

Univerzita Karlova v Praze  
Matematicko-fyzikální fakulta

## DIPLOMOVÁ PRÁCE



Hana Marková

### **Pseudospektrum matice**

Katedra numerické matematiky

Vedoucí diplomové práce: Doc. RNDr. Vladimír Janovský, DrSc.  
Studijní program: Numerická a výpočtová matematika

2009

Ráda bych poděkovala doc. RNDr. Vladimíru Janovskému, DrSc. za vedení diplomové práce, poskytnuté materiály a programové vybavení. Velký dík patří rovněž celé mojí rodině a přátelům za podporu při studiu.

Prohlašuji, že jsem svou diplomovou práci napsala samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů. Souhlasím se zapůjčováním práce a jejím zveřejňováním.

V Praze dne 7. 8. 2009

Hana Marková

# Obsah

<b>1</b>	<b>Úvodem</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Základní pojmy</b>	<b>6</b>
2.1	Vlastní čísla, vektory, spektrum . . . . .	6
2.2	Normy, vlastnosti matic . . . . .	7
2.3	Tři základní definice pseudospektra . . . . .	11
2.4	SVD rozklad, čtvrtá definice . . . . .	14
<b>3</b>	<b>Pseudospektrum lineárních operátorů</b>	<b>18</b>
3.1	Změna norem v Banachových prostorech . . . . .	21
<b>4</b>	<b>Výpočet pseudospektra</b>	<b>22</b>
4.1	„Mřížková“ metoda . . . . .	22
4.1.1	Iterační metody pro výpočet $s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$ . . . . .	23
4.1.2	Projekce do podprostorů s nižší dimenzí . . . . .	25
4.1.3	Volba mřížky . . . . .	27
4.2	Kontinuační techniky . . . . .	28
4.3	„Chudé“ pseudospektrum . . . . .	32
4.4	Metody Krylovových podprostorů . . . . .	33
<b>5</b>	<b>Chování pseudospektra</b>	<b>35</b>
5.1	Dynamické systémy se spojitým časem . . . . .	36
5.1.1	Aplikace odhadů . . . . .	42
5.2	Dynamické systémy s diskrétním časem . . . . .	43
<b>6</b>	<b>Lasery</b>	<b>48</b>
6.0.1	Matematické problémy spjaté s teorií laserů . . . . .	51
	<b>Literatura</b>	<b>62</b>

Název práce: Pseudospektrum matice  
Autor: Hana Marková  
Katedra (ústav): Katedra numerické matematiky  
Vedoucí diplomové práce: Doc. RNDr. Vladimír Janovský, DrSc.  
e-mail vedoucího: janovsky@karlin.mff.cuni.cz

Abstrakt: V předložené práci studujeme vlastnosti, výpočetní metody a chování pseudospektra matice či lineárního operátoru. Nejprve zavedeme související pojmy, posléze definujeme pseudospektrum matice čtyřmi různými způsoby a shrneme jeho základní vlastnosti. Dále zobecníme teorii o pseudospektru pro lineární operátory na Banachových prostorech. Posléze uvádíme přehled základních metod výpočtu včetně stěžejních možností jeho urychlení, především se však věnujeme výpočtům na mřížce a metodě kontinuace křivky. Nakonec odvodíme odhady, které nám umožní získat přesnější představu o chování dynamických systémů. V poslední kapitole na teorii laserů ukážeme praktické použití.

Klíčová slova: pseudospektrum, SVD, kontinuace křivky, dynamický systém

Title: Matrix Pseudospectrum  
Author: Hana Marková  
Department: Department of Numerical Mathematics  
Supervisor: Doc. RNDr. Vladimír Janovský, DrSc.  
Supervisor's e-mail address: janovsky@karlin.mff.cuni.cz

Abstract: In the present work we study properties, calculation methods and behaviour of pseudospectrum of matrix or linear operator. First we introduce related terms, then we define pseudospectrum in four different ways and show its basic properties. Consequently, we generalize the theory of pseudospectrum for linear operators in Banach spaces. Basic methods of computation including fundamental possibilities of speeding up follow, but especially we go through computations on grid and path following technique. In the end we derive bounds which outline behaviour of dynamical systems. The last chapter contains practical example, which relates to laser theory.

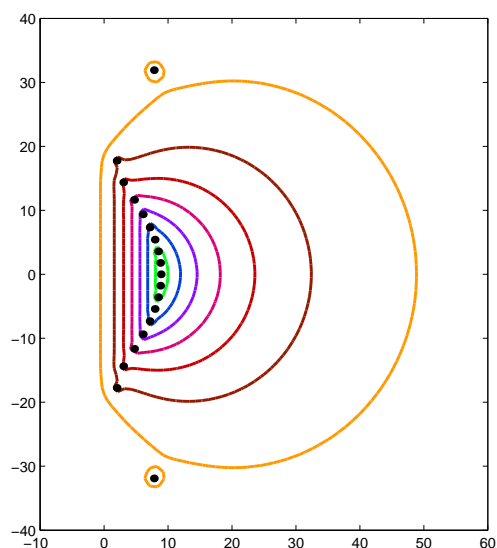
Keywords: pseudospectrum, SVD, path following, dynamical system

# Kapitola 1

## Úvodem

V případě, že vyšetřujeme chování matic a lineárních operátorů, nejčastěji hledáme vlastní čísla, resp. spektrum. Tímto způsobem lze získat informaci o lineárních i nelineárních systémech, včetně jejich stability, resonance apod.

Ukázalo se, že tato metoda může selhat, pokud matice není normální (nemá ortogonální vlastní vektory). Pokusíme se ukázat, že v těchto případech nalezení pseudospektra pravděpodobně povede k daleko lepším výsledkům. Pro každé  $\varepsilon > 0$  je  $\varepsilon$ -pseudospektrum dané matice či operátoru neprázdná množina v komplexní rovině, přičemž spektrum lze získat jako speciální limitní případ.



# Kapitola 2

## Základní pojmy

### 2.1 Vlastní čísla, vektory, spektrum

Ke správnému pochopení pojmu pseudospektra matice je nutné znát alespoň základní pojmy, které se týkají vlastních čísel a vektorů.

**Definice 2.1.** *Nechť  $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{N \times N}$ ,  $\mathbf{v} \in \mathbb{C}^N$  a  $\lambda \in \mathbb{C}$ . Pokud*

$$\mathbf{A}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}, \tag{2.1}$$

*potom  $\mathbf{v}$  je vlastní vektor matice  $\mathbf{A}$  a  $\lambda$  jeho odpovídající vlastní číslo.*

**Definice 2.2.** *Množina všech vlastních čísel matice  $\mathbf{A}$  se nazývá spektrum matice. Jedná se o neprázdnou podmnožinu komplexní roviny  $\mathbb{C}$ , kterou budeme značit  $\sigma(\mathbf{A})$ .*

**Definice 2.3.** *Matici  $(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}$  nazveme resolventou matice  $\mathbf{A}$  v bodě  $z$ ,  $z \in \mathbb{C}$ ,  $z \notin \sigma(\mathbf{A})$ .  $\mathbf{I} \in \mathbb{C}^{N \times N}$  značí jednotkovou matici.*

Spektrum matice lze definovat i za pomoci resolventy.

**Definice 2.4.** *Spektrum matice  $\mathbf{A}$  je množina všech bodů  $z \in \mathbb{C}$  takových, že resolventa  $(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}$  neexistuje.*

Vlastní čísla mají smysl pouze pro čtvercové matice.

Nechť pro matici  $\mathbf{A}$  existuje množina všech vlastních vektorů, tzn. množina  $N$  lineárně nezávislých vektorů  $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_N$ , pro které platí  $\mathbf{A}\mathbf{v}_j = \lambda_j\mathbf{v}_j$ . Pokud označíme  $\mathbf{V}$  matici typu  $N \times N$ , která má jako  $j$ -tý sloupec vektor  $\mathbf{v}_j$  (jedná se tedy o matici vlastních vektorů), a  $\mathbf{\Lambda}$  diagonální matici typu  $N \times N$ , která má na diagonále prvky  $\lambda_j$ , z (2.1) získáme rovnost

$$\mathbf{A}\mathbf{V} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}. \quad (2.2)$$

Jelikož jsou vektory  $\mathbf{v}_j$  lineárně nezávislé, matice  $\mathbf{V}$  je regulární, a proto existuje inverzní matice  $\mathbf{V}^{-1}$ . Dostáváme, že

$$\mathbf{A} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^{-1}. \quad (2.3)$$

Matice s množinou všech vlastních vektorů je tedy diagonalizovatelná. Rozkladem matice  $\mathbf{A}$  se budeme později znovu zabývat, je na něm založena jedna z metod výpočtu pseudospektra.

Na  $\mathbf{A}$  se lze dívat i jako na lineární operátor. Na rozdíl od případu, kdy  $\mathbf{A}$  považujeme za klasickou matici, ne všechna  $z \in \sigma(\mathbf{A})$  musí být nutně vlastními čísly, proto je potřeba pozměnit definici. Lineárními operátory se budeme podrobněji zabývat v následující kapitole, na tomto místě uvedme pouze základní definici spektra.

**Definice 2.5.** *Nechť  $\mathbf{A}$  je uzavřený operátor definovaný na Banachově (či Hilbertově) prostoru. Potom spektrum  $\sigma(\mathbf{A})$  operátoru  $\mathbf{A}$  je množina všech takových  $z \in \mathbb{C}$ , pro která resolventa  $(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}$  neexistuje jako omezený operátor definovaný na celém prostoru.*

## 2.2 Normy, vlastnosti matic

Jak uvidíme, pojem pseudospektra je závislý na normě, proto je potřeba zavést vhodnou maticovou normu. Definujeme tedy skalární součin a normu matice  $\mathbf{A}$  za pomoci váhové matice  $\mathbf{W}$ . Poté jednoduchou transformací  $\mathbf{B} = \mathbf{W}\mathbf{A}\mathbf{W}^{-1}$  získáme matici  $\mathbf{B}$ , pro kterou je problém hledání pseudospektra spojen s Euklidovskou normou a příslušným skalárním součinem.

Nechť  $\mathbf{A}$  je reálná nebo komplexní matice na Hilbertově prostoru se skalárním součinem  $(\cdot, \cdot)$  a normou  $\|\cdot\|$ .

**Definice 2.6.** *Nechť je dána regulární váhová matice  $\mathbf{W}$ . Pak skalární součin  $(\cdot, \cdot)$  a normu  $\|\cdot\|$  definujeme jako*

$$(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = (\mathbf{W}\mathbf{u}, \mathbf{W}\mathbf{v})_2,$$

$$\|\mathbf{u}\| = \|\mathbf{W}\mathbf{u}\|_2,$$

kde  $(\mathbf{u}, \mathbf{v})_2 = \mathbf{u}^H \mathbf{v}$ ,  $\|\mathbf{u}\|_2 = \sqrt{\mathbf{u}^H \mathbf{u}}$  je Euklidovská norma.

Vektor  $\mathbf{u}^H$  je hermitovsky sdružený vektor k  $\mathbf{u}$ , jedná se o transponovaný vektor, ve kterém jsou původní složky nahrazeny komplexně sdruženými. Přesnou definici zavedeme pro libovolnou matici.

**Definice 2.7.** *Hermitovsky sdruženou matici  $\mathbf{A}^H \in \mathbb{C}^{N \times N}$  k  $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{N \times N}$  získáme z  $\mathbf{A}$  tak, že provedeme její transpozici a místo každého z prvků zapíšeme jeho komplexně sdruženou hodnotu, tzn.*

$$(\mathbf{A}_{ij})^H = \overline{\mathbf{A}_{ji}},$$

kde indexy označují jednotlivé  $i, j$ -té prvky pro  $1 \leq i, j \leq N$  a horní vodorovná čárka komplexně sdruženou matici.

**Věta 2.8.** *Nechť  $X$  je Hilbertův prostor se skalárním součinem  $(\cdot, \cdot)$  a nechť  $\mathbf{A} : X \rightarrow X$  je lineární spojité operátor. Pak existuje právě jeden spojité lineární operátor  $\mathbf{A}^* : X \rightarrow X$  takový, že*

$$(\mathbf{A}\mathbf{u}, \mathbf{v}) = (\mathbf{u}, \mathbf{A}^*\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{u}, \mathbf{v} \in X.$$

$\mathbf{A}^*$  se nazývá adjungovaný operátor k  $\mathbf{A}$ .

Po úpravách dostáváme, že

$$\mathbf{A}^* = (\mathbf{W}^H \mathbf{W})^{-1} \mathbf{A}^H (\mathbf{W}^H \mathbf{W}).$$



Pokud  $\mathbf{W} = \mathbf{I}$ , potom  $(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = (\mathbf{u}, \mathbf{v})_2$ ,  $\|\mathbf{u}\| = \|\mathbf{u}\|_2$  a  $\mathbf{A}^* = \mathbf{A}^H$ . Pro obecnou  $\mathbf{W}$  se zbavíme problémů tím, že zavedeme novou matici

$$\mathbf{B} = \mathbf{W}\mathbf{A}\mathbf{W}^{-1}. \quad (2.4)$$

Je-li  $\mathbf{v} = \mathbf{A}\mathbf{u}$  pro nějaké  $\mathbf{u}$  a  $\mathbf{v}$ , potom z (2.4) máme

$$(\mathbf{W}\mathbf{v}) = \mathbf{W}(\mathbf{A}\mathbf{u}) = \mathbf{B}(\mathbf{W}\mathbf{u}).$$

Z definice normy matice  $\mathbf{A}$  generované normou vektoru  $\|\cdot\|$ ,

$$\|\mathbf{A}\| = \max_{\mathbf{u} \neq \mathbf{0}} \frac{\|\mathbf{A}\mathbf{u}\|}{\|\mathbf{u}\|},$$

dostáváme

$$\|\mathbf{A}\| = \max_{\mathbf{u} \neq \mathbf{0}} \frac{\|\mathbf{A}\mathbf{u}\|}{\|\mathbf{u}\|} = \max_{\mathbf{u} \neq \mathbf{0}} \frac{\|\mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{W}\mathbf{u}\|}{\|\mathbf{u}\|} = \max_{\mathbf{u} \neq \mathbf{0}} \frac{\|\mathbf{B}\mathbf{W}\mathbf{u}\|_2}{\|\mathbf{u}\|_2} = \|\mathbf{B}\|_2.$$

Odtud plyne, že  $\|\mathbf{A}\| = \|\mathbf{B}\|_2$ . Tím jsme ukázali, že v maticovém případě můžeme dále bez obav využívat Euklidovskou normu. Připomeňme ještě tři základní maticové pojmy.

**Definice 2.9.** Matice  $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{N \times N}$  je normální, pokud

$$\mathbf{A}^H \mathbf{A} = \mathbf{A} \mathbf{A}^H.$$

Je-li  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ , pak  $\mathbf{A}^H = \mathbf{A}^T$ , kde  $\mathbf{A}^T$  značí matici transponovanou k  $\mathbf{A}$ .

**Definice 2.10.** Matice  $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{N \times N}$  je hermitovská, pokud

$$\mathbf{A}^H = \mathbf{A}.$$

**Definice 2.11.** Matice  $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{N \times N}$  nazveme unitární, pokud

$$\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^H,$$

kde  $\mathbf{A}^{-1}$  je inverzní matice k  $\mathbf{A}$ .

Dále připomeňme vztah normální matice a diagonalizovatelnosti.

**Věta 2.12.** Matice  $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{N \times N}$  je normální právě tehdy, když je unitárně diagonalizovatelná, tj. existuje diagonální matice  $\mathbf{\Lambda} \in \mathbb{C}^{N \times N}$  a unitární matice  $\mathbf{U} \in \mathbb{C}^{N \times N}$  tak, že

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{\Lambda}\mathbf{U}^H,$$

přičemž  $\mathbf{\Lambda}$  obsahuje vlastní čísla  $\lambda_1, \dots, \lambda_N$  a sloupce matice  $\mathbf{U}$  jsou jim po řadě odpovídající vlastní vektory. Navíc platí, že

$$\mathbf{U}^H\mathbf{U} = \mathbf{U}\mathbf{U}^H = \mathbf{I}.$$

Většina známých aplikací analýzy vlastních čísel vyžaduje, aby matice či operátory byly normální, nebo se k tomu alespoň blížily. Pojem normálnosti matice zavedeme ještě dalším způsobem. K tomu budeme potřebovat Schurův rozklad a definici čísla podmíněnosti. Podobně jako v (2.3) máme:

**Definice 2.13.** Necht'  $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{N \times N}$ , potom  $\mathbf{A}$  lze zapsat jako

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{T}\mathbf{U}^{-1}, \quad (2.5)$$

kde  $\mathbf{U}$  je unitární (tedy  $\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^H$ ) a  $\mathbf{T}$  horní trojúhelníková matice. Tento rozklad nazýváme Schurův.

Matice  $\mathbf{T}$  je podobná  $\mathbf{A}$ , má tudíž stejnou množinu vlastních čísel. Protože je navíc trojúhelníková, vlastní čísla leží na diagonále  $\mathbf{T}$ .

Je-li  $\mathbf{A}$  navíc normální (tedy např. hermitovská či reálná symetrická), potom existuje unitární matice  $\mathbf{V}$  taková, že

$$\mathbf{A} = \mathbf{V}\mathbf{T}\mathbf{V}^H \quad (2.6)$$

a platí:

- $\mathbf{T}$  je diagonální. Jelikož  $\mathbf{T}\mathbf{T}^H = \mathbf{T}^H\mathbf{T}$ , obsahuje pouze vlastní čísla.
- Pro  $\mathbf{A}$  existuje množina všech vlastních vektorů  $\mathbf{v}_j$ , které jsou ortonormální, tj.  $\|\mathbf{v}_j\| = 1$ , vektory  $\mathbf{v}_j$  tvoří sloupce matice  $\mathbf{V}$ .
- $\|\mathbf{V}\|_2 = \|\mathbf{V}^{-1}\|_2 = \|\mathbf{V}^H\|_2 = 1$ .

**Definice 2.14.** Číslem podmíněnosti matice  $\mathbf{A}$  rozumíme číslo

$$\kappa(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\| \|\mathbf{A}^{-1}\|. \quad (2.7)$$

Platí, že  $\kappa(\mathbf{A}) \geq 1$  pro libovolnou matici  $\mathbf{A}$  a maticovou normu. Čím je  $\kappa(\mathbf{A})$  větší, tím je matice hůře podmíněná, což znamená, že i relativně malé změny v koeficientech způsobí relativně velké změny řešení.

Existuje-li matice  $\mathbf{V}$  z (2.6), matice  $\mathbf{A}$  je normální, pokud:

$$\kappa(\mathbf{V}) = \|\mathbf{V}\| \|\mathbf{V}^{-1}\| = 1.$$

Naopak,

$$\kappa(\mathbf{V}) = \|\mathbf{V}\| \|\mathbf{V}^{-1}\| \gg 1 \quad (2.8)$$

znamená, že matice  $\mathbf{A}$  není normální, navíc pokud vlastní vektory matice  $\mathbf{A}$  existují, nejsou ani zdaleka ortogonální. Budeme požadovat, aby podmínka (2.8) byla splněna pro libovolnou matici vlastních vektorů  $\mathbf{V}$ . Pro tyto matice může klasická analýza vlastních čísel selhat.

