

APPROXIMATE COMPUTATIONS OF PSEUDOSPECTRA

J. Kozánek*

Summary: *Pseudospectra represent a recent global insight into spectral and stability properties of the non-conservative dynamic systems with nonnormal coefficient matrices of the mathematical models. Unfortunately, the numerical computation of this regions in the complex plane is in general cases cumbersome and tedious. The estimation of the resolvent norm exploiting only eigenvalues and singular values of the matrix is investigated in this paper and two other approximate techniques are presented.*

1. Úvod

Chování dynamických systémů je charakterizováno zejména jejich spektrálními vlastnostmi, kde imaginární část vlastních čísel matematického modelu reprezentovaného čtvercovou maticí $\mathbf{A}$ informuje o možných rezonancích a reálné části zobrazují míru stability. U nesamoadjungovaných modelů (ať již odpovídají nesymetrickým koeficientovým maticím nebo vznikly přechodem do stavového prostoru u nekonzervativních systémů) bude jejich chování v okolí rezonancí složitější - [7, 15, 16]. Vlastní vektory již nebudou obecně ortogonální a dokonce i řád pólu rezolventy může být větší než 1, v tomto případě je koeficientová matice nediagonalizovatelná a vlastní vektory již netvoří úplnou bazi lineárního prostoru ve kterém pracujeme, nutnou podmínkou je ovšem existence alespoň jednoho násobného vlastního čísla. Navíc vzrůstá citlivost vlastních čísel a vektorů na malé změny parametrů matematického modelu. Proto se v poslední době - [1, 2, 3], věnuje pozornost větší oblasti komplexní roviny než je bodové spektrum lineárního operátoru - tzv. ε -pseudospektru, tj. oblasti $\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})$, kde je spektrální norma rezolventy $\|(\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\|$ větší než $1/\varepsilon$, $\varepsilon > 0$. Tyto oblasti pak lépe umožňují příslušné matice charakterizovat a mají příznivější vlastnosti při malých perturbacích. Na druhé straně, jejich výpočet (kdy musí být vyšetřovaná oblast komplexní roviny pokryta dostatečně hustou bodovou sítí a v každém bodě λ je vypočtena spektrální norma $\|(\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\|$ pomocí nejmenšího singulárního čísla matice $(\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A})$), je velmi pracný. V odborné literatuře se proto objevuje řada přibližných odhadů, jejichž cílem je rozsah výpočtů zmenšit. Zde uvedeme přibližný horní odhad normy rezolventy publikovaný v [1], který vychází ze znalosti všech vlastních a singulárních čísel, ale nepracuje s vlastními (hlavními) vektory a nevyžaduje ani znalost Jordanovy struktury matice $\mathbf{A}$. Dále naznačíme postup, který jednoduše odhaduje řád pólů rezolventy a normu komponentních matic. V další kapitole pak využijeme malé citlivosti ε -pseudospekter na perturbaci vyšetřované matice a aplikujeme klasický program určující všechna vlastní čísla a vlastní vektory pro diagonalizovatelné matice.

* Ing. Jan Kozánek, CSc., Ústav termomechaniky AV ČR, Dolejškova 5, 182 00 Praha 8, tel. 420-266052032, fax: 420-286584695, e-mail: kozanek@it.cas.cz

2. Spektrum a pseudospektrum

Označme spektrum komplexní čtvercové matice $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n,n}$ jako $\Lambda(\mathbf{A})$ - množinu všech vlastních čísel $\lambda_v \in \mathbb{C}$ pro něž je matice

$$(\lambda_v \mathbf{I} - \mathbf{A}),$$

($\mathbf{I}$ je jednotková matice řádu n), singulární. Potom je rezolventní funkce

$$(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}, \quad (1)$$

definována pro všechna $\lambda \in \mathbb{C}$, $\lambda \notin \Lambda(\mathbf{A})$. Pro každé $\varepsilon > 0$ je pak ε -pseudospektrum $\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A}) \subset \mathbb{C}$ matice $\mathbf{A}$:

$$\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A}) = \Lambda(\mathbf{A}) \cup \{\lambda \in \mathbb{C}, \lambda \notin \Lambda(\mathbf{A}) \mid \|(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| \geq \varepsilon^{-1}\}. \quad (2)$$

To znamená, že ε -pseudospektrum $\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})$ je množina bodů komplexní roviny, v nichž je norma rezolventní funkce větší nebo rovna ε^{-1} , včetně bodů spektra (v nichž roste nade všechny meze). Zřejmě platí, že $\Lambda_{\varepsilon_1}(\mathbf{A}) \subset \Lambda_{\varepsilon_2}(\mathbf{A})$ pro $\varepsilon_1 < \varepsilon_2$ a $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \Lambda_\varepsilon(\mathbf{A}) = \Lambda(\mathbf{A})$.

