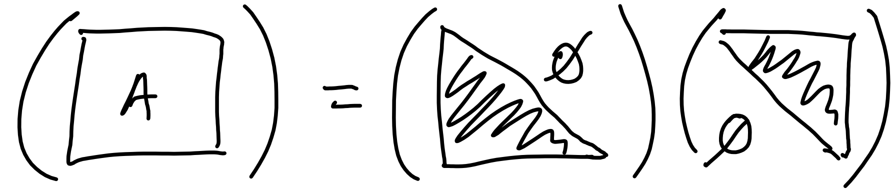
LU rozklad

$A = LU$ ← horní trojúhelníková

dolní trojúhelníková

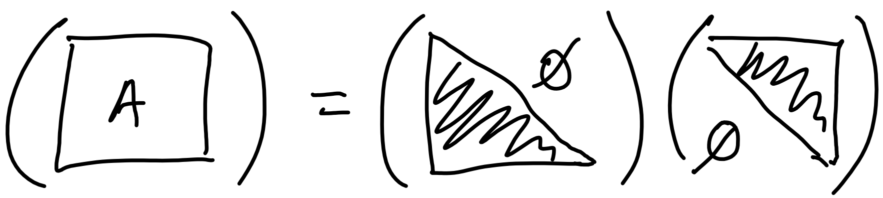


L U

$L\underbrace{(Ux)}_{y} = b$

$Ly = b$ $\xrightarrow{\text{zpětná subst.}}$ y

$Ux = y$ $\xrightarrow{\text{zpětná subst.}}$ x



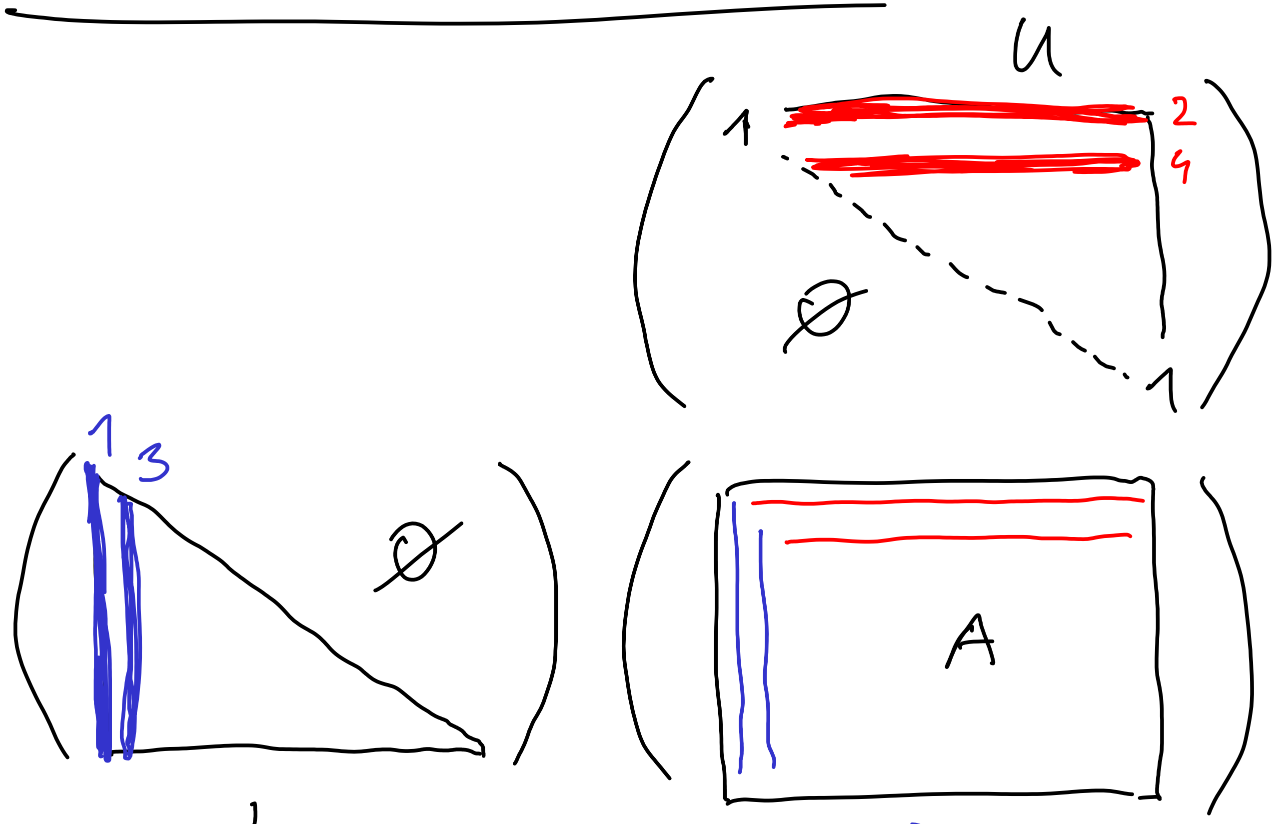
L U

na diagonále U: 1

$$A_{ij} = \sum_{k=1}^{\min(i,j)} L_{ik} U_{kj}$$

$k \le i \quad k \le j$

Croutův algoritmus LU rozkladu



1) $L_{i1} = A_{i1} \qquad i = 1 \dots N$