## 2.3 Tři základní definice pseudospektra

Nyní zavedeme pojem pseudospektra konečně-dimenzionální matice.

Nechť  $\|\cdot\|$  značí normu na  $\mathbb{C}^N$ , prostoru komplexních vektorů délky  $N$ , a také indukovanou normu na  $\mathbb{C}^{N \times N}$ , prostoru komplexních matic typu  $N \times N$ . Nechť  $\mathbf{A}$  je matice  $\mathbb{C}^{N \times N}$  nebo lineární operátor na konečně-dimenzionálním

prostoru.

V aplikované matematice nás často zajímá, zda je matice singulární či regulární. Již pro malou perturbaci se odpověď může rychle změnit, proto je vhodnější zjišťovat, zda je  $\|\mathbf{A}^{-1}\|$  velká. Podobně, místo toho, jestli je  $z$  vlastní číslo matice  $\mathbf{A}$ , tzn. je-li  $(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$  singulární, je lepší se ptát, zda je  $\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\|$  velká. To nás vede k první definici pseudospektra:

**Definice 2.15.** *Nechť  $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{N \times N}$  a  $\varepsilon > 0$  libovolné. Pak  $\varepsilon$ -pseudospektrum  $\sigma_\varepsilon(\mathbf{A})$  matice  $\mathbf{A}$  je množina  $z \in \mathbb{C}$  takových, že*

$$\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| > \varepsilon^{-1}. \quad (2.9)$$

Pro  $z \in \sigma(\mathbf{A})$  zavedeme, že  $\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| = \infty$ .

Pro normu resolventy platí, že

$$\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| = \|(z\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1}\|_2, \quad (2.10)$$

kde  $\mathbf{B}$  je dáno rovností (2.4).

I zde budeme požadovat, aby rovnost (2.10) platila pro  $\forall z \in \mathbb{C}$  včetně bodů spektra  $\sigma(\mathbf{A}) = \sigma(\mathbf{B})$ , ve kterých nabývá hodnotu  $\infty$ .

Platí, že spektrum je obsaženo v  $\varepsilon$ -pseudospektru pro každé  $\varepsilon > 0$ .

Pseudospektrum je tedy otevřená podmnožina komplexní roviny ohraničená křivkou funkce  $\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| = \varepsilon^{-1}$ . Jinými slovy, na normu resolventy se lze dívat jako na funkci dvou proměnných  $z$  a  $\mathbf{A}$ , která je konstantní, rovná  $\varepsilon^{-1}$ .

Na základě této definice vidíme, že pojem pseudospektra má smysl především pro nenormální matice, pro které norma  $\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\|$  může být velká, i když je bod  $z$  daleko od spektra. Tedy má smysl pro matice, které splňují podmínku (2.8).

Druhá definice pseudospektra souvisí s perturbacemi původní matice  $\mathbf{A}$ :

**Definice 2.16.**  $\sigma_\varepsilon(\mathbf{A})$  je množina  $z \in \mathbb{C}$  takových, že

$$z \in \sigma(\mathbf{A} + \mathbf{E})$$

pro  $\mathbf{E} \in \mathbb{C}^{N \times N}$ ,  $\|\mathbf{E}\| < \varepsilon$ .

Jinými slovy,  $\varepsilon$ -psudospektrum je množina vlastních čísel perturbované matice  $(\mathbf{A} + \mathbf{E})$ ,  $\|\mathbf{E}\| < \varepsilon$ .

Je vidět, že pseudospektra s různými  $\varepsilon$  jsou vnořené množiny,

$$\sigma_{\varepsilon_1}(\mathbf{A}) \subseteq \sigma_{\varepsilon_2}(\mathbf{A}), \quad 0 < \varepsilon_1 \leq \varepsilon_2,$$

a dále, že průnik všech pseudospekter je spektrum,

$$\bigcap_{\varepsilon > 0} \sigma_\varepsilon(\mathbf{A}) = \sigma(\mathbf{A}).$$

Třetí charakterizace pseudospektra je následující:

**Definice 2.17.**  $\sigma_\varepsilon(\mathbf{A})$  je množina  $z \in \mathbb{C}$  takových, že

$$\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{v}\| < \varepsilon \tag{2.11}$$

pro  $\mathbf{v} \in \mathbb{C}^N$ ,  $\|\mathbf{v}\| = 1$ .

Číslo  $z$  v (2.11) (a ekvivalentně dalších definicích) se nazývá  $\varepsilon$ -pseudovlastní číslo  $\mathbf{A}$  a  $\mathbf{v}$  je odpovídající  $\varepsilon$ -pseudovlastní vektor. Tedy,  $\varepsilon$ -pseudospektrum je množina  $\varepsilon$ -pseudovlastních čísel.

**Věta 2.18.** Pro libovolnou matici  $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{N \times N}$  jsou výše uvedené definice  $\varepsilon$ -pseudospektra ekvivalentní.

## 2.4 SVD rozklad, čtvrtá definice

Dříve, než uvedeme čtvrtou definici pseudospektra, se budeme zabývat SVD rozkladem, který využijeme i v dalších kapitolách.

**Věta 2.19.** *Mějme matici  $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{M \times N}$ . Pak existuje rozklad  $\mathbf{A}$  takový, že*

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^H,$$

*kde  $\mathbf{U} \in \mathbb{C}^{M \times M}$  je unitární,  $\mathbf{\Sigma} \in \mathbb{C}^{M \times N}$  je diagonální s nezápornými reálnými čísly na diagonále a  $\mathbf{V}^H$  je hermitovsky sdružená matice k  $\mathbf{V} \in \mathbb{C}^{N \times N}$ , která je unitární. Tento rozklad se nazývá SVD rozklad  $\mathbf{A}$ .*

Je zvykem, že prvky  $\Sigma_{i,i}$  přerovnáme tak, aby tvořily nerostoucí řadu, tzn. aby byly na diagonále seřazeny od největšího k nejmenšímu. V tom případě je diagonální matice  $\mathbf{\Sigma}$  určena maticí  $\mathbf{A}$  jednoznačně. Diagonální prvky  $\mathbf{\Sigma}$  se nazývají singulární čísla  $\mathbf{A}$ . Sloupce matice  $\mathbf{U}$ , resp.  $\mathbf{V}$  jsou levé, resp. pravé singulární vektory odpovídající příslušným singulárním číslům.

Speciální případ rozkladu jsme odvodili v (2.6). Singulárními čísly jsou zde absolutní hodnoty vlastních čísel.

Pokud  $\|\cdot\| = \|\cdot\|_2$ , normou matice je největší singulární číslo a normou inverzní matice je obrácená hodnota nejmenšího singulárního čísla. Tedy

$$\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\|_2 = [s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A})]^{-1}, \quad (2.12)$$

kde  $s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$  značí nejmenší singulární číslo  $(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$ . Z toho lze odvodit čtvrtou definici:

**Definice 2.20.** *Je-li  $\|\cdot\| = \|\cdot\|_2$ , pak  $\sigma_\varepsilon(\mathbf{A})$  je množina  $z \in \mathbb{C}$  takových, že*

$$s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A}) < \varepsilon. \quad (2.13)$$

$\sigma_\varepsilon(\mathbf{A})$  jsou množiny v rovině ohraničené křivkou funkce  $s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A}) = \varepsilon$ .

Z (2.12) je zřejmé, že (2.13) je ekvivalentní s (2.9), a tedy i se všemi ostatními definicemi pseudospektra.

Nyní se budeme zabývat nenormálností. Nejprve si všimneme, že pokud  $\mathbf{U}$  je unitární, tzn.  $\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^H$ , pak

$$(z\mathbf{I} - \mathbf{U}\mathbf{A}\mathbf{U}^H)^{-1} = [\mathbf{U}(z\mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{U}^H]^{-1} = \mathbf{U}(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\mathbf{U}^H,$$

proto

$$\|(z\mathbf{I} - \mathbf{U}\mathbf{A}\mathbf{U}^H)^{-1}\|_2 = \|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\|_2, \quad \forall z \in \mathbb{C}.$$

Norma resolventy je tedy invariantní vzhledem k unitárním transformacím. Tyto transformace zachovávají úhly a velikosti vektorů. Odsud máme, že to samé musí být pravda i pro pseudospektrum:

$$\sigma_\varepsilon(\mathbf{A}) = \sigma_\varepsilon(\mathbf{U}\mathbf{A}\mathbf{U}^H), \quad \forall \varepsilon \geq 0.$$

Pro normální matici je  $\varepsilon$ -pseudospektrum sjednocením otevřených  $\varepsilon$ -okolí bodů spektra, ekvivalentně norma resolventy splňuje

$$\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\|_2 = \frac{1}{\text{dist}(z, \sigma(\mathbf{A}))},$$

kde  $\text{dist}(z, \sigma(\mathbf{A}))$  značí vzdálenost bodu od množiny v komplexní rovině.

Otevřené okolí bodu spektra budeme značit  $\Delta_\varepsilon = \{z \in \mathbb{C} : |z| < \varepsilon\}$ .

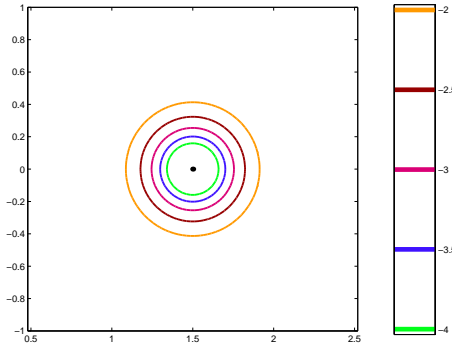
**Věta 2.21.** *Pro libovolnou matici  $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{N \times N}$*

$$\sigma_\varepsilon(\mathbf{A}) \supseteq \sigma(\mathbf{A}) + \Delta_\varepsilon, \quad \forall \varepsilon > 0,$$

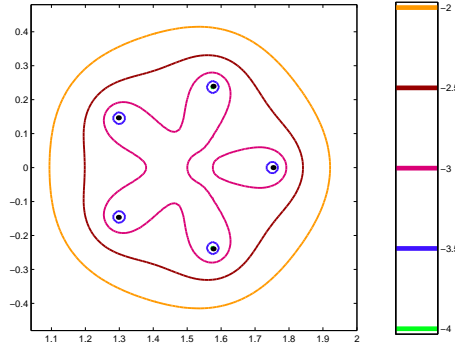
*pokud je navíc  $\mathbf{A}$  normální a  $\|\cdot\| = \|\cdot\|_2$ , pak*

$$\sigma_\varepsilon(\mathbf{A}) = \sigma(\mathbf{A}) + \Delta_\varepsilon, \quad \forall \varepsilon > 0. \quad (2.14)$$

*Obráceně, je-li  $\|\cdot\| = \|\cdot\|_2$ , pak (2.14) implikuje, že  $\mathbf{A}$  je normální.*



Obr. 2.1:  $\sigma_\varepsilon(\mathbf{A})$  normální matice



Obr. 2.2:  $\sigma_\varepsilon(\mathbf{A})$  nenormální matice

Doplňme, že použitý součet má obvyklý význam, tj.

$$\begin{aligned} \sigma(\mathbf{A}) + \Delta_\varepsilon &= \{z : z = z_1 + z_2, z_1 \in \sigma(\mathbf{A}), z_2 \in \Delta_\varepsilon\} = \\ &= \{z : \text{dist}(z, \sigma(\mathbf{A})) < \varepsilon\}. \end{aligned}$$

Předpokládejme nyní, že  $\mathbf{A}$  je diagonalizovatelná. Nechť  $\mathbf{V} \in \mathbb{C}^{N \times N}$  je matice vlastních vektorů  $\mathbf{A}$  stejně jako v (2.3). Pokud  $\|\cdot\| = \|\cdot\|_2$ , pak číslo podmíněnosti matice  $\mathbf{V}$  z (2.7) je

$$\kappa(\mathbf{V}) = \|\mathbf{V}\|_2 \|\mathbf{V}^{-1}\|_2 = \frac{s_{\max}(\mathbf{V})}{s_{\min}(\mathbf{V})},$$

kde  $s_{\max}(\mathbf{V})$  a  $s_{\min}(\mathbf{V})$  jsou po řadě největší a nejmenší singulární číslo matice  $\mathbf{V}$ .

Připomeňme, že  $1 \leq \kappa(\mathbf{V}) < \infty$  a  $\kappa(\mathbf{V}) = 1$  právě tehdy, když  $\mathbf{A}$  je normální.

Číslo podmíněnosti  $\mathbf{V}$  nám dává horní odhad čísel podmíněnosti jednotlivých vlastních čísel matice  $\mathbf{A}$ . Toto tvrzení je známo jako Bauer-Fikeova věta:

**Věta 2.22.** *Nechť  $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{N \times N}$  je diagonalizovatelná,  $\mathbf{A} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^{-1}$ . Potom  $\forall \varepsilon > 0$  a normu  $\|\cdot\| = \|\cdot\|_2$  platí, že*

$$\sigma(\mathbf{A}) + \Delta_\varepsilon \subseteq \sigma_\varepsilon(\mathbf{A}) \subseteq \sigma(\mathbf{A}) + \Delta_{\varepsilon\kappa(\mathbf{V})}.$$



Tedy, pokud je  $\mathbf{A}$  perturbována pomocí  $\mathbf{E}$ , potom se poloha vlastních čísel změní nejvýše o  $\kappa(\mathbf{V}) \|\mathbf{E}\|_2$ .

Kapitolu zakončíme několika základními vlastnostmi pseudospektra.

**Věta 2.23.** *Nechť  $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{N \times N}$  a  $\varepsilon > 0$  je libovolné. Potom*

1.  $\sigma_\varepsilon(\mathbf{A})$  je neprázdná, otevřená a omezená množina s nejvýše  $N$  komponentami, každá obsahuje jedno či více vlastních čísel matice  $\mathbf{A}$ .
2. Je-li  $\|\cdot\| = \|\cdot\|_2$ , pak  $\sigma_\varepsilon(\mathbf{A}^H) = \overline{\sigma_\varepsilon(\mathbf{A})}$ .
3. Je-li  $\|\cdot\| = \|\cdot\|_2$ , pak  $\sigma_\varepsilon(\mathbf{A}_1 \oplus \mathbf{A}_2) = \sigma_\varepsilon(\mathbf{A}_1) \cup \sigma_\varepsilon(\mathbf{A}_2)$ ,  
kde  $\mathbf{A}_1 \oplus \mathbf{A}_2 = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 & 0 \\ 0 & \mathbf{A}_2 \end{pmatrix}$ .
4. Pro libovolné  $c \in \mathbb{C}$  je  $\sigma_\varepsilon(\mathbf{A} + c\mathbf{I}) = c + \sigma_\varepsilon(\mathbf{A})$ .
5. Pro libovolné nenulové  $c \in \mathbb{C}$  je  $\sigma_{|c|\varepsilon}(c\mathbf{A}) = c\sigma_\varepsilon(\mathbf{A})$ .

## Kapitola 3

# Pseudospektrum lineárních operátorů

Teorii o pseudospektru z minulé kapitoly lze zobecnit pro lineární operátory na nekonečně-dimenzionálních prostorech, zaměříme se na Banachovy prostory.

Nechť  $X$  je komplexní Banachův prostor, úplný normovaný lineární prostor na  $\mathbb{C}$  s normou  $\|\cdot\|$ . Budeme uvažovat operátory  $\mathbf{A} : X \rightarrow X$  s definičním oborem  $\mathcal{D}(\mathbf{A}) \subseteq X$ . Dále označíme  $\mathcal{B}(X)$  množinu omezených a  $\mathcal{C}(X)$  množinu uzavřených operátorů na  $X$ . Pro  $\mathbf{A} \in \mathcal{B}(X)$  budeme bez újmy na obecnosti předpokládat, že  $\mathcal{D}(\mathbf{A}) = X$ .

Uzavřenost operátoru  $\mathbf{A}$  znamená, že pokud posloupnost  $\{u_k\}$  z  $\mathcal{D}(\mathbf{A})$  konverguje k limitě  $u \in X$  a pokud  $\{\mathbf{A}u_k\}$  konverguje k limitě  $v \in X$ , potom  $u \in \mathcal{D}(\mathbf{A})$  a  $\mathbf{A}u = v$ .

Neomezený uzavřený operátor již nutně musí mít  $\mathcal{D}(\mathbf{A}) \neq X$ , přestože mnoho takových operátorů je definováno tak, že  $\mathcal{D}(\mathbf{A})$  je hustý v  $X$ , tzn.  $\overline{\mathcal{D}(\mathbf{A})} = X$ .

Dále budeme pracovat pouze s uzavřenými operátory.

Pro  $\mathbf{A} \in \mathcal{C}(X)$  a  $\mathbf{E} \in \mathcal{B}(X)$  platí, že  $\mathbf{A} + \mathbf{E} \in \mathcal{C}(X)$ , definiční obor  $\mathcal{D}(\mathbf{A} + \mathbf{E}) = \mathcal{D}(\mathbf{A})$ .

**Definice 3.1.** *Nechť  $\mathbf{A} \in \mathcal{C}(X)$ . Omezený inverzní operátor  $\mathbf{A}^{-1} \in \mathcal{B}(X)$  je takový operátor, že  $\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1}$  je identita na  $X$  a  $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}$  je identita na  $\mathcal{D}(\mathbf{A})$ .*

Toto je jediný druh inverzního operátoru, který nás bude zajímat, a kdykoliv použijeme výraz jako  $\mathbf{A}^{-1}$  či  $(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}$ , budeme tím myslet omezený inverzní operátor na  $X$ .

**Věta 3.2.** *Nechť pro  $\mathbf{A} \in \mathcal{C}(X)$  existuje omezený inverzní operátor  $\mathbf{A}^{-1}$ . Pak pro libovolný operátor  $\mathbf{E} \in \mathcal{B}(X)$ ,  $\|\mathbf{E}\| < \frac{1}{\|\mathbf{A}\|^{-1}}$  existuje k  $\mathbf{A} + \mathbf{E}$  omezený inverzní operátor  $(\mathbf{A} + \mathbf{E})^{-1}$  splňující*

$$\|(\mathbf{A} + \mathbf{E})^{-1}\| \leq \frac{\|\mathbf{A}^{-1}\|}{1 - \|\mathbf{E}\| \|\mathbf{A}^{-1}\|}.$$

*Naopak, pro libovolné  $\mu > \frac{1}{\|\mathbf{A}^{-1}\|}$  existuje  $\mathbf{E} \in \mathcal{B}(X)$ ,  $\|\mathbf{E}\| < \mu$  tak, že  $(\mathbf{A} + \mathbf{E})u = 0$  pro nějaké nenulové  $u \in X$ .*

Nyní aplikujeme předchozí větu na operátor  $(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$ , kde  $z$  je komplexní konstanta.