Pracujeme zde výhradně se spektrální normou matice odvozenou z euklidovské normy vektorů. Ekvivalentní definice popisuje $\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})$ jako množinu všech vlastních čísel odpovídajících maticím, které vzniknou porušením $\mathbf{A}$ maticemi, které jsou v normě menší nebo rovny ε :

$$\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A}) = \{\lambda \in \mathbb{C} \mid \lambda \in \Lambda(\mathbf{A} + \mathbf{E}), \|\mathbf{E}\| \leq \varepsilon\} \quad (3)$$

a konečně poslední definice, vhodná pro numerický výpočet, využívá toho, že spektrální norma matice – maximální singulární číslo, je rovna převrácené hodnotě nejmenšího singulárního čísla matice k ní inverzní:

$$\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A}) = \{\lambda \in \mathbb{C} \mid \sigma_{\min}(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A}) \leq \varepsilon\}, \quad (4)$$

v níž se tedy obejdeme bez výpočtu inverzní matice k matici $(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A})$.

I když je spektrum spojitou funkcí prvků matice, může být na její poruchy velmi citlivé – viz [1, 16]. Na druhé straně, pro poruchovou matici $\mathbf{E}$, $\|\mathbf{E}\| = \delta < \varepsilon$, platí:

$$\Lambda_{\varepsilon-\delta}(\mathbf{A} + \mathbf{E}) \subset \Lambda_\varepsilon(\mathbf{A}) \subset \Lambda_{\varepsilon+\delta}(\mathbf{A} + \mathbf{E}) \quad (5)$$

tzn., že pseudospektrum $\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})$ se při „malých poruchách“ mění „málo“.

Pro matice normální ($\mathbf{A}^H \mathbf{A} = \mathbf{A} \mathbf{A}^H$) s r , $1 \leq r \leq n$ různými vlastními čísly, tzn. i pro všechny matice hermitovské a symetrické (s reálnými prvky) je určení pseudospekter jednoduché:

$$\Lambda_{\varepsilon}(\mathbf{A}) = \bigcup_{v=1}^r \mathbf{B}[\lambda_v, \varepsilon], \quad (6)$$

kde $\mathbf{B}[\lambda_v, \varepsilon] = \{\lambda \in \mathbb{C} \mid |\lambda_v - \lambda| \leq \varepsilon\}$ jsou kruhy se středy λ_v o poloměrech ε . Normálním maticím přísluší úplná soustava (tvořící bazi n -rozměrného prostoru) vlastních vektorů, navíc ortogonálních. Existuje řada přístupů, jak charakterizovat odchylku dané matice od „normality“ a pokusit se tak předpovědět, jak dalece se bude její pseudospektrum lišit od výše uvedeného jednoduchého sjednocení kruhů. Přirozenou mírou odchylky od normality je

$$\frac{\|\mathbf{A}^H \mathbf{A} - \mathbf{A} \mathbf{A}^H\|}{\|\mathbf{A}\|}. \quad (7)$$

Pomocí Schurova rozkladu matice $\mathbf{A}$: $\mathbf{A} = \mathbf{U} \mathbf{T} \mathbf{U}^H$, $\mathbf{U}^H \mathbf{U} = \mathbf{I}$, s horní trojúhelníkovou maticí $\mathbf{T}$, lze definovat odchylku od normality jako

$$\frac{\|\mathbf{T} - \text{Diag}(\mathbf{T})\|}{\|\mathbf{A}\|}. \quad (8)$$

Protože v případě normální matice $\mathbf{A}$ je matice $\mathbf{T}$ diagonální, je tento poměr nulový v případě matice normální. Nevýhodou Schurova rozkladu je, že není jednoznačný a pokud budeme v posledním vztahu uvažovat infimum ze všech Schurových rozkladů, budeme mít potíže s jeho určením. Dosud jsme vycházeli z vlastností matice $\mathbf{A}$ jako takové, další charakteristikou její odchylky od normality může být míra toho, jak se její vlastní vektory odlišují od vektorů ortogonálních – pomocí čísla podmíněnosti $\kappa(\mathbf{V}) = \|\mathbf{V}\| \cdot \|\mathbf{V}^{-1}\|$ modální matice $\mathbf{V}$, jejíž sloupce jsou vlastní vektory. Poslední číslo navíc udává, že vlastní čísla matice $\mathbf{A} + \mathbf{E}$ se od vlastních čísel matice výchozí liší maximálně o $\kappa(\mathbf{V}) \cdot \|\mathbf{E}\|$:

$$|\lambda(\mathbf{A}) - \lambda(\mathbf{A} + \mathbf{E})| \leq \kappa(\mathbf{V}) \cdot \|\mathbf{E}\|. \quad (9)$$

Jak bude jednotlivé vlastní číslo λ_v matice $\mathbf{A}$ citlivé na její poruchy, lze odhadnout z velikosti jeho čísla podmíněnosti $\kappa(\lambda_v) = 1/|\mathbf{w}^H \mathbf{v}|$, kde $\mathbf{v}_v, \mathbf{w}_v, \|\mathbf{v}_v\| = \|\mathbf{w}_v\| = 1$ je pravostranný, levostranný vlastní vektor matice $\mathbf{A}$. V případě, že matice $\mathbf{A}$ je normální, je $\kappa(\mathbf{V}) = 1$ a pro „symetrické“ vlastní řešení $\mathbf{v}_v = \mathbf{w}_v$ máme $\kappa(\lambda_v) = 1$. Výše uvedené odhady pracující s vlastními vektory předpokládají diagonalizovatelnou matici $\mathbf{A}$.