2) $U_{1j} = A_{1j} / L_{11}$

3) $L_{i2} = A_{i2} - L_{i1} U_{12}$

$i = 2 \dots N$

4) $U_{2j} = (A_{2j} - L_{21} U_{1j}) / L_{22}$

$j = 3 \dots N$

2n−1) $L_{in} = A_{in} - \sum_{k=1}^{n-1} L_{ik} U_{kn} \qquad i = n \dots N$

2n) $U_{nj} = (A_{nj} - \sum_{k=1}^{n-1} L_{nk} U_{kj}) / L_{nn}$

$j = n+1 \dots N$

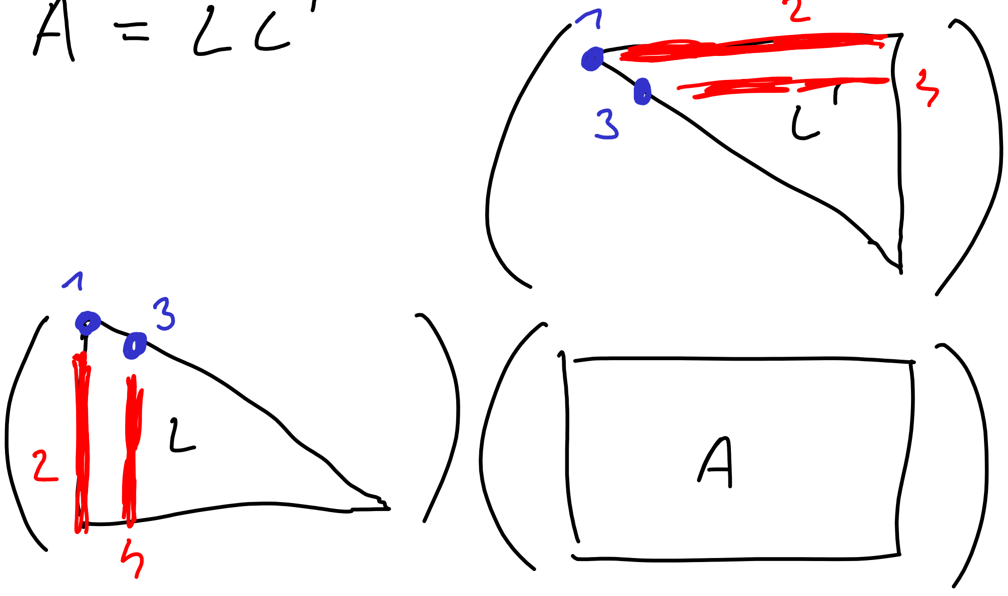
$$A_{ij} = \sum_{k=1}^{\min(i,j)} L_{ik} U_{kj}$$

$$\sum_{n=1}^{N} 2n(N-n) = \int_0^N 2x(N-x)\,dx = N^2 \cdot N - 2\frac{N^3}{3} \sim \frac{1}{3} N^3$$