Nechť je dán operátor  $\mathbf{A} \in \mathcal{C}(X)$  a  $z \in \mathbb{C}$ , resolventou  $\mathbf{A}$  v  $z$  rozumíme, pokud existuje, operátor  $(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1} \in \mathcal{B}(X)$ . Resolventní množina  $\rho(\mathbf{A})$  je množina čísel  $z \in \mathbb{C}$ , pro která  $(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}$  existuje. Z uvedené věty dále plyne, že  $\rho(\mathbf{A})$  je otevřená. Navíc,  $(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}$  je analytická funkce proměnné  $z \in \rho(\mathbf{A})$ .

Spektrum  $\mathbf{A} \in \mathcal{C}(X)$  je doplňkem resolventní množiny v komplexní rovině, tzn.  $\sigma(\mathbf{A}) = \mathbb{C} \setminus \rho(\mathbf{A})$ . Jelikož  $\rho(\mathbf{A})$  je otevřená,  $\sigma(\mathbf{A})$  je uzavřená. Pro  $\mathbf{A} \in \mathcal{B}(X)$  je  $\sigma(\mathbf{A})$  omezená a neprázdná množina. Pro  $\mathbf{A} \in \mathcal{C}(X)$  může být  $\sigma(\mathbf{A})$  neomezená nebo prázdná.

Pokud  $\mathbf{A}u = \lambda u$  pro nějaké nenulové  $u \in X$  a  $\mathbf{A} \in \mathcal{C}(X)$ , pak  $u$  a  $\lambda$  se nazývají vlastní vektor a vlastní číslo  $\mathbf{A}$ . Spektrum  $\sigma(\mathbf{A})$  obsahuje všechna vlastní čísla  $\mathbf{A}$ , ale může být i větší.

Z věty také vyplývá, že pro libovolné  $\mathbf{A} \in \mathcal{C}(X)$  a  $z \in \rho(\mathbf{A})$  platí

$$\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| \geq \frac{1}{\text{dist}(z, \sigma(\mathbf{A}))}.$$

Odsud dostáváme, že čím více se  $z$  blíží ke spektru, tím větší je  $\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\|$ , tzn. tím více se blíží k  $\infty$ . Proto opět  $\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\|$  definujeme jako  $\infty$  pro  $z \in \sigma(\mathbf{A})$ .

**Věta 3.3.** *Nechť  $\mathbf{A} \in \mathcal{C}(X)$ . Norma resolventy  $\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\|$  je funkce ze  $z \in \mathbb{C}$  do  $(0, \infty]$  s následujícími vlastnostmi:*

- *Je spojitá a neomezená a nabývá hodnotu  $\infty$  na  $\sigma(\mathbf{A})$ .*
- *Pokud  $z \notin \sigma(\mathbf{A})$ , pak také  $z \notin \sigma(\mathbf{A} + \mathbf{E})$  pro libovolný operátor  $\mathbf{E} \in \mathcal{B}(X)$ , který splňuje  $\|\mathbf{E}\| \leq \frac{1}{\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\|}$ .  
Naopak, pro libovolné  $\mu > \frac{1}{\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\|}$  existuje operátor  $\mathbf{E} \in \mathcal{B}(X)$ ,  $\|\mathbf{E}\| < \mu$  takový, že  $(\mathbf{A} + \mathbf{E})u = zu$  pro nějaké nenulové  $u \in X$ .*

Na základě poslední uvedené věty tedy víme, že každé  $z$ , které neleží v  $\sigma(\mathbf{A})$ , také není obsaženo v  $\sigma(\mathbf{A} + \mathbf{E})$  pro dostatečně malou  $\|\mathbf{E}\|$ .

Dříve jsme zavedli tři ekvivalentní definice  $\varepsilon$ -pseudospektra matice  $\mathbf{A}$ . Nyní je aplikujeme na lineární operátory na Banachově prostoru.

**Věta 3.4.** *Nechť  $\mathbf{A} \in \mathcal{C}(X)$  a  $\varepsilon > 0$  je libovolné. Pseudospektrum  $\sigma_\varepsilon(\mathbf{A})$  operátoru  $\mathbf{A}$  je množina  $z \in \mathbb{C}$  definovaná jednou z následujících ekvivalentních podmínek:*

- $\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| > \varepsilon^{-1}$ ,
- $z \in \sigma(\mathbf{A} + \mathbf{E})$  pro nějaký operátor  $\mathbf{E} \in \mathcal{B}(X)$  s  $\|\mathbf{E}\| < \varepsilon$ ,
- $z \in \sigma(\mathbf{A})$  nebo  $\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})u\| < \varepsilon$  pro nějaké  $u \in \mathcal{D}(\mathbf{A})$  s  $\|u\| = 1$ .

*Pokud  $\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})u\| < \varepsilon$ , potom  $z$  je  $\varepsilon$ -pseudovlastní číslo  $\mathbf{A}$  a  $u$  je odpovídající  $\varepsilon$ -pseudovlastní vektor.*

**Věta 3.5.** *Nechť  $\mathbf{A} \in \mathcal{C}(X)$ , pseudospektrum  $\{\sigma_\varepsilon(\mathbf{A})\}_{\varepsilon > 0}$  má následující vlastnosti:*

- *Lze ho definovat pomocí jedné z podmínek uvedené v předchozí větě. Definice jsou ekvivalentní.*

- Každé  $\sigma_\varepsilon(\mathbf{A})$  je neprázdná otevřená podmnožina  $\mathbb{C}$  a každá omezená souvislá komponenta  $\sigma_\varepsilon(\mathbf{A})$  má neprázdný průnik s  $\sigma(\mathbf{A})$ .
- Dále platí

$$\bigcap_{\varepsilon>0} \sigma_\varepsilon(\mathbf{A}) = \sigma(\mathbf{A})$$

a naopak, pro libovolné  $\delta > 0$

$$\sigma_{\varepsilon+\delta}(\mathbf{A}) \supseteq \sigma_\varepsilon(\mathbf{A}) + \Delta_\delta,$$

kde  $\Delta_\delta$  je otevřené okolí o poloměru  $\delta$ .

### 3.1 Změna norem v Banachových prostorech

Pro malé plné matice jsou všechny normy ekvivalentní, proto se dvě různé normy resolventy liší nejvýše o konstantu. Pokud přejdeme od jedné normy k druhé, v mnoha případech se pseudospektrum příliš nezmění. Ovšem bylo by chybou předpokládat, že rozdíl mezi  $\|\cdot\|_2$  a  $\|\cdot\|_1$ , nebo obecněji, mezi Hilbertovými a Banachovými prostory, je vždy malý. Pokud uvažujeme nekonečně-dimenzionální operátory nebo jejich maticové diskretizace, rozdíly mezi p-normami mohou být libovolně velké!

# Kapitola 4

## Výpočet pseudospektra

V této kapitole popíšeme jednotlivé způsoby výpočtu pseudospektra. Jelikož se jedná o množiny v komplexní rovině, výpočtem budeme rozumět zobrazení hranice  $\sigma_\varepsilon(\mathbf{A})$  pro různá  $\varepsilon$ .

Nejprve se budeme zabývat hledáním vlastních čísel plných matic. Na matice s nižší dimenzí (menší než cca 1000) lze aplikovat standardní přímé metody příbuzné QR algoritmu, pro získání výsledku je potřeba  $\mathcal{O}(N^3)$  operací. Matice s větší dimenzí vyžadují speciální zacházení, je možné využít metody Krylovových podprostorů - nenaleznou se všechna vlastní čísla, ale pouze ta, která se zdají být v komplexní rovině podstatná.

### 4.1 „Mřížková“ metoda

Všechny algoritmy vycházejí z definice pseudospektra. Připomeňme, že

$$\sigma_\varepsilon(\mathbf{A}) = \{z \in \mathbb{C} : \|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| > \varepsilon^{-1}\},$$

pro  $\|\cdot\| = \|\cdot\|_2$

$$\sigma_\varepsilon(\mathbf{A}) = \{z \in \mathbb{C} : s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A}) < \varepsilon\}. \quad (4.1)$$

První výpočetní metoda se ihned nabízí. Vytvoříme síť v komplexní rovině a v každém bodě  $z$  této sítě vypočteme SVD rozklad matice  $(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$ . Získáme tak množinu jejích singulárních čísel, z ní vybereme to nejmenší.

Splňuje-li nerovnost (4.1), je součástí pseudospektra. Z obdržených dat poté vykreslíme obrys pseudospektra. Je-li  $\mathbf{A}$  hermitovská, obrázek bude symetrický dle reálné osy, výpočetní čas se o polovinu zkrátí.

Je zřejmé, že popsaný algoritmus není ani zdaleka optimální. SVD rozklad matice typu  $N \times N$  provedený v každém bodě mřížky  $\nu \times \nu$  vyžaduje  $\mathcal{O}(\nu^2 N^3)$  operací. Jistého urychlení můžeme dosáhnout tím, že vezmeme hrubší mřížku, nicméně ve většině případů nedostaneme uspokojivý výsledek. Proto se pokusíme nalézt metody jiné.

#### 4.1.1 Iterační metody pro výpočet $s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$

Náročnost SVD rozkladu je způsobena tím, že při něm dochází k výpočtu všech singulárních čísel  $(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$ . Proto budeme hledat pouze nejmenší singulární číslo pomocí nějaké iterační metody. Postupy jsou založeny na faktu, že

$$\begin{aligned} s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A}) &= \sqrt{\text{nejmenší vlastní číslo } (z\mathbf{I} - \mathbf{A})^H(z\mathbf{I} - \mathbf{A})} = \\ &= \text{nejmenší kladné vlastní číslo } \begin{pmatrix} \mathbf{0} & z\mathbf{I} - \mathbf{A} \\ \bar{z}\mathbf{I} - \mathbf{A}^H & \mathbf{0} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Výpočet se pokusíme urychlit pomocí metody inverzních iterací. Označme  $\mathbf{B} = (z\mathbf{I} - \mathbf{A})$  a připomeňme, že nejmenší vlastní číslo  $\mathbf{B}^H\mathbf{B}$  odpovídá největšímu vlastnímu číslu  $\mathbf{B}^{-1}\mathbf{B}^{-H}$ , tzn. inverzi.

Hledáme-li tedy nejmenší vlastní číslo  $\mathbf{B}^H\mathbf{B}$ , stačí na inverzi celého výrazu aplikovat mocninnou metodu. Ta používá násobení  $\mathbf{B}^{-1}$  a  $\mathbf{B}^{-H}$ , to lze zrealizovat pomocí LU rozkladu matice  $\mathbf{B}$ . Výpočet tohoto rozkladu v jednom bodě mřížky ovšem vyžaduje  $\mathcal{O}(N^3)$  operací, čímž dostáváme stejnou složitost jako u úplného SVD rozkladu. Proto později provedeme další úpravy, nejdříve se krátce zmíníme o mocninné metodě a LU rozkladu.

#### Mocninná metoda

Tato metoda nám umožňuje jednoduše vypočítat jedno vlastní číslo  $\lambda$ , nejčastěji to největší, a jemu odpovídající vlastní vektor  $\mathbf{v}$ .

**Věta 4.1.** *Nechť  $\mathbf{A}$  je matice typu  $N \times N$ , která má  $N$  různých vlastních čísel  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$ , která jsou seřazena sestupně podle velikosti v absolutní hodnotě, tzn.  $|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \dots \geq |\lambda_N|$ . Pokud je počáteční vektor  $\mathbf{x}_0$  vhodně zvolen, potom posloupnosti  $\{\mathbf{x}_k\} = \left\{ \left( x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_N^{(k)} \right) \right\}$  a  $\{c_k\}$  počítané rekurzivně tak, že*

$$\mathbf{y}_k = \mathbf{A}\mathbf{x}_k,$$

$$\mathbf{x}_{k+1} = \frac{1}{c_{k+1}}\mathbf{y}_k,$$

kde  $c_{k+1} = \max_{1 \leq i \leq N} \left\{ \left| x_i^{(k)} \right| \right\}$ , konvergují k vlastnímu vektoru  $\mathbf{v}_1$  a vlastnímu číslu  $\lambda_1$ , tj.

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{x}_k = \mathbf{v}_1,$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} c_k = \lambda_1$$

a platí  $\mathbf{A}\mathbf{v}_1 = \lambda\mathbf{v}_1$ .

## LU rozklad

**Definice 4.2.** *Matice  $\mathbf{A}$  se nazývá silně regulární, jestliže všechny její hlavní minory, tj. determinanty matic  $\mathbf{A}_k$ ,  $k = 1, \dots, N$ , jsou nenulové, kde*

$$\mathbf{A}_k = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k1} & \cdots & a_{kk} \end{pmatrix}$$

**Věta 4.3.** *Nechť  $\mathbf{A}$  je silně regulární reálná matice typu  $N \times N$ . Pak existuje právě jedna dolní trojúhelníková matice  $\mathbf{L}$  s jedničkami na diagonále a horní trojúhelníková matice  $\mathbf{U}$  tak, že  $\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U}$ . Přitom platí, že*

$$u_{kk} = \frac{\det \mathbf{A}_k}{\det \mathbf{A}_{k-1}}, \quad k = 2, \dots, N.$$



Předpokládejme, že před výpočtem singulárních čísel provedeme Schurův rozklad (viz (2.5)), čímž nahradíme matici  $\mathbf{A}$  unitárně ekvivalentní horní trojúhelníkovou maticí  $\mathbf{T}$ . Potom je matice  $(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$  unitárně ekvivalentní k horní trojúhelníkové matici  $(z\mathbf{I} - \mathbf{T})$  pro libovolné  $z$ , obě matice mají stejná singulární čísla a  $\sigma_\varepsilon(\mathbf{T}) = \sigma_\varepsilon(\mathbf{A})$ . Jelikož je v každém bodě  $z$  matice  $(z\mathbf{I} - \mathbf{T})$  trojúhelníková, není potřeba provádět LU rozklad, a tudíž na výpočet jejího nejmenšího singulárního čísla stačí pouze  $\mathcal{O}(N^2)$  operací. Schurův rozklad je proveden pouze jednou, předtím, než začneme zpracovávat jednotlivé body mřížky, což vyžaduje  $\mathcal{O}(N^3)$  operací. Jelikož tato metoda konverguje obvykle v několika málo krocích, dostáváme celkovou složitost  $\mathcal{O}(N^3 + \nu^2 N^2)$ . V mnoha aplikacích je možné dosáhnout dokonce až  $\mathcal{O}(\nu^2 N^2)$ .

Je velmi pravděpodobné, že se konvergence zpomalí, pokud největší vlastní číslo  $(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-H}$  není dostatečně odděleno od ostatních. Tehdy je vhodné použít některou z více důmyslných metod, např. Lanczosovu. Ta aproximuje nejmenší singulární číslo  $(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$  tak, že využívá lineární kombinace výsledků jednotlivých kroků získaných pomocí metody inverzních iterací.

**Poznámka 4.4.** *Počítáme-li  $s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$  iteračně, může se stát, že již během výpočtu zjistíme, že bod  $z$  nemůže být v pseudospektru. Je-li např.  $s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A}) > 1$ , my chceme vykreslit křivky, které používají  $10^{-1}$ , je samozřejmě vhodné s iteracemi předčasně skončit.*

### 4.1.2 Projekce do podprostorů s nižší dimenzí

Dalším, naprosto odlišným způsobem, jak zrychlit výpočet, je redukovat dimenzi  $N$  matice  $\mathbf{A}$ . Provedeme ortogonální projekci  $\mathbf{A}$  na odpovídající invariantní podprostor dimenze  $M < N$ . Jedná se o jednoduchou, ale důležitou techniku, která je často opomíjena, přitom lze dosáhnout výrazného zrychlení.

**Definice 4.5.** *Nechť  $T : V \rightarrow V$  lineární zobrazení vektorového prostoru  $V$ . Potom  $W$  je invariantním podprostorem  $V$ , pokud  $T(W)$  je obsaženo ve  $W$ . Říkáme, že  $W$  je  $T$ -invariantní.*

Je-li  $\mathbf{v}$  vlastní vektor  $T$ , tj.  $T\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$ , pak  $W = \text{span}\{\mathbf{v}\}$  je  $T$ -invariantní.

### Metoda založená na diagonalizaci matice

Nechť  $\mathbf{V}$  je matice typu  $N \times M$  taková, že jejími sloupci jsou zvolené lineárně nezávislé vlastní vektory  $\mathbf{A}$  a která splňuje  $\mathbf{AV} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}$ , kde  $\mathbf{\Lambda}$  je diagonální matice typu  $M \times M$  obsahující odpovídající vlastní čísla, viz. (2.2).

**Definice 4.6.** *Nechť  $\mathbf{A}$  je komplexní matice typu  $N \times M$ ,  $N \geq M$ . QR rozkladem matice  $\mathbf{A}$  rozumíme součin  $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$ , kde  $\mathbf{Q}$  je unitární matice typu  $N \times N$  a  $\mathbf{R}$  je horní trojúhelníková matice typu  $N \times M$ .*

**Poznámka 4.7.** *Jelikož dolních  $N - M$  řádků matice  $\mathbf{R}$  obsahuje nuly, je často užitečné použít rozdělení  $\mathbf{R}$ , popř. i  $\mathbf{Q}$ :*

$$\mathbf{A} = \mathbf{QR} = \mathbf{Q} \begin{pmatrix} \mathbf{R}_1 \\ 0 \end{pmatrix} = (\mathbf{Q}_1 \mid \mathbf{Q}_2) \begin{pmatrix} \mathbf{R}_1 \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbf{Q}_1 \mathbf{R}_1,$$

kde  $\mathbf{R}_1$  je horní trojúhelníková matice typu  $M \times M$ ,  $\mathbf{Q}_1$  je typu  $N \times M$ ,  $\mathbf{Q}_2$  typu  $N \times (N - M)$ , přičemž  $\mathbf{Q}_1$  i  $\mathbf{Q}_2$  mají ortogonální sloupce.

Pokud  $\mathbf{V} = \mathbf{QR}$ , tedy provedeme QR-rozklad matice  $\mathbf{V}$ , kde  $\mathbf{Q}$  je typu  $N \times M$  a  $\mathbf{R}$  je typu  $M \times M$ , dostáváme  $\mathbf{Q}^H \mathbf{V} = \mathbf{R}$  a  $\mathbf{Q} = \mathbf{VR}^{-1}$ . Odsud

$$\mathbf{Q}^H \mathbf{BQ} = \mathbf{Q}^H \mathbf{BVR}^{-1} = \mathbf{Q}^H \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}\mathbf{R}^{-1} = \mathbf{R}\mathbf{\Lambda}\mathbf{R}^{-1}.$$

$\mathbf{T} = \mathbf{R}\mathbf{\Lambda}\mathbf{R}^{-1}$  je typu  $M \times M$ , horní trojúhelníková, jedná se o maticovou reprezentaci projekce  $\mathbf{A}$  na podprostor generovaný zvolenými vlastními vektory.

Matice  $\mathbf{A}$  bývá v aplikacích nediagonalizovatelná, z čehož plyne špatná podmíněnost úloh souvisejících s vlastními čísly. Sice se v praxi ukazuje, že využití diagonalizace často nezpůsobuje mnoho potíží, nicméně, už jen z principu bychom se jí měli vyhýbat.