Bohužel žádná z uvedených charakteristik neposkytuje vyčerpávající odpověď na to, jak pseudospektrum určit (resp. jak poznat nakolik se liší od „jednoduchého“ případu pro matice normální) a tím je pak potvrzen význam jejich numerického výpočtu resp. odhadu. V teoretických i numerických úvahách má význam i úzký vztah tzv. Rayleighovy oblastí (Numerical range) a pseudospekter - [2]. Nejjednodušší postup pro získání první informace o velikosti ε -pseudospektra, je zvolit řadu perturbačních matic $\mathbf{E} \in \mathbb{C}^{n,n}$, $\|\mathbf{E}\| = \varepsilon$ a v komplexní rovině zobrazit vlastní čísla matic $(\mathbf{A} + \mathbf{E})$, tzn. vycházet z definice (3). Často se používá i definice (4). O tom, že numerickému výpočtu pseudospekter je v poslední době věnována v odborné literatuře značná pozornost, svědčí uvedený seznam prací, např. [1-3], [8-14] s desítkami různých metod a postupů. Zde se budeme zabývat pouze třemi, méně známými, přístupy.

3. Odhad normy rezolventy (V.B. Lidskij, V.I. Macaev, I.C. Gohberg, M.G. Krejn)

Zajímavý odhad spektrální normy rezolventy, který vychází jen ze znalosti vlastních a singulárních čísel matice $\mathbf{A}$ byl publikován nejprve v pracích [4, 5], upraven v [6] a pro případ konečné dimenze publikován v [1]. Jde o horní odhad, s velmi dobrými vlastnostmi pro matice s velkými odchylkami od normality a pro matice nediagonalizovatelné.

Nechť $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n,n}$ má vlastní, singulární čísla $\lambda_j, \sigma_j, j=1,2,\dots,n$. Pokud je σ_1 nejmenší singulární číslo, pro $\lambda \in \mathbb{C}, \lambda \neq \lambda_j, j=1,2,\dots,n$ platí pro spektrální normu rezolventy, že

$$\|(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| \leq \prod_{j=2}^n (|\lambda| + \sigma_j) / \prod_{j=1}^n |\lambda - \lambda_j|. \quad (10)$$

Důkaz tvrzení je poměrně dlouhý a využívá tři pomocných vět, jeho hlavní myšlenky jsou uvedeny v Dodatku.

4. Odhad řádu pólů rezolventy a norem komponentních matic

Lze ukázat – [17], že v obecném případě můžeme rezolventu zapsat ve tvaru:

$$(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1} = \sum_{v=1}^r \sum_{\gamma=1}^{\gamma_v} \frac{\mathbf{Z}_{v,\gamma}}{(\lambda - \lambda_v)^\gamma}, \quad (11)$$

kde komponentní matice $\mathbf{Z}_{v,\gamma} \in \mathbb{C}^{n,n}$ jsou jednoznačně definované, $1 \leq r \leq n$ označuje počet vzájemně různých vlastních čísel a $1 \leq \gamma_v \leq n$ je maximální řád „Jordanovy submatice“ s $(\gamma_v - 1)$ jedničkami v superdiagonále odpovídající vlastnímu číslu λ_v . V blízkém okolí spektra (vlastního čísla λ_v) je pak $(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}$ resp. $\|(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\|$ přibližně dána jednoduchou funkcí $\frac{1}{(\lambda - \lambda_v)^{\gamma_v}}$ a komponentní maticí $\mathbf{Z}_{v,\gamma_v}$ (která na λ nezávisí) resp. jejich absolutními hodnotami a normou. Pro dynamické systémy s vesměs různými ($r = n$) vlastními čísly λ_v ($\gamma_v = 1, \forall v$) musí být koeficientová matice $\mathbf{A}$ diagonalizovatelná a rezolventa se zjednoduší:

$$(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1} = \sum_{v=1}^n \frac{\mathbf{Z}_v}{\lambda - \lambda_v}. \quad (12)$$

