Pokročilé numerické metody I
Různá témata

Jiří Zelinka

Podzim 2023

12. přednáška

Funkce matice

Odmocnina z matice

Pro pozitivně semidefinitní reálnou matici A hledáme matici B: $B \cdot B = A$.

Pak B se nazývá odmocnina z matice A.

Matici A lze diagonalizovat:

$$A = V \cdot D \cdot V^T$$

pro $D = diag(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$, $\lambda_i \geq 0$.

Položíme $\sqrt{D} = diag(\sqrt{\lambda_1}, \ldots, \sqrt{\lambda_n})$. Pak

$$B = V \cdot \sqrt{D} \cdot V^T$$

Matice B je taky pozitivně semidefinitní a je jediná pozitivně semidefinitní odmocnina.

Existují odmocniny z jiných matic?

Dají se vypočítat hodnoty jiných funkcí pro matice?

Funkce matice jako řada

P – polynom, $P(A)$ známe ($A^0 = I$).

Funkce jako nekonečná řada (Taylorova):

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k \;\Rightarrow\; f(A) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k A^k$$

Konverguje řada matic?

1. A je diagonální:

$A = diag(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$, pak
$A^k = diag(\lambda_1^k, \ldots, \lambda_n^k)$, odtud

$$f(A) = diag(\sum_{k=0}^{\infty} a_k \lambda_1^k, \ldots, \sum_{k=0}^{\infty} a_k \lambda_n^k) =$$

$$= diag(f(\lambda_1), \ldots, f(\lambda_n)).$$

2. A lze diagonalizovat:

$$A = V \cdot D \cdot V^{-1} \ \Rightarrow \ A^k = V \cdot D^k \cdot V^{-1}$$

pak

$$f(A) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k A^k = V(\sum_{k=0}^{\infty} a_k D^k) V^{-1} = V \cdot f(D) \cdot V^{-1}$$

3. Jordanův kanonický tvar:

$A = V \cdot J \cdot V^{-1}, \quad J = diag(J_1, \ldots, J_r)$. Pak

$$f(A) = V \cdot f(J) \cdot V^{-1}, \quad f(J) = diag(f(J_1), \ldots, f(J_r))$$

Funkce Jordanova bloku (řádu $n+1$)

$$f\left(\begin{bmatrix} \lambda & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda & 1 & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \dots & \ddots & \lambda & 1 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & \lambda \end{bmatrix}\right) = \begin{bmatrix} \frac{f(\lambda)}{0!} & \frac{f'(\lambda)}{1!} & \frac{f''(\lambda)}{2!} & \dots & \frac{f^{(n)}(\lambda)}{n!} \\ 0 & \frac{f(\lambda)}{0!} & \frac{f'(\lambda)}{1!} & \vdots & \frac{f^{(n-1)}(\lambda)}{(n-1)!} \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \dots & \ddots & \frac{f(\lambda)}{0!} & \frac{f'(\lambda)}{1!} \\ 0 & \dots & \dots & 0 & \frac{f(\lambda)}{0!} \end{bmatrix}.$$

Hodnota $f(A)$ je definována, pokud pro vlastní čísla λ matice A jsou definovány hodnoty $f(\lambda)$, případně $f^{(i)}(\lambda)$ pro derivace do stupně podle řádu Jordanových bloků.

Definice 1

Spektrem matice A nazýváme množinu uspořádaných dvojic $\{[\lambda_i, k_i]\}$ pro všechna vlastní čísla λ_i matice A a k_i jejich násobnost jakožto kořene minimálního polynomu.

Definice 2

Hodnoty funkce f na spektru matice A jsou dány hodnotami $f^{(j)}(\lambda_i)$, pro $j = 0, \ldots, k_i - 1$ pro všechna vlastní čísla λ_i matice A.

Věta 1

Pro libovolné funkce f a g platí $f(A) = g(A)$, pokud f a g mají stejné hodnoty na spektru matice A.

Důsledek

Pro Hermitův interpolační polynom P funkce f na spektru matice A platí $f(A) = P(A)$.

Odmocnina z matice – příklad

$A = \begin{bmatrix} 3 & 4 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ 2 & 4 & 1 \end{bmatrix}$, určete matici B, že $B^2 = A$.

Aplikace

Řešení soustavy obyčejných lineárních diferenciálních rovnic:

$$\begin{pmatrix} y_1'(t) \\ \vdots \\ y_n'(t) \end{pmatrix} = Y'(t) = A \cdot Y(t), \;\; Y(t_0) = Y_0$$

Řešení: $Y(t) = e^{tA} Y_0$

Za řídké matice považujeme zpravidla matice, které mají maximálně 5% nenulových prvků.

Uložení řídkých vektorů

Ukládáme pouze nenulové prvky a jejich indexy.
Př: vektor $\boldsymbol{v} = (2, -2, 0, -3, 0, 0, 4, 3, 0, -1)$ uložíme jako dvojice hodnot a indexů:

pořadí	1	2	3	4	5	6
val($\boldsymbol{v}$)	2	-2	-3	4	3	-1
ind($\boldsymbol{v}$)	1	2	4	7	8	10

Při tomto způsobu uložení vektoru nezáleží na pořadí, takže stejný vektor může reprezentovat také jako:

pořadí	1	2	3	4	5	6
val($\boldsymbol{v}$)	3	2	-3	4	-1	-2
ind($\boldsymbol{v}$)	8	1	4	7	10	2

Často se používá jako další položka odkaz (link), který usnadňuje manipulaci s vektorem, například přidat položku na určité místo bez přesunů v paměti. Je potřeba mít odkaz na první nenulový prvek (header), 0 značí poslední nenulový prvek.