## Metoda založená na částečném Schurově rozkladu

Předpokládejme unitární transformaci ve tvaru

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q} \begin{bmatrix} \mathbf{T} & \mathbf{X} \\ \mathbf{0} & \mathbf{Y} \end{bmatrix} \mathbf{Q}^H, \quad (4.2)$$

kde  $\mathbf{Q} \in \mathbb{C}^{N \times N}$  je unitární matice,  $\mathbf{T} \in \mathbb{C}^{M \times M}$  je horní trojúhelníková matice,  $\mathbf{X} \in \mathbb{C}^{M \times (N-M)}$  a  $\mathbf{Y} \in \mathbb{C}^{(N-M) \times (N-M)}$  jsou libovolné.

Je-li  $\mathbf{Q}_1 \in \mathbb{C}^{N \times M}$  matice složená z prvních  $M$  sloupců  $\mathbf{Q}$ , potom z (4.2) plyne  $\mathbf{B}\mathbf{Q}_1 = \mathbf{Q}_1\mathbf{T}$ . Tedy pokud  $\mathbf{T}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$ , pak  $\mathbf{B}(\mathbf{Q}_1\mathbf{x}) = \lambda(\mathbf{Q}_1\mathbf{x})$ . Na diagonále matice  $\mathbf{T}$  se nachází  $M$  vlastních čísel matice  $\mathbf{B}$  a  $\mathbf{T}$  reprezentuje projekci  $\mathbf{A}$  na odpovídající invariantní podprostor.

Dodejme, že transformace (4.2) se nazývá částečný Schurův rozklad.

Jelikož jsou  $\mathbf{X}$  a  $\mathbf{Y}$  libovolné, zbývá vyřešit, jak nalézt matici  $\mathbf{Q}_1 \in \mathbb{C}^{N \times M}$ , která má ortonormální sloupcové vektory takové, že  $\mathbf{T} = \mathbf{Q}_1^H \mathbf{B} \mathbf{Q}_1$  je horní trojúhelníková matice. To lze provést mnoha způsoby, my budeme uvažovat ten nejjednodušší - výpočet kompletního Schurova rozkladu, viz (2.5). Poté přerovnáme diagonální prvky tak, abychom ty důležité přesunuli do horního levého rohu.

Ortogonalní projekce nezvyšují normu resolventy v žádném z bodů  $z$ . Je-li  $\sigma_\varepsilon(\mathbf{T})$  pseudospektrum promítnuté matice, potom  $\sigma_\varepsilon(\mathbf{T}) \subseteq \sigma_\varepsilon(\mathbf{A})$ , přičemž pseudospektrum  $\mathbf{T}$  se monotónně zvětšuje a přibližuje k pseudospektru  $\mathbf{A}$  v závislosti na tom, jak postupně zvětšujeme podprostor.

### 4.1.3 Volba mřížky

Zbývá položit si otázku, jak určit mřížku, na které se bude pseudospektrum  $\sigma_\varepsilon(\mathbf{A})$  počítat. Obecně je doporučováno odvodit hranice mřížky z vlastních čísel obdržených ze Schurova rozkladu.

Pokud před začátkem samotného výpočtu známe největší hodnotu  $\varepsilon$ , která nás bude zajímat, existují metody, jak vyloučit nezajímavé body z výpočetní oblasti. Pro malé matice schopnost upravit  $\varepsilon$  po výpočtu většinou převáží

výhody spojené s těmito metodami. Nicméně pro velmi velké matice, kde je každý výpočet singulárních čísel drahý, bývají daleko důležitější.

## 4.2 Kontinuační techniky

Jednou z motivací pro použití iteračních metod je aplikace kontinuačních technik, tj. přímého sledování hraniční křivky, kde využíváme singulární vektor vypočítaný v jednom z bodů jako počáteční vektor pro bod sousední.

Tato technika má dvě potenciální výhody. Za prvé lze hraniční křivku určit s velkou přesností, pokud je to požadováno. Za druhé je vysoce pravděpodobné, že se sníží množství výpočtů  $s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$ , jelikož zde nevyužíváme žádnou mřížku. Naopak problémy mohou nastat v oblastech mezi dvěma vlastními čísly. Dále je nutné vyřešit, jak pracovat s místy, kde hranice není hladká, či s pseudospektrém, pokud je složeno z více komponent. Proto je vhodné tuto techniku používat především v případě, kdy se potřebujeme soustředit na určitou část hranice. Například ji lze využít v programu, kde uživatel klikne myší na bod v komplexní rovině a počítač vykreslí okraj pseudospektra procházející tímto bodem, popř. také numericky vypočítá horní a dolní meze založené na křivce. Takto lze získat kvalitní informace a graficky pěkné obrázky.

**Věta 4.8.** *Nechť bod  $z_0 \in \partial\sigma_\varepsilon$  a  $s_{\min}$  je jednoduché singulární číslo matice  $(z_0\mathbf{I} - \mathbf{A})$ . Pak hranice  $\partial\sigma_\varepsilon$  je na okolí  $z_0$  reálnou analytickou křivkou. Nechť dále  $\mathbf{u}_{\min}$  a  $\mathbf{v}_{\min}$  jsou levý a pravý singulární vektor příslušné k  $s_{\min}$ . Pak výraz*

$$i \frac{\mathbf{v}_{\min}^H \mathbf{u}_{\min}}{|\mathbf{v}_{\min}^H \mathbf{u}_{\min}|}$$

*definuje pozitivně orientovaný tečný směr v  $z_0$ .*

**Definice 4.9.** *Nechť  $z \in \mathbb{C}$ . Pak  $(s_{\min}, \mathbf{u}_{\min}, \mathbf{v}_{\min})$  nazveme minimální singulární trojici matice  $(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$ , pokud  $s_{\min}$  je nejmenší singulární číslo  $(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$  a  $\mathbf{u}_{\min}, \mathbf{v}_{\min} \in \mathbb{C}^N$  jsou po řadě odpovídající levý a pravý singulární vektor.*

V dalším textu bude  $\mathcal{R}$ , resp.  $\mathcal{I}$  značit zobrazení, které prvkům (číslicím, vektorům, maticím) přiřazuje jejich reálnou, resp. imaginární část. Tato zobrazení nám pomohou zformulovat podmínky na přeskálování.

Nyní popíšeme algoritmus, pomocí něhož lze za předpokladů předchozí věty prodloužit souvislou část hranice  $\sigma_\varepsilon(\mathbf{A})$ , vycházíme-li z bodu  $z_0$ . Nechť  $z_0 \in \partial\sigma_\varepsilon$  a nechť je dána pevná velikost kroku  $\tau$ . Generujeme posloupnost bodů  $\{z_k\} \in \mathbb{C}$ ,  $z_{k-1} \mapsto z_k$ :

Jako první krok vypočteme  $(s, \mathbf{u}, \mathbf{v})$ , tzn. minimální singulární trojici matice  $(z_0\mathbf{I} - \mathbf{A})$ . Jelikož se jedná o metodu prediktor-korektor, odhadneme polohu bodu  $\hat{z}_k = z_{k-1} + \tau i \frac{\mathbf{v}^H \mathbf{u}}{|\mathbf{v}^H \mathbf{u}|}$ . Nyní znovu spočteme  $(s, \mathbf{u}, \mathbf{v})$ , tentokrát pro matici  $(\hat{z}_k\mathbf{I} - \mathbf{A})$ . Následně upravíme polohu bodu  $z_k = \hat{z}_k - \frac{(s-\varepsilon)}{\mathbf{u}^H \mathbf{v}}$ . Tím jsme získali nový bod křivky. Celý postup (kromě prvního kroku) opakujeme pro další body tak dlouho, dokud není hranice vykreslena celá.

Je uváděno, že pouze jeden opravný krok stačí, aby byla zaručena malá relativní chyba  $\frac{s-\varepsilon}{\varepsilon}$ .

### Kontinuační myšlenka

Uvažujme singulární trojici  $(s, \mathbf{u}, \mathbf{v})$  libovolné matice  $\mathbf{B} \in \mathbb{C}^{N \times N}$ ,  $s \in \mathbb{R}$ ,  $s \geq 0$ ,  $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{C}^N$  tak, že:

$$\mathbf{B}\mathbf{v} = s\mathbf{u}, \quad \mathbf{B}^H\mathbf{u} = s\mathbf{v}, \quad (4.3)$$

$$\mathbf{v}^H\mathbf{v} = 1, \quad \mathbf{u}^H\mathbf{u} = 1. \quad (4.4)$$

Jedná se o základní podmínky vycházející z definice singulárních vektorů a odpovídajícího singulárního čísla.

Všimneme si, že platí

$$s\mathbf{u}^H\mathbf{u} = \mathbf{u}^H\mathbf{B}\mathbf{v} = (\mathbf{u}^H\mathbf{B}\mathbf{v})^H = \mathbf{v}^H\mathbf{B}^H\mathbf{u} = s\mathbf{v}^H\mathbf{v}.$$

Je-li  $s > 0$ , potom

$$\mathbf{u}^H\mathbf{u} = \mathbf{v}^H\mathbf{v}. \quad (4.5)$$

Dále vidíme, že

$$\mathcal{I}(\mathbf{v}^H \mathbf{v}) = \mathcal{I}(\mathbf{u}^H \mathbf{u}) = 0.$$

Odsud, v případě, že  $s > 0$ , lze škálovací podmínky (4.4) přepsat jako

$$\mathcal{R}(\mathbf{v}^H \mathbf{v}) = 1. \quad (4.6)$$

Jelikož platí (4.5), podmínku (4.6) zřejmě můžeme nahradit  $\mathcal{R}(\mathbf{u}^H \mathbf{u}) = 1$ , popř.  $\mathcal{R}(\mathbf{v}^H \mathbf{v}) + \mathcal{R}(\mathbf{u}^H \mathbf{u}) = 2$ .

Co se týče jednoznačnosti, platí, že je-li  $(s, \mathbf{u}, \mathbf{v})$  singulární trojice matice  $\mathbf{B}$ , potom  $(s, -\mathbf{u}, -\mathbf{v})$  je také singulární trojice matice  $\mathbf{B}$ .

**Poznámka 4.10.** Je-li  $s > 0$  jednoduché singulární číslo matice  $\mathbf{B}$ , potom  $(s, \mathbf{u}, \mathbf{v})$  a  $(s, -\mathbf{u}, -\mathbf{v})$  jsou jedinými řešeními (4.3) a (4.6).

Dále budeme uvažovat  $\mathbf{B} = (z\mathbf{I} - \mathbf{A})$ ,  $z = x + iy$ . Položme  $s = \varepsilon$ ,  $\varepsilon > 0$  je pevný parametr. Naším cílem nyní bude přepsat podmínky (4.3) a (4.6) pro levý a pravý singulární vektor  $\mathbf{u}$  a  $\mathbf{v}$ , které přísluší k singulárnímu číslu  $\varepsilon$ ,  $\mathbf{u} = \mathcal{R}(\mathbf{u}) + i\mathcal{I}(\mathbf{u})$  a  $\mathbf{v} = \mathcal{R}(\mathbf{v}) + i\mathcal{I}(\mathbf{v})$ ,  $\mathbf{u}$  i  $\mathbf{v}$  závisejí na  $z = x + iy$ .

To nás vede k definování

$$f : \mathbb{R}^{2+4N} \rightarrow \mathbb{R}^{1+4N}, \quad (4.7)$$

$$\xi \in \mathbb{R}^1 \times \mathbb{R}^1 \times \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N \mapsto f(\xi) \in \mathbb{R}^{2N} \times \mathbb{R}^{2N} \times \mathbb{R}^1.$$

$$\xi = (x, y, \mathcal{R}(\mathbf{u}), \mathcal{I}(\mathbf{u}), \mathcal{R}(\mathbf{v}), \mathcal{I}(\mathbf{v})),$$

$$f(\xi) = (\psi_1, \psi_2, \psi_3),$$

kde

$$\psi_1 = -\varepsilon \begin{pmatrix} \mathcal{R}(\mathbf{u}) \\ \mathcal{I}(\mathbf{u}) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} x\mathbf{I} - \mathcal{R}(\mathbf{A}) & -y\mathbf{I} + \mathcal{I}(\mathbf{A}) \\ y\mathbf{I} - \mathcal{I}(\mathbf{A}) & x\mathbf{I} - \mathcal{R}(\mathbf{A}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{R}(\mathbf{v}) \\ \mathcal{I}(\mathbf{v}) \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

$$\psi_2 = -\varepsilon \begin{pmatrix} \mathcal{R}(\mathbf{v}) \\ \mathcal{I}(\mathbf{v}) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} x\mathbf{I} - \mathcal{R}(\mathbf{A}^T) & y\mathbf{I} - \mathcal{I}(\mathbf{A}^T) \\ -y\mathbf{I} - \mathcal{I}(\mathbf{A}^T) & x\mathbf{I} - \mathcal{R}(\mathbf{A}^T) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{R}(\mathbf{u}) \\ \mathcal{I}(\mathbf{u}) \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

$$\psi_3 = (\mathcal{R}(\mathbf{v}))^T \mathcal{R}(\mathbf{v}) + (\mathcal{I}(\mathbf{v}))^T \mathcal{I}(\mathbf{v}) - 1. \quad (4.10)$$

Obecněji, rovnice

$$f(\xi) = f(x, y, \mathcal{R}(\mathbf{u}), \mathcal{I}(\mathbf{u}), \mathcal{R}(\mathbf{v}), \mathcal{I}(\mathbf{v})) = 0 \quad (4.11)$$

definuje křivku v  $\mathbb{R}^{2+4N}$ .

Je možné zavést křivku pro libovolné  $k$ -té singulární číslo,  $1 \leq k \leq N$ . Je-li  $k = 1$ , pracujeme s tím největším, naopak  $k = N$  vede na nejmenší singulární číslo. Nás tedy zajímá poslední zmíněný případ  $k = N$ , jelikož dostáváme spojitou část hranice pseudospektra, tj.  $\partial\sigma_\varepsilon$ .

Nechť  $z \in \partial\sigma_\varepsilon$  splňuje předpoklady věty. Pak  $z$  souvisí s kořenem  $f(\xi) = 0$ , kde  $\xi = (x, y, \mathcal{R}(\mathbf{u}), \mathcal{I}(\mathbf{u}), \mathcal{R}(\mathbf{v}), \mathcal{I}(\mathbf{v}))$ ,  $z = x + iy$ ,  $\varepsilon = s_{\min}((x + iy)\mathbf{I} - \mathbf{A})$ ,  $\mathbf{u}_{\min} = \mathcal{R}(\mathbf{u}) + i\mathcal{I}(\mathbf{u})$ ,  $\mathbf{v}_{\min} = \mathcal{R}(\mathbf{v}) + i\mathcal{I}(\mathbf{v})$ . Odsud máme, že kořen  $\xi$  souvisí s minimální singulární trojicí  $(\varepsilon, \mathbf{u}_{\min}, \mathbf{v}_{\min})$ .

Z poznámky víme, že pro minimální singulární trojici  $(\varepsilon, -\mathbf{u}_{\min}, -\mathbf{v}_{\min})$  máme druhé řešení. Dostáváme  $f(x, y, -\mathcal{R}(\mathbf{u}), -\mathcal{I}(\mathbf{u}), -\mathcal{R}(\mathbf{v}), -\mathcal{I}(\mathbf{v})) = 0$ . Tento jev souvisí s orientací křivky:

**Definice 4.11.** *Nechť  $Df(\xi) \in \mathbb{R}^{(1+4N) \times (2+4N)}$  je diferenciál funkce  $f$  v  $\xi$ . Řekneme, že  $\delta\xi \in \mathbb{R}^{2+4N}$  je směrnice, platí-li, že*

$$Df(\xi)\delta\xi = 0, \quad \delta\xi^T \delta\xi = 1. \quad (4.12)$$

**Definice 4.12.** *Nechť  $\delta\xi$  splňuje (4.12) a  $(\delta x, \delta y) \in \mathbb{R}^2$  značí první dvě složky  $\delta\xi \in \mathbb{R}^{2+4N}$ . Řekneme, že směrnice je pozitivně orientovaná, pokud*

$$\det \begin{pmatrix} \delta x & \delta y \\ \mathcal{R}(\mathbf{v}_{\min}^H \mathbf{u}_{\min}) & \mathcal{I}(\mathbf{v}_{\min}^H \mathbf{u}_{\min}) \end{pmatrix} > 0. \quad (4.13)$$

To je ve shodě s orientací  $\partial\sigma_\varepsilon$  v  $z = x + iy$ : Nechť  $\delta z = \delta x + i\delta y$ . Pak

$$\frac{\delta z}{|\delta z|} = i \frac{\mathbf{v}_{\min}^H \mathbf{u}_{\min}}{|\mathbf{v}_{\min}^H \mathbf{u}_{\min}|}.$$

Abychom mohli algoritmus inicializovat, potřebujeme znát výchozí bod. Proto musíme vyřešit následující úlohu: Necht' je dáno  $\varepsilon > 0$ , najděte bod  $z_0 = x_0 + iy_0$ ,  $z_0 \in \partial\sigma_\varepsilon$ .

Uvažujme  $(x_t, y_t) \in \mathbb{R}^2$ ,  $z_t = x_t + iy_t \in \mathbb{C}$  inicializační odhad bodu na  $\partial\sigma_\varepsilon$ . Vypočteme minimální singulární trojici  $(s_{\min}, \mathbf{u}_{\min}, \mathbf{v}_{\min})$  matice  $z_t \mathbf{I} - \mathbf{A}$ . Položme  $\xi_t = (x_t, y_t, \mathcal{R}(\mathbf{u}_{\min}), \mathcal{I}(\mathbf{u}_{\min}), \mathcal{R}(\mathbf{v}_{\min}), \mathcal{I}(\mathbf{v}_{\min})) \in \mathbb{R}^{2+4N}$ . Obecně,  $s_{\min} > 0$ . Definujme  $f$  jako v (4.7), kde v (4.8) - (4.10) položíme  $\varepsilon = s_{\min}$ . Potom  $f(\xi_t) = 0$ . Zkonstruujeme pozitivně orientovanou směrnicí  $\delta\xi_t$  v  $\xi_t$  jako v (4.12) a (4.13).

Uvažujme  $f$  definovanou jako v (4.7) - (4.10), kde  $\varepsilon > 0$  je dáno. Iterace

$$\xi \rightarrow \xi - \begin{pmatrix} Df(\xi) \\ \delta\xi^T \end{pmatrix} f(\xi)$$

začínající v  $\xi_t$  lokálně konvergují do bodu  $\xi_0 \in \mathbf{R}^{2+4N}$ ,  $f(\xi_0) = 0$ . Necht'  $(x_0, y_0) \in \mathbf{R}^2$  značí první dvě složky  $\xi_0$  a necht'  $z_0 = x_0 + iy_0$ . Pak  $z_0 \in \partial\sigma_\varepsilon$ . Tedy, získali jsme výchozí bod hranice  $\partial\sigma_\varepsilon$ .