Určení komponentních matic v případě, kdy matice $\mathbf{A}$ není diagonalizovatelná je většinou delikátní numerický problém. Pokusíme se proto strukturu matice $\mathbf{A}$ a zejména řád pólů odpovídající násobným vlastním číslům odhadnout jiným způsobem. Určíme, resp. odhadneme λ_v s možnou algebraickou násobností p_v a v jeho malém okolí (na přímce, která tímto bodem prochází) vyšetřujeme chování funkce $|\lambda - \lambda_v|^\gamma \cdot \|(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\|$ pro $\gamma = 1, 2, \dots, p_v$. Předpokládejme nejprve, že máme k dispozici všechna vlastní čísla matice $\mathbf{A}$ (určená např. v Matlabu programem `eig(A)`), která jsme schopni rozdělit na vlastní čísla věrohodně od sebe různá a ta, která považujeme za násobná, např. $\lambda_{v1}, \lambda_{v2}, \dots, \lambda_{vp_v}$ taková, že

$$|\lambda_{vj} - \lambda_{vk}| \ll \varepsilon, \quad j, k = 1, 2, \dots, p_v.$$

Reprezentujeme je „průměrným vlastním číslem“

$$\lambda_v = \frac{1}{p_v} \sum_{j=1}^{p_v} \lambda_{vj}$$

o algebraické násobnosti p_v a budeme se snažit aproximovat rezolventu $(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}$ v malém okolí λ_v . Dále zvolíme na přímce procházející λ_v několik bodů λ_k , $k = 1, 2, \dots, k_v$ tak, že

$$1 \gg |\lambda_v - \lambda_k| > \max_{j=1, 2, \dots, p_v} |\lambda_v - \lambda_{vj}|, \quad k = 1, 2, \dots, k_v,$$

vypočteme příslušné rezolventy $\mathbf{R}(\lambda_k) = (\lambda_k \mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}$ a vyšetřujeme nejprve chování hodnot $b_k = |\lambda_k - \lambda_v|^\gamma \cdot \|\mathbf{R}(\lambda_k)\|$ pro $\gamma = 1, 2, \dots, p_v$. Pro $\gamma = \gamma_v$, kde γ_v je řád pólu odpovídající λ_v , budou b_k vykazovat nejmenší závislost (např. pomocí jednoduché regrese) na k a odhadneme komponentní matici

$$\mathbf{Z}_{v, \gamma_v} \approx (\lambda_k - \lambda_v)^{\gamma_v} \cdot \mathbf{R}(\lambda_k). \quad (13)$$

Komponentní matice $\mathbf{Z}_{v, \gamma_v}$ odpovídající (maximálnímu) řádu pólu je pro charakteristiku chování rezolventy v blízkém okolí λ_v nejdůležitější. Pokud to ovšem přesnost výpočtů a rozložení vlastních čísel dovolí, můžeme se pokusit i o odhad dalších komponentních matic $\mathbf{Z}_{v, \gamma}$, $1 \leq \gamma < \gamma_v$ - iteračním způsobem, vyšetřením hodnot

$$b_k = |\lambda_k - \lambda_v|^{\gamma_v-1} \cdot \|\mathbf{R}(\lambda_k) - \frac{\mathbf{Z}_{v, \gamma_v}}{(\lambda_k - \lambda_v)^{\gamma_v}}\|, \quad k = 1, 2, \dots, k_v \quad (14)$$

a komponentní matici $\mathbf{Z}_{v, \gamma_v-1}$ odhadneme jako v předchozím případě. S ohledem na charakter

funkce $\frac{1}{|\lambda_k - \lambda_v|^\gamma}$, $\gamma = 1, 2, \dots, \gamma_v$ může být při určení komponentní matice $\mathbf{Z}_{v, \gamma_v-1}$ výhodnější

zvolit nové body $\tilde{\lambda}_k$, vzdálenější od λ_v (aby příspěvky odpovídající funkcím $\frac{1}{(\tilde{\lambda}_k - \lambda_v)^{\gamma_v}}$

byly eliminovány nejen odečtením $\frac{\mathbf{Z}_{v, \gamma_v}}{(\tilde{\lambda}_k - \lambda_v)^{\gamma_v}}$, ale i „menším“ $\frac{1}{|\tilde{\lambda}_k - \lambda_v|^{\gamma_v}}$ pro „větší“ $|\tilde{\lambda}_k - \lambda_v|^{\gamma_v}$), pochopitelně tak, aby se $\tilde{\lambda}_k$ „příliš nepřiblížily“ ke zbývajícím vlastním číslům λ_σ , $\sigma \neq v$ matice $\mathbf{A}$.