Předchozí vektor s odkazy na následující nenulovou složku:

pořadí	1	2	3	4	5	6
val($\boldsymbol{v}$)	3	2	-3	4	-1	-2
ind($\boldsymbol{v}$)	8	1	4	7	10	2
link($\boldsymbol{v}$)	5	6	4	1	0	3
header	2					

Přidáme hodnotu 5 na pozici 6:

pořadí	1	2	3	4	5	6	7
val($\boldsymbol{v}$)	3	2	-3	4	-1	-2	**5**
ind($\boldsymbol{v}$)	8	1	4	7	10	2	**6**
link($\boldsymbol{v}$)	5	6	**7**	1	0	3	**4**
header	2						

Je možné použít více odkazů pro různé účely (řazení podle velikosti apod.)

Uložení řídkých matic

Předpokládejme, že matice A je řádu n a má m nenulových prvků. Pro každý prvek potřebujeme uložit jeho řádkový a sloupcový index, celkem tedy $3m$ hodnot.

Ukládaná pole: VA – nenulové hodnoty matice A
CI, RI – sloupcové a řádkové indexy
Příklad

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 3 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 4 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

VA$= \{3, 2, 2, 1, 5, 2, 4, 1\}$
CI$= \{3, 1, 4, 3, 1, 5, 2, 5\}$
RI$= \{1, 2, 2, 3, 4, 4, 5, 5\}$

Existují úspornější schemata

Schema 1

Matici ukládáme po sloupcích, místo CI ukládáme pole CIP, které pro každý sloupec udává, kolikátý nenulový prvek ze všech je jako první v daném sloupci. Schema bývá označováno CSC (*Compressed Sparse Column* format). Vyžaduje uložit $2m + n$ hodnot.

Příklad

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 3 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 4 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

VA$= \{2, 5, 4, 3, 1, 2, 2, 1\}$
RI$= \{2, 4, 5, 3, 1, 2, 4, 5\}$
CIP$= \{1, 3, 4, 6, 7\}$

Analogicky se definuje CSR uložení.

Schema 2

Matici ukládáme po sloupcích, každý sloupec začíná nulou a číslem sloupce, pak následuje vždy číslo řádku a příslušný prvek matice. Data jsou ukončena dvěma nulami. Celkem je potřeba $2m+2n+2 = 2(m+n+1)$ hodnot. Existuje řádková varianta.

Příklad

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 3 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 4 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

pA=
$\{0, 1, 2, 2, 4, 5, 0, 2, 5, 4, 0, 3, 1, 3, 3, 1, 0, 4, 2, 2, 0, 5, 4, 2, 5, 1, 0, 0\}$

Schema 3

Matici ukládáme po sloupcích, pro každý prvek $a_{i,j}$ uložíme do pole LD celkové pořadí $\lambda(i,j)$ v matici A (po sloupcích), tedy $\lambda(i,j) = i + n(j-1)$. Celkem je potřeba $2m$ hodnot. Opět existuje řádková varianta.

Příklad

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 3 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 4 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

VA$= \{2, 5, 4, 3, 1, 2, 2, 1\}$
LD$= \{2, 4, 10, 11, 13, 17, 24, 25\}$

Schema 4

Používá se pro symetrické pásové matice. Předpokládejme, že pro každý řádkový index i existuje p_i, $p_i \ll n$, že $A_{i,j} = 0$ pro $i.j > p_i$. Prvky ukládáme po řádcích vždy od prvního nenulového až po diagonální, můžeme tedy uložit i nějaké nuly. Do pomocného pole PD ukládáme pozice diagonálních prvnků ve VA. Celkem potřebujeme $\sum p_i + n$ hodnot.

Příklad

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 4 & 3 & 0 & 0 \\ 4 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 3 & 5 \\ 0 & 0 & 0 & 5 & 1 \end{pmatrix}$$

VA$= \{2, 4, 1, 3, 0, 1, 2, 3, 5, 1\}$
PD$= \{1, 3, 6, 8, 10\}$

Schema 5

Využívá se pro matice s diagonální strukturou, hlavní diagonále přidělíme číslo 0, nad ní očíslujeme diagonály kladnými čísly, pod ní zápornými. Ukládáme jen ty diagonály, kde jsou nenulové prvky, podle indexu je možné odvodit délku diagonály.

Kombinovaná schemata

Pro některé operaci s maticemi (například násobení) je možné kombinovat řádkové a sloupcové uložení s využitím odkazů (linků) nebo pomocných indexů.

Příklad: modifikace schematu 3

Použijeme pomocný index RO, který udává pořadí prvků z VA bráno po řádcích, a pole LD ve sloupcové i řádkové variantě.

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 3 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 4 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

VA$= \{2, 5, 4, 3, 1, 2, 2, 1\}$
RO$= \{4, 1, 6, 5, 2, 7, 3, 8\}$
LDC$= \{2, 4, 10, 11, 13, 17, 24, 25\}$
LDR$= \{3, 6, 9, 12, 16, 20, 22, 25\}$

Operace s maticemi zachovávající řídkost

- Gaussova eliminace pro pásové matice
- Gaussova eliminace při vhodné strategii minimalizující výplň
- QR rozklad pro *izolované* nenulové prvky mimo hlavní diagonálu
- řešení systémů lineárních rovnic: iterační metody