### 4.3 „Chudé“ pseudospektrum

V této části zmíníme algoritmus, který vychází z definice pseudospektra využívající perturbace matice:

$$\sigma_\varepsilon(\mathbf{A}) = \bigcup_{\|\mathbf{E}\| < \varepsilon} \sigma(\mathbf{A} + \mathbf{E}).$$

Postup je následující: Budeme volit libovolné matice  $\mathbf{E}$  s  $\|\mathbf{E}\| = \varepsilon$  a vykreslovat přes sebe spektra  $\sigma(\mathbf{A} + \mathbf{E})$  vypočítaná pomocí standardních algoritmů pro vlastní čísla plných matic. Výsledkem je „chudé“ pseudospektrum, množina vlastních čísel obklopující spektrum, jejíž hustota závisí na počtu použitých perturbací a jejich pravděpodobnostním rozdělení.

Lze ukázat, že libovolný bod pseudospektra lze dostat i v případě, že  $\mathbf{E}$  bude mít hodnotu 1. Je-li  $\mathbf{E}$  vygenerována jako plně-dimenzionální matice, potom



znormování (tedy  $\|\mathbf{E}\| < \varepsilon$ ) vyžaduje  $\mathcal{O}(N^3)$  operací, zatímco na konstrukci a znormování matice s hodnotí 1 stačí  $\mathcal{O}(N^2)$  operací. Pochopitelně matice s hodnotí 1 budou mít odlišné statistické vlastnosti než matice s nezávislými náhodnými prvky.

Pokud nás zajímá  $\varepsilon$ -pseudospektrum pro další hodnoty  $\varepsilon$ , celý postup je nutné zopakovat. Obrázky získané z perturbací mají intuitivní charakter a poskytují nám pouze dolní odhady na  $\sigma_\varepsilon(\mathbf{A})$ , které navíc nemusejí být dostatečně ostré. Sice lze získat levnou aproximaci, ale vzhledem k rozvoji rychlých výpočtů  $\sigma_\varepsilon(\mathbf{A})$  na mřížce zájem o tuto techniku klesá.

## 4.4 Metody Krylovových podprostorů

Doposud jsme se zabývali metodami, které spadají do oblasti práce s plnými maticemi, kde je všech  $N^2$  prvků matice zpracováváno přímo a základní maticové výpočty vyžadují  $\mathcal{O}(N^3)$  operací. Pro matice s vysokým řádem (tisíc a víc) lze využít vhodné metody spojené s Krylovými podprostory.

K problematice lze přistupovat dvěma způsoby. Za prvé lze pseudospektrum matice nebo operátoru aproximovat pomocí posloupnosti Krylovových podprostorů. Víme, že existují procesy blízké metodám, které byly popsány v části o projekcích do podprostorů nižšího řádu. Místo počítání vlastních čísel v těchto podprostorech můžeme hledat rovnou pseudospektrum. Za druhé lze Krylovovy metody použít bodově k urychlení výpočtu normy resolventy pro jednotlivé hodnoty  $z$ .

Zabývejme se nejdříve první z možností, popíšeme nejjednodušší způsob. Začneme od libovolného počátečního vektoru a použijeme Arnoldiho metodu obvyklým způsobem, čímž získáme posloupnost vektorů Hessenbergovy matice, která je unitárně ekvivalentní k matici  $\mathbf{A}$ . Poté postupně vypočteme pseudospektrum částí této Hessenbergovy matice a tyto vezmeme jako aproximace pseudospektra  $\mathbf{A}$ . Je vhodné brát spíše obdélníkové části s dimenzí ve tvaru  $(N+1) \times N$  než čtvercové. Pseudospektrum obdélníkové matice  $\mathbf{A}$  lze definovat pomocí (2.13). Nicméně kvůli přímému využití Arnoldiho metody (její nároky rostou se zvyšujícím se počtem iterací) obdržené výsledky nebývají uspokojivé a často je potřeba použít metodu jinou.

Připomeňme, že Hessenbergovou maticí rozumíme „téměř“ trojúhelníkovou maticí, přesněji, horní Hessenbergova matice má nulové prvky pod první subdiagonálou, dolní Hessenbergova matice naopak nad první superdiagonálou.

V druhém z případů, tzn. pokud metody Krylovových podprostorů aplikujeme na jednotlivé body  $z \in \mathbb{C}$  či na lokální oblasti, máme potenciál pro rychlou konvergenci v libovolné přesnosti. Pro problémy vysokých dimenzí se jedná o nejefektivnější metody.

### Poznámky k metodám Krylovových podprostorů

Tyto metody jsou poměrně nové, řeší velké řídké systémy  $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ . Vycházejí z metody konjugovaných gradientů, za všechny jmenujme především GMRES. Tyto metody většinou konvergují rychle, ale analýza je složitá. Jejich chování závisí na vlastních číslech, ale také na dalších vlastnostech matic spojených především s nenormálností. Pomocí Krylovových iterací lze získat aproximace řešení ve tvaru  $\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_0 + \mathbf{q}_k$ , kde  $\mathbf{x}_0$  je počáteční odhad a  $\mathbf{q}_k$  bereme z Krylovova podprostoru

$$\mathcal{K}_k(\mathbf{A}, \mathbf{r}_0) = \text{span} \{ \mathbf{r}_0, \mathbf{A}\mathbf{r}_0, \dots, \mathbf{A}^{k-1}\mathbf{r}_0 \}.$$

Vektor  $\mathbf{r}_0$  značí počáteční reziduum,  $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$ . Konstrukce a analýza takových metod úzce souvisí s polynomiální strukturou Krylovových podprostorů. Libovolný vektor v  $\mathcal{K}_k(\mathbf{A}, \mathbf{r}_0)$  lze zapsat jako polynom v  $\mathbf{A}$  krát  $\mathbf{r}_0$ , a tedy  $\mathbf{q}_k = q_k(\mathbf{A})\mathbf{r}_0$  pro nějaké  $q_k \in \mathcal{P}_{k-1}$ , kde  $\mathcal{P}_{k-1}$  značí množinu polynomů stupně  $k - 1$  nebo menšího.

Jádrem GMRES metody je Arnoldiho proces, mechanismus vytvoření ortonormální báze pro Krylovův podprostor. První vektor báze je  $\mathbf{u}_1 = \mathbf{r}_0 / \|\mathbf{r}_0\|$  a  $k$ -tá iterace Arnoldiho procesu stanovuje vektor  $\mathbf{u}_{k+1}$  tak, že

$$\text{span} \{ \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_{k+1} \} = \mathcal{K}_{k+1}(\mathbf{A}, \mathbf{r}_0).$$

Nový bazový vektor je vypočítán aplikováním kroku Gram-Schmidtova algoritmu tak, aby byl vektor  $\mathbf{A}\mathbf{u}_k \in \mathcal{K}_{k+1}(\mathbf{A}, \mathbf{r}_0)$  kolmý k bazovým vektorům  $\mathcal{K}_k(\mathbf{A}, \mathbf{r}_0)$ :

$$\mathbf{u}_{k+1} = \mathbf{A}\mathbf{u}_k - \sum_{j=1}^k (\mathbf{A}\mathbf{u}_k, \mathbf{u}_j)\mathbf{u}_j.$$

# Kapitola 5

## Chování pseudospektra

Nyní se pokusíme popsat dva hlavní důvody, proč má smysl pseudospektrum počítat.

Za prvé lze získat představu o tom, jak se systém chová, např. je možné vyšetřovat stabilitu a rezonanci pro různé fyzikální a numerické procesy a rychlost konvergence iterací. Jevy týkající se chování jsou typicky vyjádřeny pomocí norem funkcí matic či operátorů  $\|\mathbf{A}^k\|$ ,  $\|e^{t\mathbf{A}}\|$  či  $\|p(\mathbf{A})\|$ , kde  $p$  je polynomiální či racionální funkce. Je-li  $\mathbf{A}$  neomezený operátor, s pojmem  $e^{t\mathbf{A}}$  lze pracovat pomocí různých metod používaných v teorii semigrup.

Za druhé pseudospektrum může pomoci při řešení problémů souvisejících s diagonalizací, především u vysoce nenormálních matic, kde většinou dostaneme přesnější výsledky než při práci s vlastními čísly. Díky pseudospektru sice obecně nemůžeme získat exaktní informace týkající se norem funkcí matic či operátorů, nicméně většinou nám poskytne daleko ostřejší odhady, než pokud bychom pracovali pouze s vlastními čísly. Všeobecně vzato lze získat odhady  $\|f(\mathbf{A})\|$  pro libovolnou funkci  $f$ .

Na nenormální matice a operátory lze pohlížet z mnoha stran, zaměříme se na přechody v dynamických systémech závislých na čase, kde jsou vlastní čísla zavádějící. Omezíme se na situaci, kdy máme lineární dynamický systém definovaný pomocí pevné matice či operátoru. Budou nás zajímat případy, ve kterých se chování systému při přechodu odlišuje od chování ve velkých časech z důvodu nenormálnosti.

Pokud vlastní čísla selhávají v zachycení přechodů, můžeme pomocí pseudo-spektra získat lepší výsledek? Ukazuje se, že většinou ano. Přestože pseudo-spektrum nám jen zřídka dává přesnou informaci, zachytí a vypočte přechody, které vlastní čísla nezjistí.

Ve většině následujících odhadů budeme používat tyto pojmy:

**Definice 5.1.**

- $W(\mathbf{A}) = \left\{ \frac{\mathbf{x}^H \mathbf{A} \mathbf{x}}{\mathbf{x}^H \mathbf{x}} : \mathbf{x} \in \mathbb{C}^N, \mathbf{x} \neq 0 \right\}$  ... *numerický rozsah  $\mathbf{A}$ , tzn. rozsah Rayleighových koeficientů;*
- $\alpha(\mathbf{A}) = \sup_{z \in \sigma(\mathbf{A})} \operatorname{Re} z$  ... *spektrální abscisa  $\mathbf{A}$ ;*
- $\alpha_\varepsilon(\mathbf{A}) = \sup_{z \in \sigma_\varepsilon(\mathbf{A})} \operatorname{Re} z$  ...  *$\varepsilon$ -pseudospektrální abscisa  $\mathbf{A}$ ;*
- $\omega(\mathbf{A}) = \sup_{z \in W(\mathbf{A})} \operatorname{Re} z$  ... *numerická abscisa  $\mathbf{A}$ ;*
- $\rho(\mathbf{A}) = \sup_{z \in \sigma(\mathbf{A})} |z|$  ... *spektrální poloměr  $\mathbf{A}$ ;*
- $\rho_\varepsilon(\mathbf{A}) = \sup_{z \in \sigma_\varepsilon(\mathbf{A})} |z|$  ...  *$\varepsilon$ -pseudospektrální poloměr  $\mathbf{A}$ ;*
- $\mu(\mathbf{A}) = \sup_{z \in W(\mathbf{A})} |z|$  ... *numerický poloměr  $\mathbf{A}$ ;*

Všechna čísla souvisí s pseudospektrém  $\mathbf{A}$ .

## 5.1 Dynamické systémy se spojitým časem

Mějme matici nebo lineární operátor  $\mathbf{A}$  a rovnici závislou na čase:

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{A}\mathbf{u}.$$

Budeme vyšetřovat růst a pokles řešení  $\mathbf{u}(t) = e^{t\mathbf{A}}\mathbf{u}(0)$ , tzn. velikost  $\|e^{t\mathbf{A}}\|$  jakožto funkce proměnné  $t$ .

Máme tedy  $\mathbf{A}$  - matici či hustě definovaný uzavřený lineární operátor na Banachově prostoru s normou  $\|\cdot\|$ . Nejdříve musíme upřesnit význam  $e^{t\mathbf{A}}$ . Je-li  $\mathbf{A}$  matice či omezený operátor,  $e^{t\mathbf{A}}$  lze definovat jako konvergentní mocninnou řadu. Pro neomezený operátor  $\mathbf{A} \in \mathcal{C}(X)$  s definičním oborem  $\mathcal{D}(\mathbf{A})$  význam  $e^{t\mathbf{A}}$  vychází z teorie semigrup.

Semigrupa  $C_0$  je třída omezených operátorů  $\{\mathbf{T}(t)\}_{0 \leq t < \infty}$  s vlastnostmi takovými, že  $\mathbf{T}(0)$  je identita,  $\mathbf{T}(t+s) = \mathbf{T}(t)\mathbf{T}(s)$  pro  $s, t \geq 0$  a  $\mathbf{T}(t)u$  je spojitá funkce proměnné  $t$  pro každé  $u \in X$ . Infinitesimalní generátor semigrupy je operátor  $\mathbf{A}$  definovaný podmínkou

$$\mathbf{A}u = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\mathbf{T}(t)u - u}{t}$$

s definičním oborem  $\mathcal{D}(\mathbf{A})$  takovým, že uvažujeme množinu všech vektorů  $u \in X$ , pro které limita existuje.  $\mathbf{A}$  je hustě definovaný uzavřený operátor a určuje semigrupu jednoznačně. Tedy, kdykoliv použijeme  $e^{t\mathbf{A}}$  a  $\mathbf{A}$  bude neomezený operátor, jedná se o zkratku pro semigrupu  $C_0$  generovanou  $\mathbf{A}$ .

Víme, že pokud  $\mathbf{A}$  je matice či uzavřený lineární operátor generující semigrupu  $C_0$ , pak existují konstanty  $\omega \in \mathbb{R}$  a  $M \geq 1$  tak, že

$$\|e^{t\mathbf{A}}\| \leq Me^{\omega t}, \quad \forall t \geq 0.$$

Dále uveďme, že libovolné  $z \in \mathbb{C}$  s  $\operatorname{Re} z > \omega$  leží v resolventní množině  $\mathbf{A}$  a platí

$$(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1} = \int_0^{\infty} e^{-zt} e^{t\mathbf{A}} dt.$$

Vraťme se nyní k úvodnímu příkladu. Pro  $t \rightarrow \infty$  lze očekávat, že vlastní čísla, obecněji spektrum, budou směrodatná, asymptotickou rychlost růstu  $\|e^{t\mathbf{A}}\|$  lze získat pomocí spektrální abscisy  $\mathbf{A}$ . Rovnice

$$\lim_{t \rightarrow \infty} t^{-1} \log \|e^{t\mathbf{A}}\| = \alpha(\mathbf{A}) \tag{5.1}$$

platí pro libovolnou matici či omezený operátor  $\mathbf{A}$  v Banachově prostoru. Problémy mohou nastat v případě neomezených operátorů, kde levá strana rovnosti (5.1) může být větší než pravá. V Hilbertových prostorech stačí nahradit  $\alpha(\mathbf{A})$  limitou  $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \alpha_\varepsilon(\mathbf{A})$ .

Nyní rozebereme případ  $t \rightarrow 0$ . Pokud  $\mathbf{A}$  je matice či lineární operátor takový, že generuje semigrupu  $C_0$  v Banachově prostoru, existuje dostatečně přesný a jednoduchý výsledek. Počáteční růst  $\|e^{t\mathbf{A}}\|$  je roven

$$\frac{d}{dt} \|e^{t\mathbf{A}}\| \Big|_{t=0} = \lim_{t \rightarrow 0} t^{-1} \log \|e^{t\mathbf{A}}\| = \omega(\mathbf{A}). \quad (5.2)$$

Tedy chování v případě, že  $t \rightarrow 0$ , je určeno numerickou abscisou  $\omega(\mathbf{A})$ .

Nejvíce nás budou konečné nenulové hodnoty  $t$  (tedy ne okrajové  $t \rightarrow \infty$  a  $t \rightarrow 0$ ). Pro ně lze odvodit mnoho různých odhadů. Samotná vlastní čísla dávají dolní odhad platný pro matice či lineární operátory v libovolné normě:

$$\|e^{t\mathbf{A}}\| \geq e^{t\alpha(\mathbf{A})}, \quad \forall t \geq 0. \quad (5.3)$$

Sdružený dolní odhad vychází z numerické abscisy  $\omega(\mathbf{A})$ ,

$$\|e^{t\mathbf{A}}\| \leq e^{t\omega(\mathbf{A})}, \quad \forall t \geq 0. \quad (5.4)$$

Dále platí, že

$$\|e^{t\mathbf{A}}\| = e^{t\omega(\mathbf{A})} + o(t), \quad \text{pokud } t \rightarrow 0. \quad (5.5)$$

Obecně dostáváme, že  $\|e^{t\mathbf{A}}\| \leq 1, \forall t \geq 0$  právě tehdy, když  $\omega(\mathbf{A}) \leq 0$ .

Rovnost (5.5) ukazuje, že numerický rozsah nám může poskytnout přesnou informaci o chování matice. Nicméně díky němu nezískáme odpověď na otázku, zda existuje konstanta  $C$  taková, že  $\|e^{t\mathbf{A}}\| \leq C, \forall t \geq 0$ , tj. je-li  $\mathbf{A}$  stabilní. Postačující podmínkou je sice  $\omega(\mathbf{A}) \leq 0$ , nicméně více nejsme schopni říci.

Pro získání přesnějších informací využijeme normu resolventy, tj. pseudospektrum. Necht'  $\mathbf{A}$  je matice či uzavřený lineární operátor generující semigrupu  $C_0$ . Je-li  $\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| = \frac{K}{\operatorname{Re} z}$  pro nějaké  $z$  s  $\operatorname{Re} z > 0$  a  $K > 1$ ,

potom

$$\sup_{t \geq 0} \|e^{t\mathbf{A}}\| \geq K.$$

$\varepsilon$ -pseudospektrální abscisa  $\alpha_\varepsilon(\mathbf{A})$  je konečná pro každé  $\varepsilon > 0$ .

Vezmeme-li v komplexní rovině hodnotu  $z$  nejvíce vpravo a stejně jako dříve  $\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| = \frac{K}{\operatorname{Re} z}$ , máme

$$\sup_{t \geq 0} \|e^{t\mathbf{A}}\| \geq \frac{\alpha_\varepsilon(\mathbf{A})}{\varepsilon}, \quad \forall \varepsilon > 0. \quad (5.6)$$

Tento dolní odhad je v praxi velmi užitečný. Ukazuje, že pokud pseudospektrum matice s  $\alpha(\mathbf{A}) \leq 0$  významně zasahuje do pravé části roviny ve smyslu  $\alpha_\varepsilon(\mathbf{A}) > \varepsilon$  pro nějaké  $\varepsilon$ , musí zde být nárůstová část přechodu.