Pseudospektrum $\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})$ pak odhadujeme pomocí

$$\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A}) \approx \bigcup_{v=1}^r \Lambda_{\varepsilon, v}, \quad (15)$$

kde

$$\Lambda_{\varepsilon, v} = \lambda_v \cup \{\lambda \in \mathbb{C}, \lambda \neq \lambda_v \mid \sum_{\gamma=1}^{\gamma_v} \frac{\|\mathbf{Z}_{v, \gamma}\|}{|\lambda - \lambda_v|^\gamma} \geq \varepsilon^{-1}\}.$$

5. Použití klasického programu pro vlastní rozklad

Použijeme klasický program (např. $\text{eig}(\mathbf{A})$, MATLAB) pro úplný vlastní rozklad diagonalizovatelné matice, který v případě, že matice $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n,n}$ nebude diagonalizovatelná, vlastně rozloží (nejčastěji rozštěpením násobných vlastních čísel) blízkou matici jednoduché struktury $\tilde{\mathbf{A}} \in \mathbb{C}^{n,n}$: $\tilde{\mathbf{A}}\mathbf{X} \approx \mathbf{X}\mathbf{\Lambda}$, kde $\mathbf{\Lambda}$ je diagonální matice řádu n a $\mathbf{X} \in \mathbb{C}^{n,n}$ je matice odpovídajících vlastních vektorů. Pro poruchovou matici $\mathbf{E}$, $\|\mathbf{E}\| = \delta < \varepsilon$ totiž platí (5):

$$\Lambda_{\varepsilon-\delta}(\mathbf{A} + \mathbf{E}) \subset \Lambda_{\varepsilon}(\mathbf{A}) \subset \Lambda_{\varepsilon+\delta}(\mathbf{A} + \mathbf{E})$$

a pokud bude δ malé s ohledem na námi uvažované ε , bude $\Lambda_{\varepsilon}(\mathbf{A})$ uspokojivě aproximováno i v tomto případě.

Velikost normy $\|(\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\|$ aproximuje $\|\mathbf{X}(\lambda\mathbf{I} - \mathbf{\Lambda})^{-1}\mathbf{X}^{-1}\|$, za předpokladu, že budeme schopni matici $\mathbf{X}$ invertovat. Přitom je nejprve nutno ověřit, zda je hodnota

$$\frac{\|\mathbf{A}\mathbf{X} - \mathbf{X}\mathbf{\Lambda}\|}{\|\mathbf{A}\mathbf{X}\|} \quad (16)$$

vyjadřující dosaženou relativní kvalitu vlastního rozkladu matice $\mathbf{A}$ dostatečně malá a zejména zda číslo podmíněnosti $\kappa(\mathbf{X}) = \|\mathbf{X}\| \cdot \|\mathbf{X}^{-1}\|$ nedosahuje hodnot, kdy nebude již výpočet inverzní matice k matici $\mathbf{X}$ věrohodný. V opačném případě bude nutno zvolit vhodnou perturbační matici $\mathbf{E} \in \mathbb{C}^{n,n}$ s malou normou $\|\mathbf{E}\|$ (generovanou např. jako diagonální) a postup vlastního rozkladu opakovat pro matici $(\mathbf{A} + \mathbf{E})$ a násobná vlastní čísla výchozí matice $\mathbf{A}$ tak rozštěpit předem.

Pseudospektrum $\Lambda_{\varepsilon}(\mathbf{A})$ pak odhadujeme s ohledem na tvar rezolventy pro diagonalizovatelnou matici (12) buď „horním odhadem“

$$\Lambda_{\varepsilon}(\mathbf{A}) \subset \{\lambda_1, \dots, \lambda_n\} \cup \{\lambda \in \mathbb{C}, \lambda \neq \lambda_v, v = 1, 2, \dots, n \mid \sum_{v=1}^n \frac{\|\mathbf{Z}_v\|}{|\lambda - \lambda_v|} \geq \varepsilon^{-1}\} \quad (17)$$

nebo podobně jako v předchozím případě, kdy

$$\Lambda_{\varepsilon}(\mathbf{A}) \approx \bigcup_{v=1}^n \Lambda_{\varepsilon,v}, \quad (18)$$

kde

$$\Lambda_{\varepsilon,v} = \lambda_v \cup \{\lambda \in \mathbb{C}, \lambda \neq \lambda_v \mid \frac{\|\mathbf{Z}_v\|}{|\lambda - \lambda_v|} \geq \varepsilon^{-1}\}.$$

Je ovšem zřejmé, že výše uvedeným postupem, založeným na použití programu pro vlastní rozklad diagonalizovatelné matice budeme moci aproximovat $\Lambda_{\varepsilon}(\mathbf{A})$ v případě nediagonalizovatelné matice $\mathbf{A}$ jen pro „dostatečně velká ε “, tak aby byla splněna podmínka

$$\|\mathbf{E}\| = \delta < \varepsilon.$$

Dodatek - Odhad spektrální normy rezolventy (V. B. Lidskij, V. I. Macaev, I. C. Gohberg, M. G. Krejn)