Choleského rozklad

A symetrická, pozitivně definitní

$A = LL^T$



1) $L_{11} = \sqrt{A_{11}}$

2) $L_{i1} = A_{i1}/L_{11}$ $\quad i = 2 \dots N$

3) $L_{22} = \sqrt{A_{22} - L_{21}^2}$

4) $L_{i2} = (A_{i2} - L_{i1} U_{12})/L_{22}$

$i = 3 \dots N$

$\vdots$

není pozitivní definitní $\longrightarrow$ $\sqrt{}$ ze záporného čísla

- špatně podmíněný systém

A blízká singulární – $\det A$ "skoro" nula – podezřele malé číslo na diagonále L (LU) nebo ekviv. A (GEM)

Př.

$$A = \begin{pmatrix} 1.2969 & 0.8648 \\ 0.2161 & 0.1441 \end{pmatrix} \qquad b = \begin{pmatrix} 0.8642 \\ 0.1440 \end{pmatrix}$$

$$x = \begin{pmatrix} 2 \\ -2 \end{pmatrix}$$ přesné řešení

$$x = \begin{pmatrix} 0.9911 \\ -0.4870 \end{pmatrix}$$ nepřesné řešení $\qquad Ax - b = \begin{pmatrix} -10^{-8} \\ 10^{-8} \end{pmatrix}$

Vlastní problém

$A\bar{x} = \lambda \bar{x}$ A matice $N \times N$ $\rightarrow$ N vlastních čísel λ_n

N vlastních vektorů $\bar{x}_n$

reálná symetrická A:

$\rightarrow$ reálné vl. hodnoty & vl. vektory, ortogonalita $\bar{x}_m \cdot \bar{x}_n = \delta_{mn}$

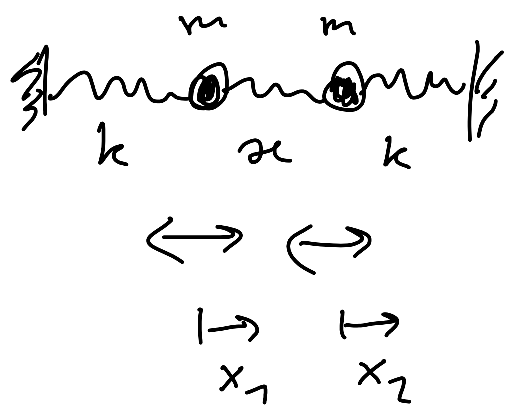
matice přechodu $T = \begin{pmatrix} | & | & & | \\ \bar{x}_1 & \bar{x}_2 & \cdots & \bar{x}_N \\ \downarrow & \downarrow & & \downarrow \end{pmatrix}$ $T^T T = \begin{pmatrix} 1 & & \\ & \ddots & \\ & & 1 \end{pmatrix}$ $T^{-1} = T^T$

$\bar{x} = T\bar{x}'$

původní báze — báze vl. vektorů

$$\Lambda = T^{-1} A T = T^T A T = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & \cancel{0} \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ \cancel{0} & & & \lambda_N \end{pmatrix}$$

Př. 1)



$$m\ddot{x}_1 = -kx_1 + \varkappa(x_2 - x_1)$$

$$m\ddot{x}_2 = -kx_2 - \varkappa(x_2 - x_1)$$

$$x_n \sim x_n^{(0)} e^{-i\omega t}$$

$$\underbrace{\begin{pmatrix} k+\varkappa & -\varkappa \\ -\varkappa & k+\varkappa \end{pmatrix}}_{A} \underbrace{\begin{pmatrix} x_1^{(0)} \\ x_2^{(0)} \end{pmatrix}}_{\bar{x}} = \underbrace{m\omega^2}_{\lambda} \underbrace{\begin{pmatrix} x_1^{(0)} \\ x_2^{(0)} \end{pmatrix}}_{\bar{x}}$$