Nyní definujeme Kreissovou konstantu pro  $\mathbf{A}$  ve vztahu k levé části roviny (namísto otevřeného jednotkového okolí):

**Definice 5.2.**  $\mathcal{K}(\mathbf{A}) \equiv \sup_{\varepsilon > 0} \frac{\alpha_\varepsilon(\mathbf{A})}{\varepsilon} = \sup_{\operatorname{Re} z > 0} (\operatorname{Re} z) \|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\|$

Pokud vezmeme v (5.6) maximum přes všechna  $\varepsilon$ , dostaneme

$$\sup_{t \geq 0} \|e^{t\mathbf{A}}\| \geq \mathcal{K}(\mathbf{A}). \quad (5.7)$$

Chceme-li odvodit horní odhady na  $\|e^{t\mathbf{A}}\|$  je přirozené začít tím, že definujeme  $e^{t\mathbf{A}}$  jako Cauchyho integrál resolventy. Jelikož stejnou techniku budeme používat pro odhady norem dalších funkcí operátorů, provedeme to pro obecnou funkci  $f$ , která je analytická na okolí spektra  $\sigma(\mathbf{A})$ . Nejdříve připomeňme Cauchyho integrální formuli:

**Věta 5.3.** *Nechť  $U$  je otevřená podmnožina komplexní roviny  $\mathbb{C}$ ,  $f : U \rightarrow \mathbb{C}$  je holomorfní funkce a uzavřená množina  $D = \{z : |z - z_0| \leq r\}$  je obsažena v  $U$ . Nechť  $\gamma$  je kružnice tvořící hranici  $D$ . Pak pro každé  $z_0$  uvnitř  $D$  platí:*

$$f(z_0) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} \frac{f(z)}{z - z_0} dz. \quad (5.8)$$

Nechť  $\mathbf{A}$  je matice či omezený operátor a nechť  $\Gamma$  značí kladně orientovanou uzavřenou křivku či sjednocení křivek ohraničující  $\sigma(\mathbf{A})$ , které jsou navíc obsaženy v oblasti analyticity  $f$ . Potom  $f(\mathbf{A})$  lze zavést analogicky jako v (5.8):

$$f(\mathbf{A}) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} (z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1} f(z) dz.$$

Pro  $e^{t\mathbf{A}}$  potom dostáváme

$$e^{t\mathbf{A}} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} e^{zt} (z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1} dz.$$

Abychom odhadli  $\|f(\mathbf{A})\|$ , můžeme jednoduše odhadnout normu Cauchyho integrálu integrálem  $|f(z)| \|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\|$ . Pokud  $\Gamma$  ohraničuje  $\sigma_{\varepsilon}(\mathbf{A})$ , norma resolventy je omezena  $\varepsilon^{-1}$ , a tedy

$$\|f(\mathbf{A})\| \leq \frac{L}{2\pi\varepsilon} \max_{z \in \Gamma} |f(z)|,$$

kde  $L$  značí délku křivky  $\Gamma$ .

V případě, že chceme odhadnout  $\|e^{t\mathbf{A}}\|$ , bylo by přirozené integrovat přes křivku  $\operatorname{Re} z = \text{const}$ . Pokud je ovšem nekonečně dlouhá, nelze získat žádný horní odhad z konečné pseudospektrální abscisy  $\alpha_{\varepsilon}(\mathbf{A})$ , nemáme-li k dispozici žádnou další informaci. Na druhou stranu, pokud má  $\sigma_{\varepsilon}(\mathbf{A})$  konečné ohraničení délky  $L_{\varepsilon}$ , platí

$$\|e^{t\mathbf{A}}\| \leq \frac{L_{\varepsilon} e^{t\alpha_{\varepsilon}(\mathbf{A})}}{2\pi\varepsilon}, \quad \forall \varepsilon > 0, \forall t \geq 0.$$

Dostáváme odhad, který lze v mnoha případech ještě zesílit.

Nyní uvedeme Kreissovu větu pro matice a  $e^{t\mathbf{A}}$ :

**Věta 5.4.** *Je-li  $\mathbf{A}$  matice typu  $N \times N$ , potom*

$$\mathcal{K}(\mathbf{A}) \leq \|e^{t\mathbf{A}}\| \leq eN\mathcal{K}(\mathbf{A}), \quad \forall t \leq 0, \quad (5.9)$$

kde  $\mathcal{K}(\mathbf{A})$  je Kreissova konstanta pro  $\mathbf{A}$  ve vztahu k levé části roviny.



Z této nerovnosti plyne, že pro matice nebo třídu matic s pevnou dimenzí se každá růstová část přechodu musí odrazit ve pseudospektru v závislosti na konstantním faktoru  $eN$ . Tento faktor nelze vynechat a je v jistém smyslu přesný. Existují konečně-dimenzionální operátory, pro které  $\|e^{t\mathbf{A}}\|$  může přesáhnout  $\mathcal{K}(\mathbf{A})$  o libovolný faktor.

Z předchozích několika odhadů získáváme odhad časového rozmezí, ve kterém se růstová část přechodu musí projevit. Víme, že pokud má matice či operátor vlastní číslo  $z$  v pravé části roviny, musí existovat exponenciální zvětšení v čase  $1/\operatorname{Re} z$ . To samé platí, pokud  $z$  je  $\varepsilon$ -pseudovlastní číslo pro dostatečně malou hodnotu  $\varepsilon$ .

Nechť máme  $z$  s  $\operatorname{Re} z = a > 0$ , předpokládejme  $\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| = \frac{K}{a}$  pro nějaké  $K > 1$ . Pak pro libovolné  $\tau > 0$ ,

$$\sup_{0 < t \leq \tau} \|e^{t\mathbf{A}}\| \geq \frac{e^{a\tau}}{\left(1 + \frac{e^{a\tau} - 1}{K}\right)}. \quad (5.10)$$

Tato nerovnost vypadá komplikovaně, ale stačí si všimnout, že výraz v závorce je blízký 1, pokud je  $\tau$  dostatečně malé, přesněji  $e^{a\tau} \ll K$ . Odsud máme, že pro libovolné takové  $\tau > 0$  existuje  $t$  v intervalu  $[0, \tau]$ , pro které  $\|e^{t\mathbf{A}}\|$  je přibližně stejně velké jako  $e^{a\tau}$  či větší. Jinými slovy, v tomto čase se  $z$  chová přibližně jako vlastní číslo. Pokud se  $\tau$  blíží k  $\infty$ , pravá strana rovnosti se monotónně zvětšuje, v čase  $\tau = \infty$  dostáváme (5.6).

Odhad má tu nepříjemnou vlastnost, že ho nelze aplikovat v konkrétním čase, ale pouze na supremum přes časový interval  $[0, \tau]$ . Přidáme-li při odvození horní odhad, získáme bodový odhad. Je-li  $\|e^{t\mathbf{A}}\| \leq M$  pro všechna  $t \geq 0$ , pak pro libovolné  $\tau \geq 0$  a  $K$  definované jako dříve, ale nyní s  $a < 0$  a  $\infty < K/M \leq 1$ , pak

$$\|e^{\tau\mathbf{A}}\| \geq e^{a\tau} - \frac{e^{a\tau} - 1}{K/M} = 1 - \frac{(e^{a\tau} - 1)(1 - K/M)}{K/M}. \quad (5.11)$$

Ve speciálním případě  $a = K = 0$ , z (5.11) pomocí l'Hospitalova pravidla dostaneme

$$\|e^{\tau\mathbf{A}}\| \geq 1 - \frac{\tau M}{\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\|}.$$

Nakonec se budeme zabývat speciální třídou operátorů - matici či operátor, který popisuje nilpotentní časově-závislý proces, lze rozpoznat z pseudo-spektra. Připomeňme, že omezený operátor  $\mathbf{A}$  na Hilbertově prostoru je nilpotentní, pokud  $\mathbf{A}^n = 0$  pro nějaké  $n$ .

Nechť  $\mathbf{A}$  je uzavřený lineární operátor generující semigrupu  $C_0$ . Pro libovolné  $\tau > 0$  platí, že

$$e^{\tau\mathbf{A}} = 0 \Leftrightarrow \sigma(\mathbf{A}) = \emptyset \wedge \|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| = O(e^{-\tau\operatorname{Re} z}),$$

kde  $O$  odkazuje na limitu  $\operatorname{Re} z \rightarrow -\infty$ . Odsud vyplývá, že je možné, aby  $e^{\tau\mathbf{A}} = 0$  pouze v případě, že  $\mathbf{A}$  je neomezený operátor, jelikož žádný omezený operátor nemůže mít prázdné spektrum.

### 5.1.1 Aplikace odhadů

V této části na konkrétním příkladu ukážeme praktické použití předchozích odhadů. Mějme matici

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 \\ -0.01 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Pro takto malou matici lze analyzovat chování přesně, ale představme si, že máme k dispozici pouze spektrální a pseudospektrální data a chceme vyšetřit chování  $\|e^{t\mathbf{A}}\|$ .

Vlastními čísly matice jsou 0 a  $\pm i/10$ , tedy spektrální abscisa  $\alpha(\mathbf{A}) = 0$ . Odhad (5.3) nám říká, že  $\|e^{t\mathbf{A}}\|$  je ve všech časech větší než 1, z (5.1) víme, že této hodnoty dosáhne v logaritmickém smyslu, pokud  $t \rightarrow \infty$ .

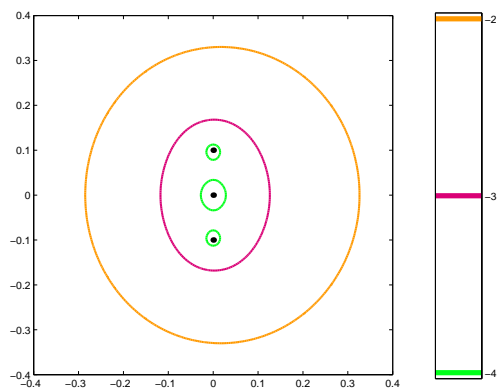
Numerická abscisa  $\omega(\mathbf{A}) = 2.0538$ . Z (5.4) dostáváme, že  $\|e^{t\mathbf{A}}\|$  je všude menší než  $e^{2.0538t}$ , této hodnoty dosáhne, pokud  $t \rightarrow 0$ . To víme z nerovnosti (5.2).

Abychom mohli použít odhad (5.6), musíme nejprve zvolit hodnotu  $\varepsilon$ . Dobrou volbou se zdá být  $\varepsilon = 10^{-4}$ , jelikož hranice pseudospektra pro toto  $\varepsilon$  zasahuje do pravé části roviny do vzdálenosti 0.02831 od imaginární osy. Tedy

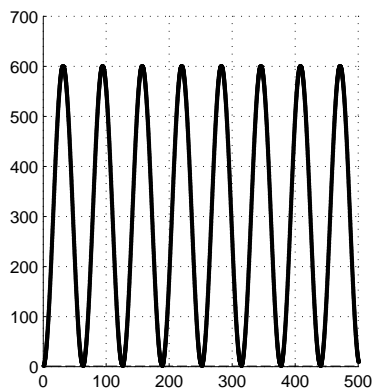
(5.6) implikuje, že  $\|e^{t\mathbf{A}}\| \geq 283$  pro nějaké  $t$ .

Zoptimalizované  $\varepsilon \approx 0.00332$  dává hodnotu konstanty  $\mathcal{K}(\mathbf{A}) \approx 300.3$ , z (5.7) získáme jemnější dolní odhad 300.3 a z (5.9) horní odhad 2449.

Nakonec z (5.10) získáme informace o časových úsecích. Např. pro  $\varepsilon = 10^{-4}$  a  $\alpha_\varepsilon(\mathbf{A}) \approx 0.02831$  dostáváme v  $[0, 100]$  dolní odhad suprema  $\|e^{t\mathbf{A}}\|$  rovný 16.0. V  $[0, 300]$  potom hodnotu 267.



Obr. 5.1:  $\sigma_\varepsilon(\mathbf{A})$



Obr. 5.2: chování  $\|e^{t\mathbf{A}}\|$

## 5.2 Dynamické systémy s diskretním časem

Nyní se budeme zabývat diskretním časem, tedy chováním  $\|\mathbf{A}^k\|$ , kde  $\mathbf{A}$  je matice nebo omezený lineární operátor na Banachově prostoru  $X$  s normou  $\|\cdot\|$ . Stejně jako v předchozí části hledáme dolní a horní odhady pro  $\mathbf{A}^k$  a různé hodnoty  $k$ . Nejdříve ale uvedeme několik základních tvrzení.

Nechť  $\mathbf{A}$  je matice nebo omezený lineární operátor. Pak existuje  $\gamma > 0$  a  $M \geq 1$  tak, že

$$\|\mathbf{A}^k\| \leq M\gamma^k, \quad \forall k \geq 0.$$

Libovolné  $z \in \mathbb{C}$  s  $|z| > \gamma$  leží v resolventní množině  $\mathbf{A}$  a resolventa pro takové  $z$  je dána pomocí konvergentní řady

$$(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1} = z^{-1}(\mathbf{I} + z^{-1}\mathbf{A} + (z^{-1}\mathbf{A})^2 + \dots).$$

Pro libovolné  $k \geq 0$

$$\mathbf{A}^k = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} z^k (z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1} dz,$$

kde  $\Gamma$  je libovolná uzavřená křivka ohraničující  $\sigma(\mathbf{A})$ .

Pro  $k \rightarrow \infty$  je spektrum opět přesvědčivé. Asymptotické tempo růstu  $\|\mathbf{A}^k\|$  je dáno  $\rho(\mathbf{A})$ , spektrálním poloměrem  $\mathbf{A}$ . Rovnost

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|\mathbf{A}^k\|^{1/k} = \rho(\mathbf{A})$$

platí pro libovolnou matici či omezený lineární operátor na Banachově prostoru.

Případ limity  $k \rightarrow 0$  není užitečný:  $\|\mathbf{A}^1\| = \|\mathbf{A}\|$ .

Opět nás budou zajímat konečné nenulové hodnoty  $k$ . Vlastní čísla (obecně spektrum) dávají dolní odhad založený na spektrálním poloměru  $\rho(\mathbf{A})$

$$\|\mathbf{A}^k\| \geq (\rho(\mathbf{A}))^k, \quad \forall k \geq 0,$$

který opět platí v libovolné normě pro matici či omezený lineární operátor.

První horní odhad analogický k (5.4) vypadá následovně:

$$\|\mathbf{A}^k\| \leq \|\mathbf{A}\|^k, \quad \forall k \geq 0.$$

Druhý odhad, který je spojený s numerickým rozsahem, potom:

$$\|\mathbf{A}^k\| \leq e(\nu(\mathbf{A}))^k, \quad \forall k \geq 0. \quad (5.12)$$

Jak vypadá konstanta  $e$ , pohybuje-li se v Hilbertových prostorech? Je-li  $\|\mathbf{A}^k\| \leq 1, \forall k \geq 0$ , potom  $W(\mathbf{A})$ , numerický rozsah  $\mathbf{A}$ , je obsažen v jednotkovém kruhu, a tedy nejlepší odhad, který můžeme dostat, je  $\|\mathbf{A}^k\| \leq 2$ . Do nerovnosti (5.12) lze za konstantu  $e$  dosadit 2.

Pro získání přesnějších informací opět přejdeme k pseudospektru. Necht'  $\mathbf{A}$  je matice či omezený operátor. Je-li  $\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| = \frac{K}{(|z|-1)}$  pro nějaké  $z$ ,  $|z| = r > 1$  a  $K > 1$ , potom

$$\sup_{k \geq 0} \|\mathbf{A}^k\| \geq rK - r + 1 > K.$$

Vezmeme-li  $z$  s největší absolutní hodnotou v komplexní rovině a stejnou hodnotu  $\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| = \frac{K}{(|z|-1)}$ , dostaneme analogický odhad k (5.6)

$$\sup_{k \geq 0} \|\mathbf{A}^k\| \geq (\rho_\varepsilon(\mathbf{A}) - 1) \left( \frac{\rho_\varepsilon(\mathbf{A})}{\varepsilon} - 1 \right) \geq \frac{\rho_\varepsilon(\mathbf{A}) - 1}{\varepsilon}, \quad \forall \varepsilon > 0. \quad (5.13)$$

Tyto odhady ukazují, že pokud pseudospektrum významně vystupuje ven z jednotkového kruhu ve smyslu  $\rho_\varepsilon(\mathbf{A}) > 1 + \varepsilon$  pro nějaké  $\varepsilon$ , musí zde být růstová část přechodu.

Nyní definujeme Kreissovou konstantu s ohledem na jednotkový kruh:

$$\textbf{Definice 5.5. } \mathcal{K}(\mathbf{A}) \equiv \sup_{\varepsilon > 0} \frac{\rho_\varepsilon(\mathbf{A}) - 1}{\varepsilon} = \sup_{|z| > 1} (|z| - 1) \|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\|.$$

Na  $\mathcal{K}(\mathbf{A})$  lze nahlížet tak, že hledáme nejmenší  $C$ , pro které platí

$$\|\mathbf{A}^k\| \leq \frac{C}{|z| - 1}, \quad \forall z, |z| > 1.$$

Tedy  $\mathcal{K}(\mathbf{A})$  je mírou, jak rychle se norma resolventy zvětšuje, když se  $z$  přibližuje k jednotkovému kruhu, ekvivalentně, jak daleko pseudospektrum z jednotkového kruhu vystupuje.

Z (5.13), maximalicí přes všechna  $\varepsilon$ , dostáváme

$$\sup_{k \geq 0} \|\mathbf{A}^k\| \geq \mathcal{K}(\mathbf{A}).$$

Nejjednodušší převrácení těchto výsledků vychází z křivkového integrálu přes kruh s poloměrem  $\rho_\varepsilon(\mathbf{A})$ :

$$\|\mathbf{A}^k\| \leq \frac{(\rho_\varepsilon(\mathbf{A}))^{k+1}}{\varepsilon}, \quad \forall \varepsilon > 0, \forall k \geq 0.$$

Označíme-li  $L_\varepsilon$  délku ohraničení  $\sigma_\varepsilon(\mathbf{A})$  nebo jeho konvexního obalu pro nějaké  $\varepsilon > 0$ , potom

$$\|\mathbf{A}^k\| \leq \frac{L_\varepsilon(\rho_\varepsilon(\mathbf{A}))^k}{2\pi\varepsilon}.$$

Speciální volba poloměru  $1 + \frac{1}{n}$  vede k

$$\|\mathbf{A}^k\| \leq e(k+1)\mathcal{K}(\mathbf{A}), \quad \forall k \geq 0.$$

Dále lze odvodit Kreissovu větu pro matice, tentokrát pro diskrétní čas:

$$\|\mathbf{A}^k\| \leq eN\mathcal{K}(\mathbf{A}), \quad \forall k \geq 0,$$

je-li matice  $\mathbf{A}$  typu  $N \times N$ .

Dalším krokem je rozmyslet si časové rozmezí, ve kterém se růstová část přechodu musí projevit. Má-li matice či operátor vlastní číslo  $z$  venku jednotkového kruhu, musí existovat exponenciální zvětšení v čase  $\frac{1}{(|z|-1)}$ . To samé platí, pokud je  $z$   $\varepsilon$ -pseudovlastní číslo pro dostatečně malé  $\varepsilon$ .

Předpokládejme nyní, že pro nějaké  $z$  s  $|z| = r > 1$ ,  $\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| = \frac{K}{(r-1)}$ ,  $K > 1$ . Pak pro libovolné  $\kappa > 0$

$$\sup_{0 < k \leq \kappa} \|\mathbf{A}^k\| \geq \frac{r^\kappa}{1 + \frac{r^\kappa - 1}{rK - r + 1}}.$$

Výraz ve jmenovateli je blízký 1, pokud  $\kappa$  je dostatečně malé ( $r^\kappa \ll rR$ ). Na základě poslední uvedené nerovnosti tedy můžeme tvrdit, že pro libovolné  $\kappa$  existuje  $k \in \{0, 1, \dots, \kappa\}$ , pro které  $\|\mathbf{A}^k\|$  je zhruba stejné jako  $r^\kappa$  nebo větší. Jinými slovy,  $z$  se v tomto čase chová zhruba stejně jako vlastní číslo. Limita  $\kappa \rightarrow \infty$  dává (5.13).