Nechť matice $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n,n}$ má vlastní, singulární čísla $\lambda_j, \sigma_j, j=1,2,\dots,n$. Pokud je σ_1 nejmenší singulární číslo, pro $\lambda \in \mathbb{C}, \lambda \neq \lambda_j, j=1,2,\dots,n$ platí následující odhad spektrální normy rezolventy

$$\|(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| \leq \frac{\prod_{j=2}^n (|\lambda| + \sigma_j)}{\prod_{j=1}^n |\lambda - \lambda_j|}.$$

Poznámka. Zde uvedený tvar nerovnosti koriguje tiskové chyby v pracích [1, 6] a zahrnuje i případ $\lambda = 0$, kdy přechází v rovnost:

$$\|\mathbf{A}^{-1}\| = \frac{1}{\sigma_1} = \prod_{j=2}^n \sigma_j / \prod_{j=1}^n |\lambda_j|,$$

která je přímým důsledkem Weylovy věty resp. výpočtu absolutní hodnoty determinantu matice vyjádřené pomocí vlastního a singulárního rozkladu

$$\prod_{j=1}^n |\lambda_j| = \prod_{j=1}^n \sigma_j.$$

Pro $\lambda \neq 0$ platí $\|(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| = \frac{1}{|\lambda|} \cdot \|(\mathbf{I} - \frac{1}{\lambda} \mathbf{A})^{-1}\|$ a s výše uvedenou větou je ekvivalentní následující tvrzení.

Lemma. S dříve zavedeným označením platí, že

$$\|(\mathbf{I} - \frac{1}{\lambda} \mathbf{A})^{-1}\| \leq \frac{\prod_{j=2}^n \left(1 + \frac{\sigma_j}{|\lambda|}\right)}{\prod_{j=1}^n \left(1 - \frac{\lambda_j}{\lambda}\right)}.$$

Předtím, než naznačíme základní myšlenky důkazu poslední nerovnosti podle [6], uvedeme 3 pomocné věty.

Lemma 1. Necht' matice $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n,n}$ a vektory $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{C}^n$. Pokud singulární čísla seřazujeme v neklesajících posloupnostech ($\sigma_1 \leq \sigma_2 \leq \dots \leq \sigma_n$), platí – [1], že

$$\sigma_j(\mathbf{A} + \mathbf{x} \mathbf{y}^H) \leq \sigma_{j+1}(\mathbf{A}), j=1,2,\dots,n-1.$$

Změníme-li tedy výchozí čtvercovou matici $\mathbf{A}$ o libovolnou matici hodnosti 1, budou singulární čísla nové matice omezena shora singulárními čísly matice výchozí o jednotku vyššími, jinak řečeno, $n-1$ nejmenších singulárních čísel změněné matice bude shora omezeno $n-1$ největšími singulárními čísly matice původní.

Lemma 2. Necht' $\mathbf{I}$ je jednotková matice řádu n a $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{C}^n$. Potom

$$\text{Det}(\mathbf{I} + \mathbf{x} \mathbf{y}^H) = 1 + \mathbf{y}^H \mathbf{x}.$$

Důkaz. Zřejmě platí, že

$$\begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{y}^H & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{I} + \mathbf{x} \mathbf{y}^H & \mathbf{x} \\ \mathbf{0} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ -\mathbf{y}^H & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{x} \\ \mathbf{0} & 1 + \mathbf{y}^H \mathbf{x} \end{bmatrix}$$

a podle pravidla o determinantu součinu matic dostáváme tvrzení Lemmy 2.

Lemma 3. Necht' $\mathbf{B} \in \mathbb{C}^{n,n}$ má vlastní, singulární čísla $\lambda_j, \sigma_j, j = 1, 2, \dots, n$ seřazené v posloupnosti $|\lambda_1| \leq |\lambda_2| \leq \dots \leq |\lambda_n|, \sigma_1 \leq \sigma_2 \leq \dots \leq \sigma_n$. Potom pro $\tau > 0$ platí – [1]:

$$\prod_{j=n-k+1}^n (1 + \tau |\lambda_j|) \leq \prod_{j=n-k+1}^n (1 + \tau \sigma_j), \quad k = 1, 2, \dots, n.$$

Důkaz. Vychází se z Weylovy nerovnosti

$$\prod_{j=n-k+1}^n |\lambda_j| \leq \prod_{j=n-k+1}^n \sigma_j, \quad k = 1, 2, \dots, n$$

která je pro $\tau > 0$ upravena do tvaru

$$\sum_{j=n-k+1}^n (1 + \tau |\lambda_j|) \leq \sum_{j=n-k+1}^n (1 + \tau \sigma_j), \quad k = 1, 2, \dots, n$$

což je ekvivalentní výchozí nerovnosti.

Důkaz Lemmy. Spolu s $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n,n}$ definujme matici

$$\mathbf{A}_1 = \mathbf{A} + \rho \mathbf{x} \mathbf{y}^H,$$

kde $\rho > 0$ a $\|\mathbf{x}\| = \|\mathbf{y}\| = 1$.

