1)} \leftrightarrow l_{i,1:(k-1)}$$

$$p_{k,:} \leftrightarrow p_{i,:}$$

for $j = (k+1):m$

$$l_{jk} = u_{jk} / u_{kk}$$

$$u_{j,k:m} = u_{j,k:m} - l_{jk} u_{k,k:m}$$

stále $\frac{2}{3} m^3$ FLOPs

$\rightarrow$ přispívá vřádku m^2

vdaném kroku: $L = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{pmatrix}$

$$U = \begin{pmatrix} & & & \\ & & & \\ & & & \\ 0 & & & \end{pmatrix}$$

• Dá se formulovat tak, že
L a U ukládáme do pův.
matice:

$$\begin{pmatrix} & & & \\ & & & \\ & & & \\ 0 & & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} & & & \\ & & & \\ & & & \\ 0 & & & \end{pmatrix}$$

VÝSLEDEK algoritmu je totiž, jakýmsi výsledkem permutací
znale předem:

$$\boxed{PA = LU} \leftrightarrow L_{n-1} P_{n-1} \dots L_2 P_2 L_1 P_1 A = U$$

pozn: úplná pivotace ... též sloupcové permutace $PAQ = LU$
 $\xrightarrow{\text{perm. ř.}} \xrightarrow{\text{perm. sl.}}$
 $\rightarrow$ vyhledávání pivotu přispívá k času v řádu n^3 !

Zpětná stabilita Gauss. eliminace

Věta: mohl $A = LU$; A - nesingulární,
 $\xrightarrow[\text{arit. s. } \epsilon]{\text{přes. arith.}} \tilde{L} \tilde{U}$ - spočítané G.E. bez pivotace

Pak: $\tilde{L} \cdot \tilde{U} = A + \delta A$; kde $\frac{\|\delta A\|}{\|A\| \cdot \|\tilde{U}\|} = O(\epsilon)$

Jde formulovat takto: ~~PAQ~~ (pro pivotaci):

$$\tilde{L} \tilde{U} = \tilde{P} A + \delta A : \frac{\|\delta A\|}{\|A\|} = O(\epsilon) \text{ kde } g = \frac{\max |u_{ij}|}{\max |a_{ij}|}$$

neboť $\forall$ elementy $L \leq 1 \Rightarrow \|L\| = O(1)$; $\|U\| = g \|A\|$

(dá se dk. nigerová, a tím, že $u_{ij} \in \mathbb{R} \Rightarrow \tilde{P} = P$)

Prakticky: Jak je velké g ?

Dá se DK, že $g \leq 2^{n-1}$

Nejhorší případ

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \longrightarrow U = \begin{pmatrix} 1 & & & & 1 \\ & 1 & & & 2 \\ & & 1 & & 4 \\ & & & 1 & 8 \\ & & & & 16 \end{pmatrix}$$

Věta: GE s část. pivotací je zpětně stabilní .. chyba $O(\epsilon)$

varování: konst. v $O(\epsilon)$ závisí na n ! ... až 2^{n-1}

tj. pro matici 50×50 může být řád. $g \sim 1$!

Prakticky se ukazuje: g se škáluje jako 2^n
 + pravd. většinou g je exp. malá

Dodatečné poznámky:Použití LU rozkladu:

- ① Řešení soust. rovnic $\sim \frac{2}{3}n^3 \text{ FLOPs}$
- ② Opakované řeš. s různ. pravými str. $\sim \frac{2}{3}n^3 + p \cdot n^2 \text{ FLOPs}$
- ③ Nalezení A^{-1} ... viz ② ... $\sim n^3 \text{ FLOPs}$
- ④ Nalezení determinantu $|A| = |L| \cdot |U| = u_{11} \cdot u_{22} \cdot \dots \cdot u_{nn}$
- ⑤ Pásové matice $A = \begin{bmatrix} \text{---} & & \\ & \text{---} & \\ & & \text{---} \end{bmatrix}$ dá se redukovat na $\sim d^2 n \text{ FLOPs}$.