Pokud je  $\|\mathbf{A}^k\| \leq M$  pro všechna  $k \geq 0$ , potom pro libovolné  $k \geq 0$  a  $K$  definované jako dříve, ale nyní s  $r < 1$  a  $-\infty < K/M \leq 1$  máme analogii k bodovému odhadu (5.11)

$$\|\mathbf{A}^k\| \geq r^k - \frac{r^k - 1}{K/M} = 1 - \frac{(r^k - 1)(1 - K/M)}{K/M}. \quad (5.14)$$

Je-li  $r = 1$  a  $K = 0$  z (5.14) pomocí l'Hospitalova pravidla získáme

$$\|\mathbf{A}^k\| \geq 1 - \frac{kM}{\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\|}.$$

Poslední tvrzení je zřejmé díky Jordanově kanonickému tvaru.

Je-li  $\mathbf{A}$  matice nebo omezený lineární operátor, pak pro libovolné  $\kappa > 0$

$$\mathbf{A}^\kappa = \mathbf{0} \Leftrightarrow \sigma(\mathbf{A}) = \{0\} \wedge \|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| = O(|z|^{-\kappa}),$$

kde  $O$  odkazuje na limitu  $z \rightarrow 0$ .

# Kapitola 6

## Lasery

Laser je akronymem anglického názvu **L**ight **A**mplification by **S**timulated **E**mission of **R**adiation, což je možné přeložit jako „zesilování světla stimulovanou emisí záření“. Jedná se o kvantový generátor a zesilovač koherentního (vnitřně uspořádaného) optického záření, které je, na rozdíl od jiných záření, monochromatické (fotony mají stejnou vlnovou délku a frekvenci), nízkou rozbíhavostí (divergencí) svazku (fotony laserového zařízení se pohybují stejným směrem) a vysokou hustotou přenášeného výkonu či energie. Připomeňme, že viditelné světlo je elektromagnetické záření o vlnové délce 400–750 nm. Vlnové délky světla leží mezi vlnovými délkami ultrafialového a infračerveného záření. Tři základní vlastnosti světla jsou svítivost (amplituda), barva (frekvence) a polarizace (úhel vlnění).

### Princip laseru

Nejdříve popíšeme jevy týkající se změn energie v atomech a molekulách: spontánní emisi a stimulovanou emisi/absorbci. Na základě kvantové mechaniky víme, že elektrony v atomech mohou mít různé energetické stavy  $E_1, E_2, E_3, \dots$ ,  $E_1 < E_2 < E_3 < \dots$ . Nižší energetická hladina je více stabilní než ty vyšší, elektrony ve vyšší hladině mají tendenci přejít na nižší, nadbytečná energie rovná rozdílu energie mezi dvěma hladinami může být uvolněna jako elektromagnetické záření. Tento proces se nazývá spontánní emise a platí:

$$E_2 - E_1 = h\nu_0,$$



kde  $E_2$  a  $E_1$  jsou po řadě vyšší a nižší energetická hladina,  $h$  Plankova konstanta a  $\nu_0$  frekvence vyzářené elektromagnetické vlny.

Pokud dojde k interakci mezi elektromagnetickou vlnou s frekvencí  $\nu_0$  a excitovaným systémem, jehož atomy jsou na energetické hladině  $E_2$ , a  $\nu_0$  je velmi blízko přechodné frekvenci mezi  $E_2$  a  $E_1$ , existuje vysoká pravděpodobnost, že atom přeskóčí na hladinu  $E_1$ . Při každém takovém přechodu dojde k uvolnění energie vyzářením elektromagnetické vlny (fotonu), zatímco dopadající vlna (foton) stále existuje. Potom máme 2 fotony. Tento proces se nazývá stimulovaná emise. Přechod elektronu do stavu s menší energií, vyvolaný stimulujícím fotonem, je tedy doprovázen vyzářením fotonu, který má stejnou energii, směr šíření, fázi i polarizaci vlnění jako stimulující foton. Fáze vlny určuje vztah vlny v daném místě a čase ke stavu vlny v časovém a prostorovém počátku.

Je stimulovaná emise způsobena nějakým druhem rezonance? Ano, dopadající elektromagnetická vlna by měla mít frekvenci velmi blízkou té, kterou mají atomy, a tato rezonance vytváří základní rozdíl mezi spontánní a stimulovanou emisí. V případě, že se jedná o spontánní emisi, vyzářením je ve všech směrech a náhodné fázi, zatímco při stimulované emisi jsou vyzářené vlny atomů ve stejném směru a fázi s dopadající vlnou.

Je-li atom na hladině  $E_1$ , setrvává tam až do doby, než je excitován, tzn. energeticky vybuzen. Při dopadu elektromagnetické vlny s frekvencí  $\nu_0$  na systém existuje vysoká pravděpodobnost, že atom absorbuje energii a přeskóčí na energetickou hladinu  $E_2$ . Tento proces se nazývá stimulovaná absorpce. Je důležité si uvědomit, že foton je absorbován (tj. přeskóčí na hladinu s větší energií) jen tehdy, je-li jeho energie rovná rozdílu energií příslušných hladin.

Obyčejně je počet atomů na nižší energetické hladině větší než na vyšší. Stimulovaná emise/absorpce i spontánní emise probíhají ve stejném čase. Stimulovaná absorpce v tomto případě převažuje nad stimulovanou emisí, dopadající elektromagnetickou vlnu není možné zesílit. To lze jen tehdy, pokud počet atomů ve vyšší hladině je větší než v nižší. Tento případ se nazývá populační inverze. Abychom dostali více atomů do vyšší hladiny než do nižší, musíme přemístit atomy z nižší hladiny do vyšší. Tento proces se nazývá čerpání.

## Základní konstrukce laserů

Zdrojem energie, který může představovat například výbojka, je do aktivního média dodávána energie. Zdroj zajišťuje, aby se v aktivním prostředí nacházel dostatek kvantových soustav v excitovaném stavu, tzn. energeticky vybudí elektrony aktivního prostředí ze základní energetické hladiny do vyšší. Takto je do vyšších energetických stavů vybudena většina elektronů aktivního prostředí a vzniká inverze populace hladin. Jelikož se aktivní prostředí formuje do tvaru dlouhého válce a umísťuje se do optického rezonátoru tvořeného většinou dvěma zrcadly, dochází k odrazu paprsku fotonů a jeho opětovnému průchodu prostředím podél os. To podporuje stimulovanou emisi, a tím dochází k exponenciálnímu zesilování toku fotonů. Nejdříve při stimulované emisi dochází k vyzařování fotonů ve všech směrech. Nicméně fotony, procházející systémem v jiném než podélném směru optických os, jsou buď rozptýleny, nebo absorbovány. Proto téměř všechny fotony v systému brzy oscilují ve směru optické osy, tedy dochází k zesilování jen u rezonujících fotonů - generované záření nabude jednotné povahy, tj. bude koherentní a monochromatické. Po dostatečném zesílení je laserový svazek z rezonátoru vyveden skrze polopropustné zrcadlo.

## Součásti laserů

Existuje velké množství různých typů laserových generátorů, každý z nich obsahuje tři základní součásti:

- Aktivní prostředí - látka obsahující oddělené kvantové energetické hladiny elektronů, probíhá zde zesilování záření.
- Rezonátor - optická dutina vymezená zrcadly, ve většině laserů jím světlo opakovaně prochází. Nejčastěji je tvořen dvěma zrcadly, jedním zcela odrazivým a druhým částečně propustným. Zrcadla nemusejí být rovinná, často je výhodné použít nejen konkávní, ale i konvexní zrcadla. Stabilita záření v rezonátoru závisí na poloměrech křivosti zrcadel a délce rezonátoru.
- Zdroj čerpání (= zdroj energie) - umožňuje excitaci aktivního prostředí.

Rezonátory lze dělit na stabilní či nestabilní podle toho, jestli vytvářejí oscilující paprsek sbíhavý do rezonátoru nebo rozbíhavý ven z rezonátoru.

Obyčejné lasery ( $< 2kW$ ) obvykle používají stabilní rezonátory.

Rezonátor je důležitou součástí také proto, že jeho rozměr rozhoduje o tzv. laserových módech. Obecně, vzory záření, které se opakují na každé uzavřené dráze světla skrz rezonátor a které jsou nejvíce stabilní, se nazývají vlastní módy, resp. módy rezonátoru. Lze je rozdělit na dva typy - podélné, které se od sebe odlišují frekvencí, a příčné, které se liší jak frekvencí, tak vzorem intenzity světla. Tedy podélný mód rezonátoru je specifický vzor stojatých vln vytvořený vlnami v rezonátoru. Odpovídá vlnovým délkám vln, které jsou zesíleny vzájemným působením po mnoha odrazech od zrcadel. Všechny ostatní vlnové délky podléhají destruktivnímu působení a jsou potlačeny. Vzorek podélného módu má uzly umístěné podél délky rezonátoru. Dále mohou existovat příčné módy, jejichž uzly jsou umístěny kolmo k ose rezonátoru.

Přípustné podélné módy rezonátoru jsou ty, kde vzdálenost zrcadel  $L$  (délka rezonátoru) je rovna přesnému násobku poloviny vlnové délky. Tedy pouze světlo, jehož délka uzavřené dráhy je celočíselný násobek vlnové délky  $\lambda$ , se může stát stojatou vlnou:

$$L = m \frac{\lambda}{2},$$

kde  $m$  je celé číslo známé jako řád módu.

V praxi bývá vzdálenost zrcadel  $L$  daleko větší než vlnová délka světla  $\lambda$ , takže náležité hodnoty  $m$  jsou velké (okolo  $10^5$ - $10^6$ ). Frekvenční rozdíl  $\Delta\nu$  mezi dvěma za sebou jdoucími módy,  $q$  a  $q + 1$ , je dán:

$$\Delta\nu = \frac{c}{2L}, \quad \nu = \frac{mc}{2L},$$

kde  $\nu$  je frekvence stojaté vlny a  $c$  rychlost světla v rezonátoru.

### 6.0.1 Matematické problémy spjaté s teorií laserů

Teorie laserů souvisí se dvěma různými problémy vlastních čísel. První, hermitovský, využívá Schrödingerův operátor, který určuje stavy energie atomů či molekul v excitovaném stavu v laserovém prostředí. Druhý se týká právě rezonátoru. Pro většinu laserů je tento problém téměř normální, nicméně normální být nemůže, jelikož jedno ze zrcadel musí být částečně odrazivé,

aby mohlo dojít k úniku světla.

Mějme rezonátor vymezený dvěma zrcadly, jejichž vzdálenost ve směru  $z$  je  $L$ . Délka  $L$  je typicky rovna tisícům vlnových délek světla s frekvencí, která nás zajímá. Pro jednoduchost budeme uvažovat 2D případ, jako druhou souřadnici vezmeme  $x$ . Představme si nyní na chvíli, že prostor mezi zrcadly je vakuum. Dostaneme Maxwellovy rovnice, které jsou základními zákony v makroskopické teorii elektromagnetického pole. Ty zredukujeme na vlnovou rovnici druhého řádu pro libovolnou složku vektoru  $E = E(x, z)$  elektrického pole. Elektrické pole je fyzikální pole, jehož zdrojem je těleso s elektrickým nábojem nebo časově proměnné magnetické pole. Projevuje se v něm působení elektrické síly. Naši pozornost upřeme k frekvenci  $\omega = ck$  odpovídající vlnovému číslu  $k$ , kde  $c$  je rychlost světla. V bezztrátovém prostředí vlnové číslo udává, o kolik radiánů se mění fáze šířící se vlny na každý metr vzdálenosti v určitém směru. Dostaneme Helmholtzovu či redukovanou vlnovou rovnici

$$\frac{\partial^2 E(x, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E(x, z)}{\partial z^2} + k^2 u(x, z) = 0.$$

Jelikož nás zajímá šíření ve směru  $z$ , nahradíme  $E$  pomocí  $u$  tak, že

$$E(x, z) = e^{-ikz} u(x, z).$$

Jak je obvyklé u lineárních rovnic, formulujeme problém v komplexních proměnných, konečné výsledky získáme tak, že později vezmeme reálné části. Diferenciální rovnice přejde na

$$\frac{\partial^2 u(x, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x, z)}{\partial z^2} - 2ik \frac{\partial u(x, z)}{\partial z} = 0,$$

a pokud je vlnové šíření aproximačně podélné,  $u$  se bude měnit pomalu s ohledem na  $z$ .

Připomeňme, že při podélném vlnění je amplituda kmitů rovnoběžná se směrem šíření vlny. Během šíření vlny dochází k postupnému zhušťování a zředování podélné vlny. Vzdálenost mezi dvěma zhušťováními (nebo zředěními) se nazývá vlnová délka. Amplituda (též výkmit nebo rozkmit) je maximální hodnota periodicky měnící se veličiny. Spolu s frekvencí a počáteční fází je amplituda jedním ze základních parametrů periodických dějů. Během jedné

periody se okamžitá hodnota harmonicky opakující se veličiny rovná amplitudě dvakrát - jednou v kladném směru, podruhé v záporném směru. Při skládání dvou periodických dějů může dojít k rezonanci, kdy výsledná amplituda je výrazně větší než původní amplitudy.

Pro většinu laserů lze provést paraxiální aproximaci, po odebrání členu  $\frac{\partial^2 u(x,z)}{\partial z^2}$  dostaneme

$$\frac{\partial u(x,z)}{\partial z} = -\frac{i}{2k} \frac{\partial^2 u(x,z)}{\partial x^2}. \quad (6.1)$$

Na tuto paraxiální rovnici budeme nazírat jako na evoluční rovnici s ohledem na časovou proměnnou  $z$  pro funkce  $u$  definované na  $\mathbb{R}$ . V běžně užívaném  $L^2$  skalárním součinu je operátor, který  $u$  přiřazuje  $-\frac{i}{2k} \frac{\partial^2 u(x,z)}{\partial x^2}$  normální a ryze rozptylovací. Rozptyl je fyzikální jev, který způsobuje, že vlnění (např. světlo, zvuk apod.) nebo pohybující se částice (obecně libovolné záření) jsou odchylovány z přímé dráhy vlivem přítomnosti drobných poruch prostředí, kterým vlnění nebo částice prochází. Difrakce (ohyb) vlnění označuje jevy, které vznikají při průchodu vlnění otvorem nebo kolem překážky způsobující narušení vlnění.

**Definice 6.1.** *Nechť  $\mathbf{A}$  je lineární operátor na nějakém funkčním prostoru. Potom  $f$  je vlastní funkce pro  $\mathbf{A}$  a  $\lambda$  je odpovídající vlastní číslo, pokud*

$$\mathbf{A}f = \lambda f.$$

Spektrům výše zmíněného operátoru je nezáporná imaginární osa (nebo nekladná imaginární osa, pokud je  $k < 0$ ). Tento operátor nemá žádné vlastní funkce, jelikož by se mělo jednat o komplexní exponenciály, které mají nekonečnou normu. Zkombinováním těchto „ne-zcela“ vlastních funkcí ve Fourierově integrálu dává Huygenes-Fresnelův integrál reprezentující řešení na pozici  $z$  na základě řešení v  $z = 0$ :

$$u(x,z) = \sqrt{\frac{ik}{2\pi z}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{ik(x-s)^2}{2z}} u(s,0) ds.$$

Huygenův princip popisuje jednu z představ o šíření vlnění. Předpokládá,

že v každém okamžiku lze každý bod na čele šířící se vlny chápat jako nový zdroj vlnění (sekundárních vln). Nový tvar čela vlny v čase o malý okamžik pozdějším lze pak určit jako vnější obálku vln, šířících se z těchto zdrojů. Huygensův princip není zcela správný, upřesněný Huygensův-Fresnelův princip doplňuje původní představu o interferenci sekundárních vln a zavádí tzv. inklinanční faktor. Každý bod vlnoplochy, do něhož postupné vlnění v izotropním prostředí dospělo v určitém okamžiku, můžeme pokládat za zdroj elementárního vlnění, které se z něho šíří v elementárních vlnoplochách. Vlnoplocha v dalším časovém okamžiku je vnější vlnoplocha všech elementárních vlnoploch ve směru, ve kterém se vlnění šíří. Díky Huygensovu principu tedy můžeme zkonstruovat vlnoplochu v určitém okamžiku, je-li známá její poloha a tvar v některém předcházejícím okamžiku. Lze také podle něj odvodit princip odrazu a lomu vlnění.

Tento integrální operátor zobrazující  $u(x, 0)$  na  $u(x, z)$  je unitární, a tedy normální a energii-zachovávající. Jeho spektrem je jednotkový kruh.

Nejzajímavější případ (a nenormálnost) nastává, pokud zavedeme okrajové podmínky. Uvažujme nejjednodušší možnou situaci, ve které je 2D rezonátor délky  $L$  po stranách otevřený a na koncích ohraničený dvěma rovinnými zrcadly, jako koncové body vezmeme  $x = \pm 1$ . Představme si svazek světla u levého zrcadla, které se začne šířit doprava, příčné elektrické pole je dáno  $u_0 = u_0(x)$ . Světlo se šíří doprava k druhému zrcadlu a tam se část něho odrazí ( $|x| \leq 1$ ), zatímco část se šíří k nekonečnu a ztratí ( $|x| > 1$ ). Tento proces ořezávání energie s  $|x| > 1$  se opakuje (opakující se odrážení), to nám dává dynamický systém, na který lze pohlížet jako na evoluční s diskrétním časem na definičním oboru  $-1 \leq x \leq 1$ , s každou časovou jednotkou odpovídající času  $L/c$ , který zabere světlu šířit se od jednoho zrcadla k druhému. Při jednom takovém přechodu se signál vyvíjí podle následujícího předpisu (dostaneme ho úpravou předchozí rovnice):

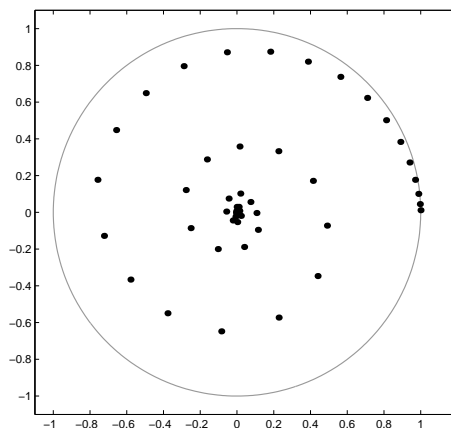
$$u(x) = \mathbf{A}u_0(x) = \sqrt{\frac{iF}{\pi}} \int_{-1}^1 e^{-iF(x-s)^2} u_0(s) ds,$$

kde Fresnelovo číslo je definováno jako  $F = k/2L$ . Matematicky řečeno, dostali jsme kompaktní integrální operátor na  $L^2[-1, 1]$ , odkud máme, že je omezený a má spočetnou nekonečnou množinu singulárních čísel klesajících k nule.