Podle Lemmy 3 (položíme-li v ní $k = n$) platí pro všechna $\mu \in \mathbb{C}$

$$\prod_{j=1}^n (1 + |\mu| \cdot |\lambda_j(\mathbf{A}_1)|) \leq \prod_{j=1}^n (1 + |\mu| \cdot \sigma_j(\mathbf{A}_1))$$

a zřejmě platí i odhad

$$|\text{Det}(\mathbf{I} - \mu \mathbf{A}_1)| = \left| \prod_{j=1}^n (1 - \mu \lambda_j(\mathbf{A}_1)) \right| \leq \prod_{j=1}^n (1 + |\mu| \cdot |\lambda_j(\mathbf{A}_1)|) \leq \prod_{j=1}^n (1 + |\mu| \sigma_j(\mathbf{A}_1)).$$

Podle Lemmy 1 pro singulární čísla (seřazená v neklesající posloupnosti) matic $\mathbf{A}_1$ a $\mathbf{A}$ platí

$$\sigma_{j-1}(\mathbf{A}_1) \leq \sigma_j(\mathbf{A}), \quad 2 \leq j \leq n$$

a s ohledem na známý odhad normy součtu dvou matic bude

$$\| \mathbf{A}_1 \| = \| \mathbf{A} + \rho \mathbf{x} \mathbf{y}^H \| \leq \| \mathbf{A} \| + \| \rho \mathbf{x} \mathbf{y}^H \| = \| \mathbf{A} \| + \rho$$

protože pro $\rho > 0$ a $\| \mathbf{x} \| = \| \mathbf{y} \| = 1$ je ρ jediným (maximálním) nenulovým singulárním číslem odpovídajícím levostrannému, pravostrannému singulárnímu vektoru $\mathbf{x}$, $\mathbf{y}$ a

$$\sigma_n(\mathbf{A}_1) \leq \sigma_n(\mathbf{A}) + \rho.$$

Výraz

$$\begin{aligned} \prod_{j=1}^n (1 + |\mu| \sigma_j(\mathbf{A}_1)) &\leq (1 + |\mu| (\sigma_n(\mathbf{A}) + \rho)) \prod_{j=1}^{n-1} (1 + |\mu| \sigma_j(\mathbf{A}_1)) \\ &\leq (1 + |\mu| (\sigma_n(\mathbf{A}) + \rho)) \prod_{j=2}^n (1 + |\mu| \sigma_j(\mathbf{A})) \end{aligned}$$

jsme odhadli shora.

Výsledkem je odhad

$$\begin{aligned} |\text{Det}(\mathbf{I} - \mu(\mathbf{A} + \rho \mathbf{x} \mathbf{y}^H))| &= |\text{Det}(\mathbf{I} - \mu \mathbf{A})| \cdot |\text{Det}(\mathbf{I} - \rho \mu (\mathbf{I} - \mu \mathbf{A})^{-1} \mathbf{x} \mathbf{y}^H)| \\ &\leq (1 + |\mu| \sigma_n(\mathbf{A}) + |\mu| \rho) \prod_{j=2}^n (1 + |\mu| \sigma_j(\mathbf{A})) \end{aligned}$$

Navíc podle Lemmy 2 platí, že

$$\text{Det}(\mathbf{I} - \rho \mu (\mathbf{I} - \mu \mathbf{A})^{-1} \mathbf{x} \mathbf{y}^H) = 1 - \rho \mu \mathbf{y}^H (\mathbf{I} - \mu \mathbf{A})^{-1} \mathbf{x}$$

a s ohledem na poslední nerovnost píšeme

$$|1 - \rho \mu \mathbf{y}^H (\mathbf{I} - \mu \mathbf{A})^{-1} \mathbf{x}| \leq \frac{(1 + |\mu| \sigma_n(\mathbf{A}) + |\mu| \rho) \prod_{j=2}^n (1 + |\mu| \sigma_j(\mathbf{A}))}{|\text{Det}(\mathbf{I} - \mu \mathbf{A})|}$$

$$\text{resp.} \quad \left| \frac{1}{\rho \mu} - \mathbf{y}^H (\mathbf{I} - \mu \mathbf{A})^{-1} \mathbf{x} \right| \leq \frac{\left(\frac{1 + |\mu| \sigma_n(\mathbf{A})}{\rho |\mu|} + 1 \right) \cdot \prod_{j=2}^n (1 + |\mu| \sigma_j(\mathbf{A}))}{|\text{Det}(\mathbf{I} - \mu \mathbf{A})|}.$$

Limitní přechod $\rho \rightarrow +\infty$ vede na nerovnost

$$|\mathbf{y}^H (\mathbf{I} - \mu \mathbf{A})^{-1} \mathbf{x}| \leq \frac{\prod_{j=2}^n (1 + |\mu| \sigma_j(\mathbf{A}))}{|\text{Det}(\mathbf{I} - \mu \mathbf{A})|}.$$