⑥ Symetrické (Hermitovské) matice a Choleského rozklad

PR: 1. krok GE pro $A = \left[\begin{array}{c|c} 1 & w^+ \\ \hline w & B \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c|c} 1 & 0 \\ \hline w & I \end{array} \right] \cdot \left[\begin{array}{c|c} 1 & w^+ \\ \hline 0 & B - w w^+ \end{array} \right]$ matice $|w| < |w|$

místo přímého pokračování GE vložíme mezikrok (symetrizace)

$$A = \left[\begin{array}{c|c} 1 & 0 \\ \hline w & I \end{array} \right] \left[\begin{array}{c|c} I & 0 \\ \hline 0 & B - w w^+ \end{array} \right] \left[\begin{array}{c|c} 1 & w^+ \\ \hline 0 & I \end{array} \right]$$

sloupce operace stejné jako byly řádkové

+ lze dále pokračovat. Pro pozitivně definitní A zkusíme:

$$A = \left[\begin{array}{c|c} a_{11} & w^+ \\ \hline w & B \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c|c} \alpha & 0 \\ \hline w/\alpha & I \end{array} \right] \left[\begin{array}{c|c} 1 & 0 \\ \hline 0 & B - \frac{w w^+}{\alpha} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c|c} \alpha & w^+/\alpha \\ \hline 0 & I \end{array} \right] \equiv R_1^+ A_1 R_1$$

kde $\alpha = \sqrt{a_{11}}$... lze pokračovat, až $A_n = I$ tj.

$$A = R_1^+ \dots R_n^+ R_n \dots R_2 R_1 \equiv R^+ R = \begin{bmatrix} \text{---} & & \\ & \text{---} & \\ & & \text{---} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \text{---} & & \\ & \text{---} & \\ & & \text{---} \end{bmatrix}$$

Věta: každá symetrická (Hermita) posit. definit matice má Choleského rozklad.

ALGORITHMUS: Choleského rozklad

$$R = A$$

for $k = 1:n$

for $j = k+1:n$

$$R_{j,j:n} = R_{j,j:n} - \frac{R_{kj}^*}{R_{kk}} \cdot R_{k,j:n}$$

$$R_{k,k:n} = R_{k,k:n} / \sqrt{R_{kk}}$$

$$\frac{1}{3}n^3 \text{ FLOPs}$$

$$R_{kk} = \langle 1 | R_{k-1}^{-1} \dots R_1^{-1} A R_1 \dots R_{k-1} | 1 \rangle$$

$$\geq 0 \quad (\text{posit. definit})$$

semi def. nestačí
→ dělení

⑦ Řidké matice: dá se uvažovat s různ. modifikacích, ale většinou → iterační metody

① Iterační zpřesňování řešení:

$$\left. \begin{array}{l} Ax = b \\ A\tilde{x} = \tilde{b} = b + \delta b \\ \hookrightarrow x = x + \delta x \end{array} \right\} \rightarrow A\delta x = \delta b \quad \text{tj. korekce } \cancel{x = \tilde{x}} \\ x = \tilde{x} - A^{-1}\delta b \\ x = \tilde{x} - A^{-1}(A\tilde{x} - b)$$

→ obzvláště výhodné v kombinaci s LU

→ dá se využít i ke korekci zaokrohl. chyb.

② Defektní problémy (nebo špatně podmíněné):

řešení pomocí SVD: $A = U \Sigma V^T \equiv \sum_i \sigma_i |u_i\rangle \langle v_i|$

- pokud $|A| = 0 \dots \exists \sigma_i = 0$ (jeden nebo více)

řes. obecně neexist. a není jednoznačné, ale $\vec{x} = \vec{y} + \vec{z}$

kde $\vec{z} \in \ker A$ je libovolné

a $\vec{y}$ nejde najít, abychom minimalizovali $\|b - Ax\|$ v nejv. $\square$

přitom $y = \tilde{A}^{-1}b \equiv V \tilde{\Sigma}^{-1} U^T b$, kde

$\tilde{\Sigma}$ má na diagonále $\sigma_i^{-1} = \frac{1}{\sigma_i}$ nebo 0 pro $\sigma_i = 0$

- pokud $\kappa(A) \gg 1$.. špatně podmíněná matice:

řešíme stejně, ale prahová hodnota

$\sigma_i > p$ nebo $\sigma_i < p$

PŘ: demonstrace pro obrácenou úlohu.