2) $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

$$\begin{pmatrix} H \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \rightarrow$$

vl. hodnoty energie & vlastní stavy

Jacobiho metoda

$$A \rightarrow \Lambda = T^T A T \qquad T = P_1 P_2 \cdots P_n$$

P Jacobiho rotace – eliminace a_{ij}

$$\Lambda = P_n^T \cdots \left(P_2^T \left(P_1^T A P_1\right) P_2\right) \cdots P_n$$

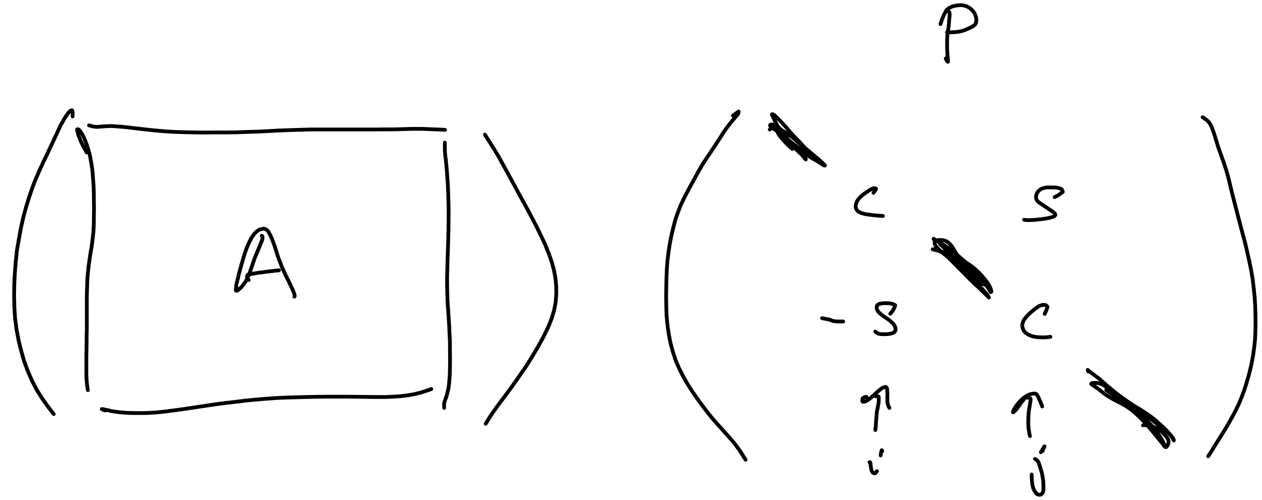
$$P = \begin{array}{cc}
\begin{pmatrix}
1 &&&&&&&&&& \\
& \ddots &&&&&&&&& \\
&& 1 &&&&&&&& \\
&&& \cos\varphi &&&& \sin\varphi &&& \\
&&&& 1 &&&&&& \\
&&&&& \ddots &&&&& \\
&&&&&& 1 &&&& \\
&&& -\sin\varphi &&&& \cos\varphi &&& \\
&&&&&&&& 1 && \\
&&&&&&&&& \ddots & \\
&&&&&&&&&& 1
\end{pmatrix} &
\begin{array}{c} \\ \\ \\ i \\ \\ \\ \\ j \\ \\ \\ \\ \end{array} \\
\begin{array}{ccccccccccc} &&& i &&&& j &&& \end{array} &
\end{array}$$