Pokud nyní v poslední nerovnosti, která platí pro libovolné vektory $\mathbf{x}$, $\mathbf{y}$ s $\| \mathbf{x} \| = \| \mathbf{y} \| = 1$, zvolíme za $\mathbf{x}$, $\mathbf{y}$ pravostranný, levostranný singulární vektor odpovídající maximálnímu singulárnímu číslu matice $(\mathbf{I} - \mu \mathbf{A})^{-1}$, bude $|\mathbf{y}^H (\mathbf{I} - \mu \mathbf{A})^{-1} \mathbf{x}| = \| (\mathbf{I} - \mu \mathbf{A})^{-1} \|$ a když položíme $\mu = \frac{1}{\lambda}$ dostáváme požadovanou nerovnost Lemmy.

Poděkování. Práce vznikla v rámci Cílového projektu AV ČR č. S2076301.

6. Závěr

Všechny tři výše uvedené postupy aproximativního určení pseudospekter mají společnou vlastnost v tom, že pro nediagonalizovatelné matice nevyžadují znalost jejich Jordanovy struktury, ale pouze (přibližnou) informaci o jejich spektru. V prvním odhadovém vzorci je informace o struktuře matice nahrazena znalostí singulárních čísel, což je výhodné zejména pro matice s velkou odchylkou od normality. Další dva postupy jsou založeny na tom, že je použit klasický program pro řešení problému vlastní hodnoty diagonalizovatelné matice. Rozdíl je v tom, že v kapitole 4. z vlastních čísel, která se od sebe liší v rámci numerické přesnosti použitého programu „uměle“ vytváříme vlastní čísla násobná (a stanovíme řád polů rezolventy a posléze i odhadneme její strukturu pomocí komponentních matic), zatímco v kapitole 5. postupujeme obráceně, tak abychom mohli pracovat s blízkou maticí jednoduché struktury a využíváme toho, že matice blízké mají blízká pseudospektra.

Literatura

- [1] Godunov S.K.: Sovremennyye aspekty linějnoj algebry, NK, Novosibirsk, 1997.
- [2] Gustafson K.E., Rao D.K.M.: Numerical Range, Springer, 1997.
- [3] Trefethen L. N. (1999) Computation of Pseudospectra, Acta Numerica, 8, 247-295.
- [4] Lidskij V.B.: O summirujemosti rjadov po glavnym vektoram nėsamosopřažennyh operatorov, Trudy Mosk. matem. o., t. 11, 1962.
- [5] Macajev V.I.: Ob odnom metode ocenki rezolvent nėsamosopřažennyh operatorov, DAN, 155, No 2, 1964, 273-276.
- [6] Gohberg I.C., Krejn M.G.: Vveděnije v těoriju linějnyh nėsamosopřažennyh operatorov v Gil'bertovom prostranstve, Nauka, Moskva, 1965.
- [7] Marek I., Žitný K.: Matrix Analysis for Applied Sciences, Vol. 1, Teubner-Texte zur Mathematik, Leipzig, 1983.
- [8] Lavallée P.F., Sadkane M.: Computation od pseudospectra by spectral dichotomy methods in a parallel enviroment, Numerical Algorithms, 33, 2003, 343-355.
- [9] Grammont L., Largillier A.: On ε - pseudospectra and stability radii, Journal of Computational and Applied Mathematics, 147, 2002, 453-469.
- [10] Trefethen L.N.: Pseudospectra of linear operators, SIAM Review, 39(3), 1997, 383-406.
- [11] Trefethen L.N.: Spectral methods in MATLAB, SIAM, Philadelphia, 2000.
- [12] Godunov S.K., Sadkane M.: Computation of pseudospectra via spectral projectors, Linear Algebra and its Applications, 279, 1998, 163-175.
- [13] Tisseur F., Higham N.J.: Structured pseudospectra for polynomial eigenvalue problems, with applications, SIAM J. Matrix Anal. Appl., 23, No 1, 2001, 187-208.
- [14] Toh K.-Ch., Trefethen L.N.: Pseudozeros of polynomials and psedospectra of companion matrices, Numer. Math., 68, 1994, 403-425.
- [15] Kozánek J.: Rayleigh's Fields and Pseudospectra in Dynamics, Numerical Methods in Continuum Mechanics 2000, Liptovský Ján, Slovak Republic, 2000, 181-182.
- [16] Kozánek J., Berthelot F.: Pseudospektra a nestacionární buzení, Kolokvium Interaction and Feedbacks 2002, UT AV ČR, Praha, 2002, 51-58.
- [17] Kozánek J.: Resolvent of matrix polynomials, pseudospectra and inversion problems, Selcuk Journal of Applied Mathematics, Vol. 3, No. 1, 2002, 49-80.