Připomeňme, že kompaktní operátor je lineární operátor z jednoho Banachova prostoru do druhého takový, že obraz omezené podmnožiny je relativně kompaktní podmnožina. Takový operátor je již nutně omezený, a tudíž spojitý.

Vidíme, že teorie zabývající se lasery úzce souvisí s chováním lineárních integrálních operátorů definovaných jádry, které jsou komplexní, symetrické, ale nejsou hermitovské. Budeme uvažovat operátor  $\mathbf{A}$ , který popisuje změny, ke kterým dochází v důsledku rozptylu a difrakce na okrajích, když vlna dané frekvence projde přes rezonátor.

Nejdříve ukážeme, jak vypadá samotné spektrum operátoru  $\mathbf{A}$ ,  $\sigma(\mathbf{A})$ . Pro ilustraci vezmeme případ  $F = 16\pi$ , dimenze  $N = 120$ . Je vidět, že vlastní čísla začínají poblíž 1 a směřují v elegantních spirálách k počátku. Dále je vykreslen jednotkový kruh.

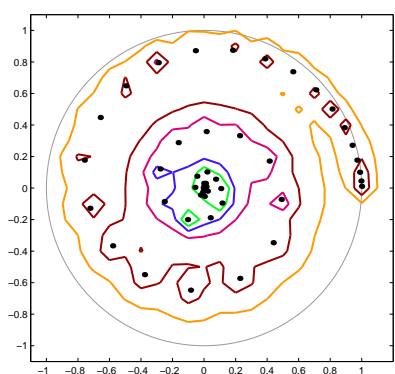


Obr. 6.1:  $\sigma(\mathbf{A})$ ;  $F = 16\pi$ ,  $N = 120$

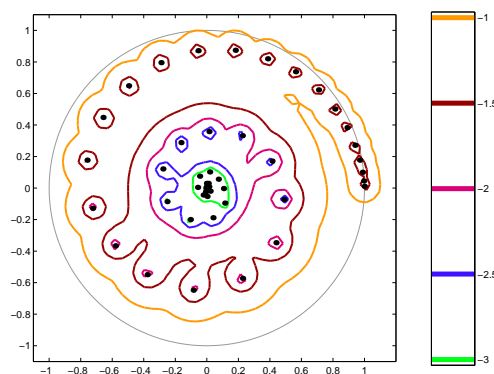
Na dalších osmi obrázcích jsou zobrazena pseudospektra vypočtená pomocí numerického balíku eigTool. Ten využívá „mřížkovou“ metodu a další urychlovací techniky, některé jsme zmínili ve čtvrté kapitole. Jednotlivá pseudospektra se liší hustotou mřížky  $\nu \times \nu$ , hodnota  $\nu = 24$  byla doporučena právě nástrojem eigTool.

Roste-li hodnota  $N$ , čas potřebný k získání pseudospektra se samozřejmě zvyšuje, nicméně i ve vysoké dimenzi (okolo 1000) výpočty trvaly maximálně několik desítek vteřin. Ovšem je třeba říci, že balík využívá předkompilované moduly, bez nich by se výpočetní doba pohybovala v řádu jednotek až desítek minut. Dále vidíme, že i pro poměrně hrubou mřížku je možné obdržet velmi přesné výsledky, pro  $\nu > 100$  se křivky již téměř nemění.

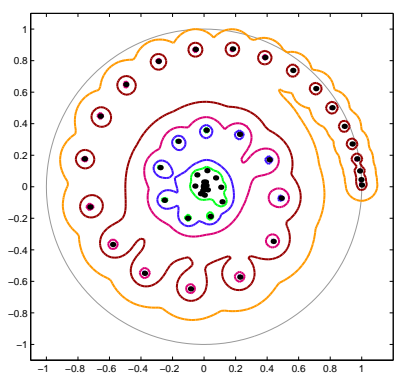
•  $N = 120$



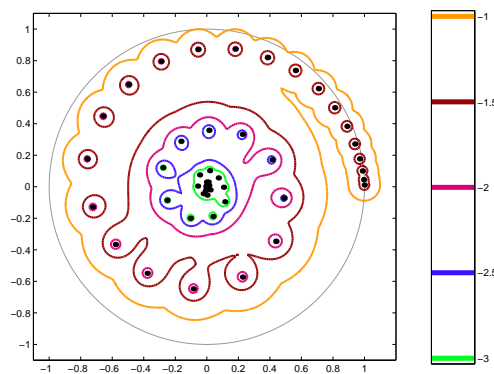
Obr. 6.2:  $\nu = 24$



Obr. 6.3:  $\nu = 50$



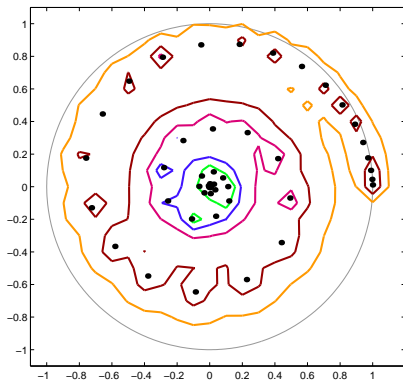
Obr. 6.4:  $\nu = 100$



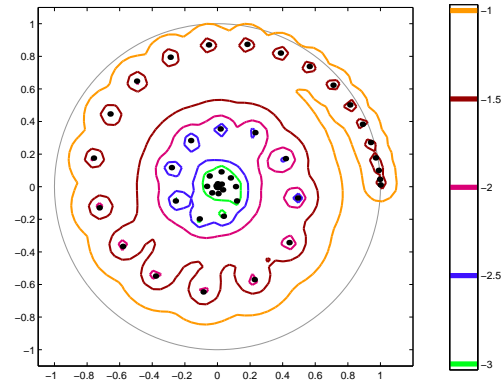
Obr. 6.5:  $\nu = 200$



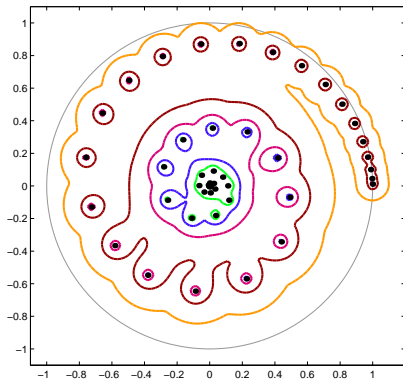
•  $N = 800$



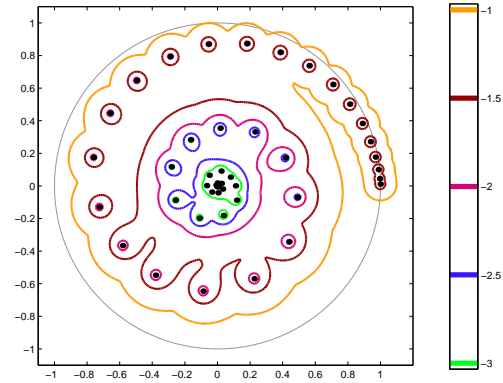
Obr. 6.6:  $\nu = 24$



Obr. 6.7:  $\nu = 50$



Obr. 6.8:  $\nu = 100$



Obr. 6.9:  $\nu = 200$

Pseudospektrum jsme se pokusili získat i pomocí kontinuační křivky. K vykreslení jsme posléze využili balík MatCont. Hlavní parametry výpočtu jsou uvedeny níže, na tomto místě zmíníme pouze minimální délku kroku  $1e - 7$  a toleranci  $1e - 10$ , které jsou stejné pro oba obrázky. Vidíme, že v tomto případě poměrně malé kroky nevedou k příliš uspokojivým výsledkům, navíc, zmenšíme-li maximální délku kroku, výpočet se prodražuje. Pro matice vyšších dimenzí výpočet mnohdy trvá i několik hodin. Přehled poskytují následující tabulky. Ještě dodejme, že jsme zaměřili jen na hranice okolo

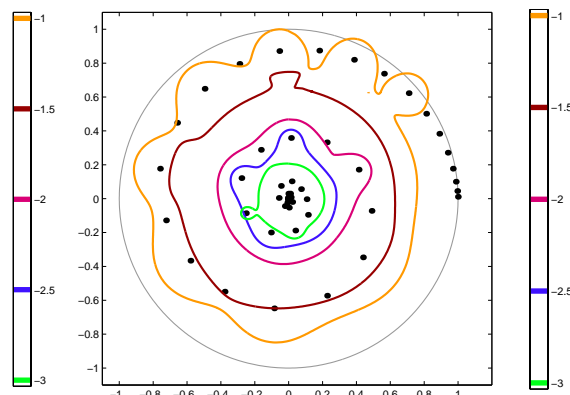
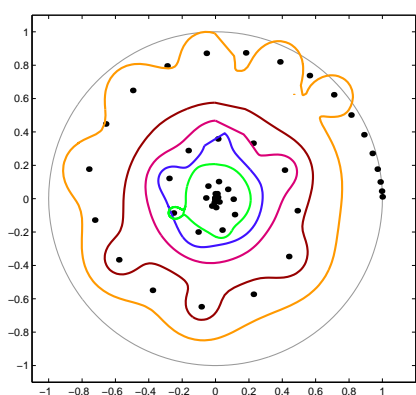
určitých bodů, část křivek v obrázku chybí.

- Maximální délka kroku: 0.2

$x_t, y_t$	$\varepsilon$	Počet kroků	Výpočetní čas
-0.0015, 1.0018	$10^{-1}$	240	597.8 s
-0.0016, 0.5032	$10^{-\frac{3}{2}}$	209	581.0 s
-0.0015, 0.4735	$10^{-2}$	154	452.6 s
0.0015, 0.2520	$10^{-\frac{5}{2}}$	290	1164.0 s
-0.0015, 0.1675	$10^{-3}$	456	1984.3 s

- Maximální délka kroku: 0.05

$x_t, y_t$	$\varepsilon$	Počet kroků	Výpočetní čas
-0.0015, 1.0018	$10^{-1}$	1060	3969.3 s
-0.0016, 0.5032	$10^{-\frac{3}{2}}$	815	2999.9 s
-0.0015, 0.4735	$10^{-2}$	622	2038.3 s
0.0015, 0.2520	$10^{-\frac{5}{2}}$	654	1814.9 s
-0.0015, 0.1675	$10^{-3}$	687	2393.5 s

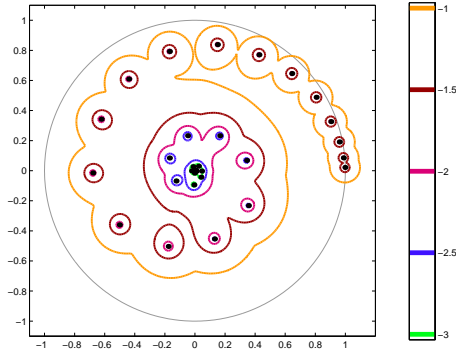


Obr. 6.10: max. délka kroku: 0.2

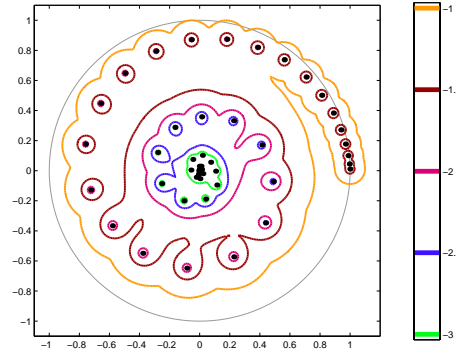
Obr. 6.11: max. délka kroku: 0.05

Hlavní přínos této metody tedy především spočívá v tom, že nám může, pokud to požadujeme, poskytnout velmi přesnou informaci lokálně, na určité části hranice.

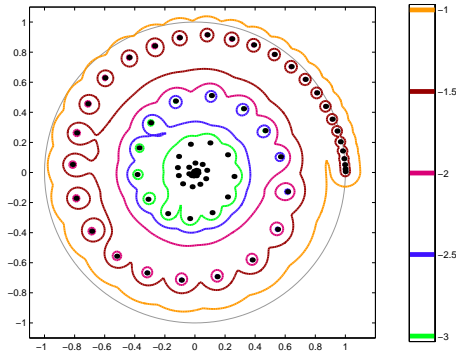
Nyní se budeme zabývat další analýzou spojenou s módy. Následující obrázky ukazují spektrum operátoru  $\mathbf{A}$  pro čtyři různé hodnoty  $F$ .



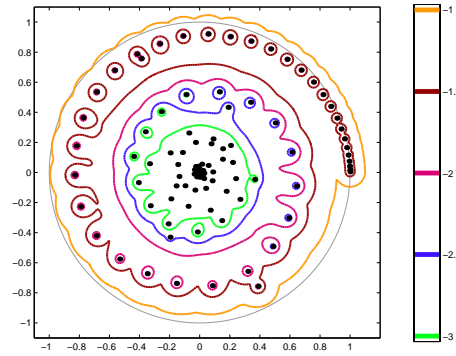
Obr. 6.12:  $F = 8\pi$



Obr. 6.13:  $F = 16\pi$



Obr. 6.14:  $F = 32\pi$



Obr. 6.15:  $F = 40\pi$

Uvažujeme-li  $\mathbf{A}^k$ , což představuje opakované odrazení, po mnoha odrazech je signál ovládnut módem, jehož vlastní číslo má absolutní hodnotu  $|\lambda|$  nejbližší k 1. Výsledkem postupného zesílování je téměř perfektně zaměřený a koherentní laserový paprsek „uzavřený“ do dominantního módu laserového rezonátoru. Přesněji, mód laseru se šíří jako stojatá vlna (po  $z$ -ové souřadnici). To znamená, že v každém bodě musí mít pevnou fázi. Odsud by se mohlo zdát, že by připadala v úvahu pouze vlastní čísla  $\lambda$ , která mají nulovou

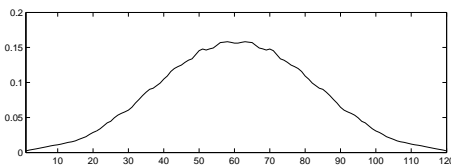
komplexní část. Nicméně, ne  $u$ , ale  $E$  musí mít pevnou fázi,  $e^{ikz}$  spojuje dvě oscilace rychleji než by to udělala libovolná fáze  $\lambda$ . Hodnota  $k$  se upravuje velmi mírně, takže  $e^{ikz}$  vyvažuje libovolnou nenulovou fázi  $\lambda$ .

Vidíme, že pokud se zvyšuje  $F$ , vlastní čísla se více přibližují k jednotkovému kruhu a navíjejí se k počátku pozvolněji. Vysvětlení máme z (6.1), odkud plyne, že se zvyšujícím se  $k$  se rozptyl zmenšuje, takže na okrajích jsou menší ztráty energie.

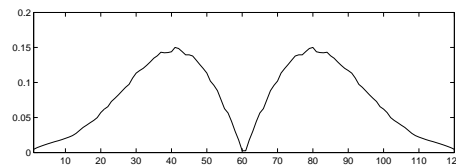
Na dalších obrázcích jsou odpovídající módy, které jsou aproximačně ortogonální. Dominantní módy oscilují v  $x$  pouze mírně, a z (6.1) opět máme, že nedochází k rychlému rozptylu, takže se na okrajích po jednom průběhu ztrácí pouze malé množství energie. Vyšší módy mají více oscilací a rychlejší rozptyl, dochází k větším energetickým ztrátám, hodnoty  $|\lambda|$  se zmenšují.

Uvedené módy přísluší k operátoru s hodnotou  $F = 16\pi$ . Horizontální osou je interval  $-1 \leq x \leq 1$ , údaje o vlastních číslech  $\lambda_n$  a jejich číslech podmíněnosti jsou v následující tabulce.

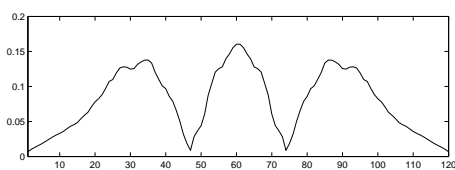
$n$	$ \lambda_n $	komplex. část ( $\lambda_n$ )	$\kappa(\lambda_n)$
1	0.99906	0.01126	1.00
2	0.99534	0.04489	1.01
3	0.99208	0.10039	1.02
5	0.97740	0.27142	1.07
10	0.90628	0.82001	1.35
20	0.65339	-0.64772	3.01



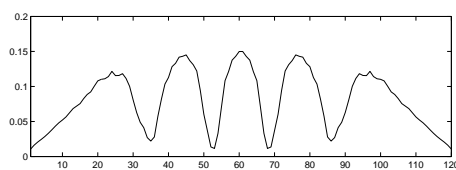
Obr. 6.16:  $n = 1$



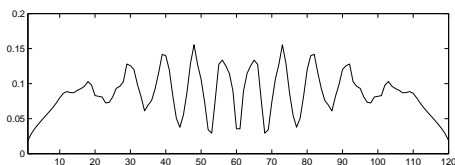
Obr. 6.17:  $n = 2$



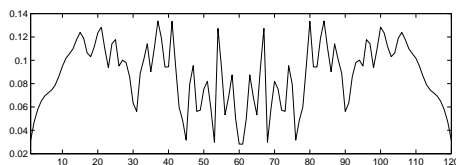
Obr. 6.18:  $n = 3$



Obr. 6.19:  $n = 5$

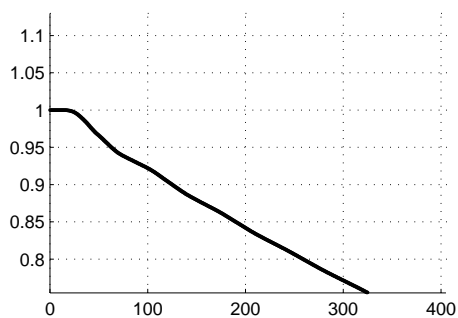


Obr. 6.20:  $n = 10$



Obr. 6.21:  $n = 20$

Je vidět, že nenormalita operátoru je poměrně mírná. Obzvláště pro krajní vlastní čísla (s nízkými hodnotami  $n$ ) nelze očekávat, že narazíme na nenormální efekty ve velkém významu. Nicméně zde existuje jeden menší, a to ten, že pokud roste hodnota  $k$ , norma  $\|\mathbf{A}^k\|$  zůstává po nějakou dobu téměř přesně rovná jedničce, poté eventuálně začne její exponenciální pokles. Toto chování opět souvisí s rozptylováním na okrajích.



# Literatura

- [1] Janovská D., Janovský V., Tanabe K.: A Note on Computation of Pseudospectra, submitted
- [2] Segethová J.: Základy numerické matematiky, Karolinum, 2002
- [3] Šulc J.: *Lasery a jejich aplikace*, 2002
- [4] Trefethen L. N.: *Computation of Pseudospectra*, Cambridge University Press, 1999
- [5] Trefethen L. N., Embree M.: *Spectra and Pseudospectra: The Behavior of Nonnormal Matrices and Operators*, University Presses Of California, Columbia And Princeton (United States), 2005
- [6] Wright T.: *Eigtool: A graphical tool for nonsymmetric eigenproblems*, <http://www.comlab.ox.ac.uk/pseudospectra/eigtool/>
- [7] *Wikipedia*, [http://en.wikipedia.org/wiki/Main\\_Page](http://en.wikipedia.org/wiki/Main_Page)