$c = \cos\varphi$

$s = \sin\varphi$

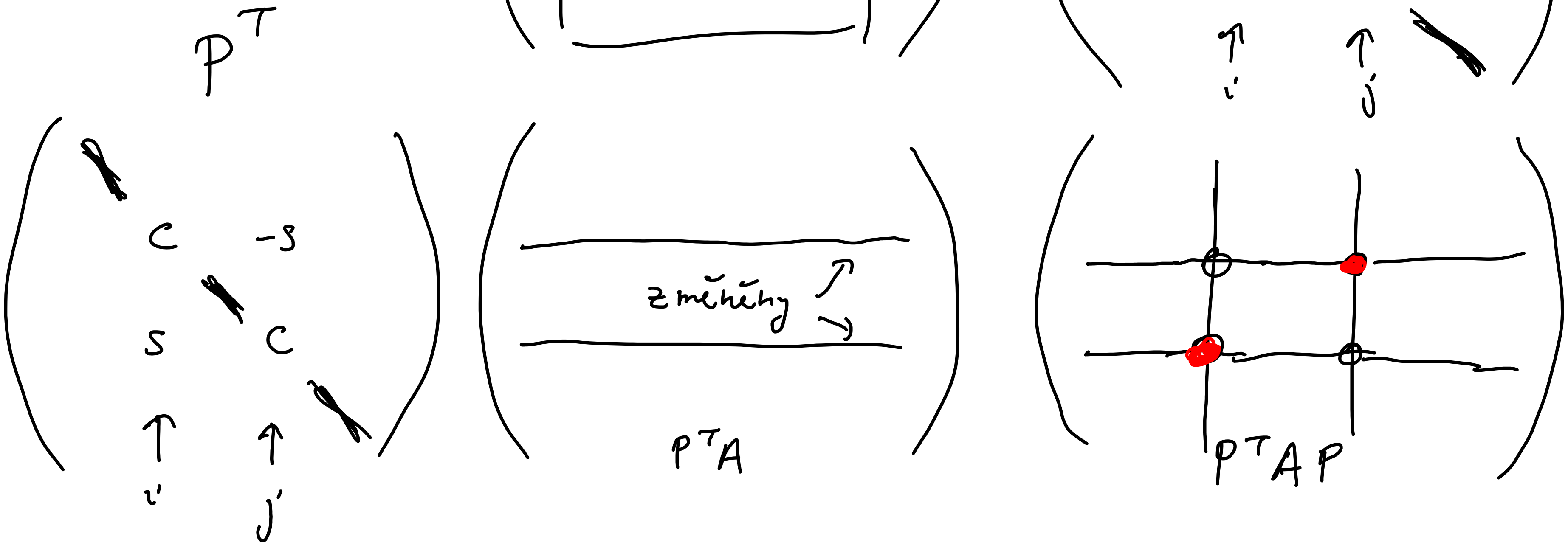
$$(P^T A)_{ik} = c\,A_{ik} - s\,A_{jk}$$

$$(P^T A)_{jk} = s\,A_{ik} + c\,A_{jk}$$



$P^TAP =$

se zmizelým a_{ij}



$$(P^TAP)_{ji} = (P^TA)_{ji}\,c - (P^TA)_{jj}\,s$$

$$(P^TA)_{ik} = c\,A_{ik} - s\,A_{jk}$$

$$(P^TA)_{jk} = s\,A_{ik} + c\,A_{jk}$$

$$(P^TAP)_{ji} = (P^TA)_{ji}\,c - (P^TA)_{jj}\,s$$

$$= (s\,A_{ii} + c\,A_{ji})\,c - (s\,A_{ij} + c\,A_{jj})\,s$$

$$= cs\,(A_{ii} - A_{jj}) + (c^2 - s^2)\,A_{ij} \quad = 0$$

$$\underbrace{2\cos\varphi\sin\varphi}_{\sin 2\varphi}\ \frac{A_{ii} - A_{jj}}{2} = -\underbrace{(\cos^2\varphi - \sin^2\varphi)}_{\cos 2\varphi}\,A_{ij}$$

$\rightarrow \quad a_{ij} \quad z\, m_i z_i'$

$$\frac{\sin 2\varphi}{\cos 2\varphi} = \frac{2A_{ij}}{A_{jj} - A_{ii}} = \tan 2\varphi$$