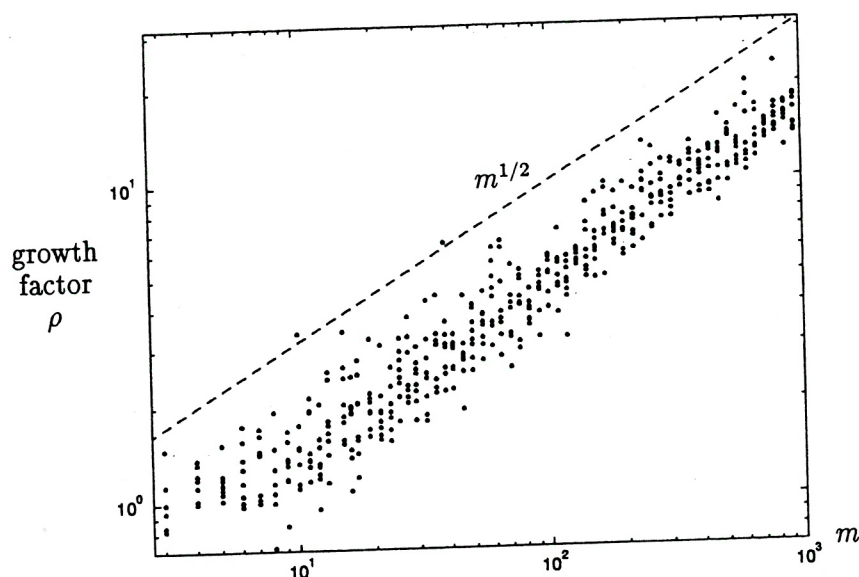


Figure 22.1. Growth factors for Gaussian elimination with partial pivoting applied to 496 random matrices (independent, normally distributed entries) of various dimensions. The typical size of ρ is of order $m^{1/2}$, much less than the maximal possible value 2^{m-1} .

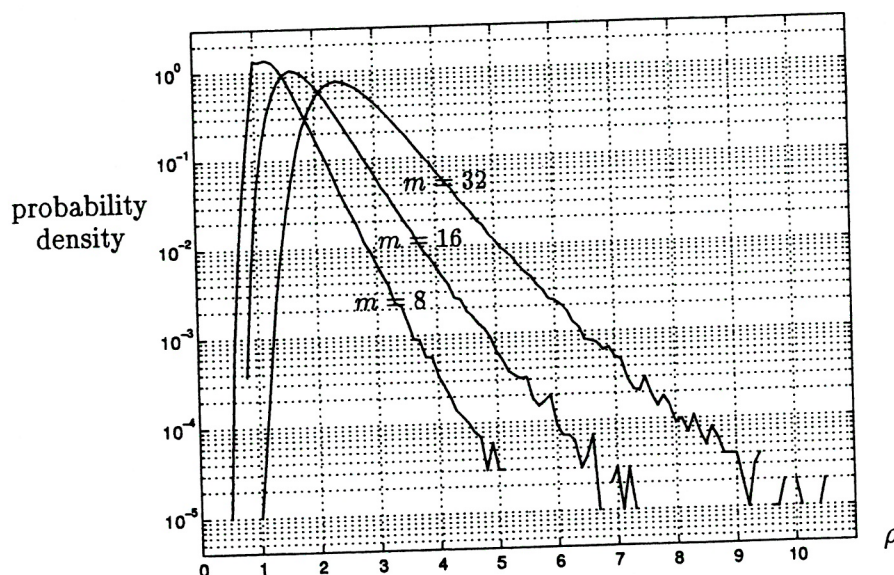


Figure 22.2. Probability density distributions for growth factors of random matrices of dimensions $m = 8, 16, 32$, based on sample sizes of one million for each dimension. The density appears to decrease exponentially with ρ . The chatter near the end of each curve is an artifact of the finite sample sizes.

